

распределению. Его явное выражение тесно связано с решением задачи на собственные значения для оператора A . В разделе II будут изучены свойства собственных значений и собственных функций оператора A в частном случае, когда спектр собственных значений является дискретным, а собственные функции квадратично интегрируемы. Затем вероятностный закон будет получен при помощи разложения волновой функции физической системы по полной системе собственных функций оператора A . В разделе III та же проблема рассматривается в более общем случае, когда спектр собственных значений оператора содержит область, где спектр непрерывен.

В разделе IV с формальной точки зрения рассматривается проблема нахождения волновой функции квантовой системы, если осуществлено одновременное точное измерение полного набора совместных переменных. Если такое «максимальное наблюдение» не реализовано, информация относительно динамического состояния физической системы является неполной. В этом случае исследование поведения системы может быть продолжено на основе статистических методов, причем слово «статистических» следует понимать уже в обычном смысле.

Операторы, сопоставляемые двум совместным динамическим переменным, коммутируют между собой. Если бы все операторы попарно коммутировали, то все динамические переменные могли бы быть одновременно точно определены. Эта ситуация характерна для классической теории. В квантовой механике некоторые пары динамических переменных несовместны и соответствующие коммутаторы отличны от нуля. Поэтому коммутаторы операторов играют первостепенную роль в квантовой теории. Раздел V посвящен изучению коммутаторов, явному вычислению некоторых из них, а также выводу и исследованию некоторых уравнений, в которых понятие коммутатора особенно полезно.

Раздел I. ЭРМИТОВЫ ОПЕРАТОРЫ И ФИЗИЧЕСКИЕ ВЕЛИЧИНЫ

Всякий раз, когда нам потребуется пример для иллюстрации излагаемых положений, мы будем обращаться к примерам квантовых систем в одном измерении (см. гл. III) или в трех измерениях (системы, содержащие одну частицу). Следует однако помнить, что все результаты справедливы и в общем случае квантовых систем с любым числом измерений.

§ 2. Пространство волновых функций

Волновые функции, представляющие состояние квантовой системы, принадлежат функциональному пространству, которое следует точно определить. Для того, чтобы вероятностные

распределения $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$, введенные в § IV.2, имели смысл, необходимо и достаточно, чтобы волновая функция удовлетворяла условию нормировки (IV.3). Это приводит нас к следующему определению пространства волновых функций:

волновые функции, рассматриваемые в волновой механике, являются квадратично интегрируемыми функциями в конфигурационном пространстве, т. е. функциями вида $\psi(q_1, \dots, q_R)$, такими, что интеграл $\int |\psi(q_1, \dots, q_R)|^2 d\tau$ сходится¹⁾ (здесь $d\tau$ обозначает элемент объема конфигурационного пространства: $d\tau \equiv dq_1 dq_2 \dots dq_R$).

Можно было бы еще более ограничить функциональное пространство, требуя выполнения условия нормировки на единицу (IV.3). Однако удобнее отказаться от этого ограничения. Как мы увидим ниже, это можно сделать, несколько модифицируя определения статистических распределений и вероятностей.

На языке математики определенное нами функциональное пространство называется *пространством Гильберта*. Действительно, оно обладает всеми свойствами, характеризующими пространство Гильберта. Перечислим эти свойства.

Во-первых, это *линейное пространство*. Если ψ_1 и ψ_2 квадратично интегрируемые функции, то их сумма, произведение каждой на комплексное число и вообще любые линейные комбинации вида $\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2$, где λ_1 и λ_2 — произвольные заданные комплексные числа, также являются квадратично интегрируемыми функциями.

Во-вторых, в этом пространстве можно определить *скалярное произведение*. По определению скалярное произведение функции ψ на функцию φ выражается формулой

$$\langle \varphi, \psi \rangle \equiv \int \varphi^*(q_1, \dots, q_R) \psi(q_1, \dots, q_R) d\tau. \quad (1)$$

Если скалярное произведение равно нулю, говорят, что функции φ и ψ *ортогональны*. Норма N_ψ функции ψ есть скалярное произведение функции на себя

$$N_\psi \equiv \langle \psi, \psi \rangle.$$

Основные свойства скалярного произведения таковы:

а) скалярное произведение φ на ψ есть величина, комплексно сопряженная скалярному произведению ψ на φ , именно

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle^*; \quad (2)$$

¹⁾ Преобразование Фурье $\varphi(p_1, \dots, p_R)$ такой функции всегда существует: это тоже квадратично интегрируемая функция, обладающая той же нормой, что и функция $\psi(q_1, \dots, q_R)$. Вообще соответствие между φ и ψ является взаимнооднозначным, если условиться считать тождественными функции, отличающиеся значениями только на множестве меры нуль, что мы и будем делать в дальнейшем (см. Дополнение А).

б) скалярное произведение ψ на φ линейно по ψ , иными словами

$$\langle \varphi, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \varphi, \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi, \psi_2 \rangle \quad (3)$$

в) норма функции ψ есть неотрицательное вещественное число

$$\langle \psi, \psi \rangle \geq 0 \quad (4)$$

и если $\langle \psi, \psi \rangle = 0$, то $\psi = 0$.

Все эти свойства становятся очевидными, если обратиться к самому определению скалярного произведения. Пользуясь свойствами а) и б), легко видеть, что зависимость скалярного произведения $\langle \varphi, \psi \rangle$ от функции φ не линейна, но «антилинейна»:

$$\langle \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2, \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \varphi_1, \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2, \psi \rangle. \quad (3')$$

Из свойств а), б) и в) следует очень важное свойство скалярного произведения, а именно *неравенство Шварца* (см. задачу 1)

$$|\langle \varphi, \psi \rangle| \leq \sqrt{\langle \varphi, \varphi \rangle \langle \psi, \psi \rangle}. \quad (5)$$

Знак равенства в формуле (5) имеет место в том и только в том случае, когда функции φ и ψ пропорциональны друг другу. Неравенство Шварца очевидно, обеспечивает сходимость интеграла (1), если функции φ и ψ являются квадратично интегрируемыми.

Помимо свойства линейности и возможности определения скалярного произведения пространство квадратично интегрируемых функций обладает еще свойством *полноты*; именно это обстоятельство позволяет отождествить его с пространством Гильберта. Это свойство полноты означает, что всякая последовательность квадратично интегрируемых функций, удовлетворяющая критерию Коши, сходится (в смысле среднего квадратичного) к квадратично интегрируемой функции. Обратно, всякая квадратично интегрируемая функция может рассматриваться как предел (в смысле среднего квадратичного) последовательности квадратично интегрируемых функций, сходящейся в смысле Коши (*сепарабельность*)³⁾.

²⁾ Строго говоря, функция ψ может принимать значения, отличные от нуля на множестве значений аргументов меры нуль. По соглашению, упомянутому в сноске 1), такие функции не отличаются от нуля.

³⁾ Строгое и детальное исследование пространства Гильберта можно найти в книге: *M. H. Stone, Linear transformations in Hilbert Space, Amer. Math. Soc. (New-York, 1932)*. Основные свойства пространства Гильберта рассматриваются в книгах: *A. Lichnerowicz, Algebre et Analyse Linéaire, Masson (Paris, 1947)*; *И. фон Нейман, Математические основы квантовой механики, «Наука», 1964*. Понятие сходимости в смысле среднего квадратичного определяется в Дополнении А, сноски 4).

§ 3. Определение средних значений

В § IV.5 каждой динамической переменной вида $F(\mathbf{r})$ или $G(\mathbf{p})$ мы сопоставили некоторый линейный оператор A , соответственно равный $F(\mathbf{r})$ или $G(-i\hbar\nabla)$; кроме того, было указано — это следовало из определений $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$, — что среднее значение каждой динамической переменной определяется выражением (IV.22), которое в новых обозначениях может быть записано в виде $\langle\Psi, A\Psi\rangle$. Если волновая функция не нормирована на единицу, то выражения (IV.2) и (IV.6) для $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$ должны быть разделены на норму $\langle\Psi, \Psi\rangle$ волновой функции и тогда выражение для среднего значения принимает вид $\langle\Psi, A\Psi\rangle/\langle\Psi, \Psi\rangle$.

Все это можно обобщить на случай произвольной динамической переменной. Постулируем, что:

а) Любой динамической переменной $\mathcal{A} = A(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R)$ сопоставляется линейный оператор

$$A\left(q_1, \dots, q_R; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_R}\right).$$

б) Если система находится в динамическом состоянии, определяемом волновой функцией $\Psi(q_1, \dots, q_R)$, то среднее значение динамической переменной есть

$$\langle A \rangle = \frac{\langle\Psi, A\Psi\rangle}{\langle\Psi, \Psi\rangle}. \quad (6)$$

Соответствие между классической функцией Гамильтона и гамильтонианом уравнения Шредингера (§ II.15) является частным случаем соответствия а) между динамическими переменными и линейными операторами. Замечания, сделанные в § II.15 по поводу этого соответствия, имеют силу и в общем случае. Следует иметь в виду, что координаты q являются декартовыми координатами. Далее, в самом определении оператора A имеется некоторая неопределенность, связанная с тем, что, используя принцип соответствия, мы заменяем величины, для которых справедливы законы обычной алгебры, операторами, которые, вообще говоря, могут не коммутировать; на практике эта неопределенность снимается в соответствии с эмпирическими правилами, указанными на стр. 77.

Если динамическая переменная \mathcal{A} представляет физическую величину, то она является вещественной функцией q и p ; все результаты измерения \mathcal{A} , а следовательно и среднее значение $\langle A \rangle$ также являются вещественными. Таким образом, $\langle\Psi, A\Psi\rangle$ есть вещественная величина

$$\langle\Psi, A\Psi\rangle = \langle A\Psi, \Psi\rangle, \quad (7)$$

каким бы ни было динамическое состояние системы, т. е. какой бы ни была волновая функция Ψ . Иначе говоря (ср. стр. 123), оператор A должен быть эрмитовым (или самосопряженным). Нетрудно видеть, и мы это констатируем во всех встречающихся примерах, что поскольку операторы q_i и $-\hbar\partial/\partial q_i$ являются эрмитовыми, по принципу соответствия (а) любой вещественной динамической переменной всегда можно сопоставить эрмитов оператор; правило «симметризации» на стр. 77 и было сформулировано для этой цели.

Свойства эрмитовых операторов будут систематически изучены в § 5 и далее. Укажем уже сейчас одно важное свойство этих операторов. Если оператор A эрмитов, то среднее значение переменной \mathcal{A} , вычисленное с помощью линейной комбинации $\Phi + \lambda\Psi$ двух функций Φ и Ψ из функционального пространства, в котором действует оператор A , есть величина вещественная. Следовательно, выражение

$$\begin{aligned} \langle \Phi + \lambda\Psi, A(\Phi + \lambda\Psi) \rangle &= \\ &= \langle \Phi, A\Phi \rangle + \lambda \langle \Phi, A\Psi \rangle + \lambda^* \langle \Psi, A\Phi \rangle + |\lambda|^2 \langle \Psi, A\Psi \rangle \end{aligned}$$

вещественно. Это должно быть так для любого значения комплексного числа λ . Ввиду того, что $\langle \Phi, A\Phi \rangle$ и $\langle \Psi, A\Psi \rangle$ являются вещественными величинами, мы делаем заключение, что

$$e^{i\alpha} \langle \Phi, A\Psi \rangle + e^{-i\alpha} \langle \Psi, A\Phi \rangle,$$

где α — фаза комплексного числа λ , есть величина вещественная. Иными словами,

$$e^{i\alpha} (\langle \Phi, A\Psi \rangle - \langle A\Phi, \Psi \rangle) = e^{-i\alpha} (\langle A\Psi, \Phi \rangle - \langle \Psi, A\Phi \rangle)$$

и, поскольку это уравнение должно выполняться при любых α , находим, что величины в скобках в обеих частях равенства равны нулю. Таким образом, если Φ и Ψ являются функциями из функционального пространства, в котором определен оператор A , то

$$\langle \Phi, A\Psi \rangle = \langle A\Phi, \Psi \rangle \quad (8)$$

или, что то же самое;

$$\langle \Phi, A\Psi \rangle = \langle \Psi, A\Phi \rangle^*. \quad (8')$$

Равенство (8') часто рассматривается как определение эрмитовости оператора A .

Постулаты а) и б) позволят нам определить статистическое распределение значений физической величины \mathcal{A} . Конец этого раздела и два последующих посвящены этой задаче.

§ 4. Отсутствие флуктуаций и проблема собственных значений

Флуктуации искомого статистического распределения определяются величиной среднего квадратичного отклонения ΔA

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \geq 0$$

(величина A^2 является динамической переменной того же рода, что и A , поэтому ее среднее значение дается постулатом б)). Когда отклонение ΔA равно нулю, флуктуации отсутствуют, и можно с определенностью утверждать, что \mathcal{A} принимает значение, равное $\langle A \rangle$.

Выясним, какие требования на функцию Ψ накладывает условие $\Delta A = 0$. Применяя определение (6) к средним значениям операторов A и A^2 , можно привести условие к виду

$$\langle \Psi, A^2 \Psi \rangle \langle \Psi, \Psi \rangle = \langle \Psi, A \Psi \rangle^2.$$

Однако величина $\langle \Psi, A^2 \Psi \rangle \langle \Psi, \Psi \rangle \equiv \langle \Psi, A(A\Psi) \rangle$ равна $\langle A\Psi, A\Psi \rangle$. Для доказательства достаточно применить свойство (8) эрмитового оператора A к функциям Ψ и $A\Psi$. Таким образом, имеем

$$\langle \Psi, A\Psi \rangle^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle \langle A\Psi, A\Psi \rangle.$$

Следовательно, мы находимся в ситуации, когда неравенство Шварца сводится к равенству, поэтому функции Ψ и $A\Psi$ пропорциональны друг другу. Флуктуации статистического распределения \mathcal{A} обращаются в нуль для динамических состояний Ψ_a таких, что

$$A\Psi_a = a\Psi_a, \quad (9)$$

где a — некоторая постоянная.

Уравнение (9) есть уравнение задачи на собственные значения для оператора A . Примером такого уравнения является уже рассмотренное нами уравнение Шредингера, не зависящее от времени. Таким образом, мы приходим к заключению:

Физическая величина \mathcal{A} обладает с достоверностью (т. е. с вероятностью, равной 1) определенным значением в том и только в том случае, когда динамическое состояние физической системы представляется функцией Ψ_a , т. е. собственной функцией эрмитового оператора, сопоставляемого \mathcal{A} , и это значение есть собственное значение оператора, соответствующее данной собственной функции.

Сказанное справедливо, в частности, по отношению к энергии $H(q_i; p_i)$ системы. Соответствующий оператор — гамильтониан Шредингера — действительно сопоставлялся энергии системы, когда мы рассматривали уравнение Шредингера, не зависящее от времени (гл. II, раздел III). Тогда мы приняли, что энергия системы принимает вполне определенное значение E , когда си-

стема находится в стационарном состоянии, а ее волновая функция есть собственная функция оператора H , соответствующая собственному значению E ; все это полностью согласуется с общими постулатами, введенными в этом параграфе.

Во всех рассуждениях, приведших нас к уравнению (9), предполагалось, что функции Ψ , $A\Psi$, $A^2\Psi$, входящие в скалярные произведения, принадлежат пространству Гильберта. Само уравнение (9) предполагает, что неизвестная функция должна быть квадратично интегрируемой.

Однако при такой постановке задача на собственные значения вполне может и не иметь решений. Именно так обстоит дело в случае уже рассмотренных операторов q_i и $-i\hbar\partial/\partial q_i$. Действительно, исследуем задачи на собственные значения для этих двух операторов в случае системы в одном измерении. Для оператора q имеем

$$(q - q')\psi(q) = 0,$$

что возможно только если $\psi(q)$ равна нулю всюду, кроме точки $q = q'$. Не существует ни одного квадратично интегрируемого решения, удовлетворяющего такому условию; искомое решение должно было бы быть очень странной функцией, равной нулю всюду, кроме одной точки. Мы вернемся к этому вопросу в § 8. Для оператора $-i\hbar\partial/\partial q_i$ задача на собственные значения имеет вид

$$-i\hbar \frac{d}{dq} \psi(q) = p' \psi(q).$$

Она имеет единственное решение, определенное с точностью до постоянного множителя, каким бы ни было значение p' : им является функция $e^{ip'q/\hbar}$. Это решение не является квадратично интегрируемым.

Мы видим, что для двух рассмотренных операторов указанная выше постановка задачи на собственные значения не имеет смысла. Чтобы получить достаточно общие результаты, следует рассматривать решения задачи на собственные значения (9), не являющиеся квадратично интегрируемыми. Ранее мы уже исследовали одно уравнение на собственные значения частного вида, а именно уравнение Шредингера для одномерных систем (см. гл. III), и можем основываться на результатах этого исследования. Спектр собственных значений гамильтониана Шредингера в общем случае состоит из двух частей: ряда дискретных собственных значений, собственные функции которых имеют конечную норму, и непрерывного спектра собственных значений, собственные функции которого ограничены во всем пространстве, но имеют бесконечную норму. Путем суперпозиции собственных функций непрерывного спектра, принадлежащих

седним значениям энергии, можно построить квадратично интегрируемые функции, соответствующие энергии, которая, как это подсказывает интуиция, если и не имеет точного значения, то во всяком случае определяется со сколь угодно малой квадратичной ошибкой.

Уточним это утверждение, возвращаясь к обозначениям § III.13. Исходя из собственной функции $y(x; \varepsilon)$, принадлежащей собственному значению ε непрерывного спектра оператора H

$$Hy(x; \varepsilon) = \varepsilon y(x; \varepsilon), \quad (10)$$

мы строим «собственный дифференциал»⁴⁾

$$Y_\varepsilon(x; \delta\varepsilon) = (\delta\varepsilon)^{-1/2} \int_\varepsilon^{\varepsilon+\delta\varepsilon} y(x; \varepsilon') d\varepsilon'. \quad (11)$$

Это — квадратично интегрируемая функция, и вычисленные с ее помощью величины $\langle H \rangle$ и ΔH имеют вполне определенный смысл. Пользуясь уравнениями (10) и (11), легко видеть, что

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{\langle Y_\varepsilon, HY_\varepsilon \rangle}{\langle Y_\varepsilon, Y_\varepsilon \rangle} \underset{\delta\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \varepsilon + O(\delta\varepsilon), \\ \langle H^2 \rangle &= \frac{\langle Y_\varepsilon, H^2 Y_\varepsilon \rangle}{\langle Y_\varepsilon, Y_\varepsilon \rangle} \underset{\delta\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \varepsilon^2 + \varepsilon O(\delta\varepsilon). \end{aligned}$$

Следовательно, квадратичное отклонение $\Delta H \equiv \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}$ при $\delta\varepsilon \rightarrow 0$ ведет себя как $(\varepsilon\delta\varepsilon)^{1/2}$. Оно может быть сделано сколь угодно малым. Этот результат может быть выражен следующим образом.

С помощью суперпозиции собственных функций (с бесконечной нормой), принадлежащих собственным значениям, лежащим в ограниченной области $(\alpha, \alpha + \delta\alpha)$ непрерывного спектра оператора A (если он существует), можно построить квадратично интегрируемые функции, причем квадратичное отклонение распределения значений A от среднего значения ($\approx \alpha + O(\delta\alpha)$) может быть сделано сколь угодно малым, если выбрать достаточно малыми размеры $\delta\alpha$ области.

Ясно, что задача на собственные значения, выражаемая уравнением (9), должна играть фундаментальную роль не только в области дискретного спектра, но также и в области непрерывного спектра, когда собственные функции уже не принадлежат пространству Гильберта. Займемся поэтому систематическим изучением этой задачи на собственные значения.

⁴⁾ Множитель $(\delta\varepsilon)^{-1/2}$ вводится в определение «собственного дифференциала» для того, чтобы норма оставалась конечной при $\delta\varepsilon \rightarrow 0$.