Раздел III. СТАТИСТИКА ИЗМЕРЕНИЙ В ОБЩЕМ СЛУЧАЕ

§ 8. Трудности описания непрерывного спектра. Введение δ-функции Дирака

Все полученные нами результаты теряют свою силу, если система функций $\{\varphi_p^{(r)}\}$ не является полной. Мы видели, что это далеко не исключительный случай. Однако обсуждение в § 4 указывает на возможный путь расширения области применимости развитой теории. На этом пути мы по-прежнему будем исходить из уравнения на собственные значения (9), не накладывая однако на решения строгого требования принадлежности к пространству Гильберта. Но для этого нам потребуется распространить на решения, не имеющие конечной нормы, понятия ортогональности и нормировки.

Рассмотрим два примера, относящиеся к одномерным системам: определение статистических распределений по положению и по импульсу. В этом случае статистические распределения известны, что поможет провести формальное расширение результатов предыдущего параграфа. Координата q может принимать все возможные значения в интервале $(-\infty, +\infty)$, причем вероятность найти q в интервале $(q', q' + dq')$ равна

$$P(q')\,dq' = |\psi(q')|^2\,dq', \tag{22}$$

где $\psi(q)$ есть волновая функция (по предположению нормированная на единицу), представляющая динамическое состояние физической системы. С другой стороны, импульс p, представляемый оператором $-i\hbar\,d/dq$, может принимать все возможные значения в интервале $(-\infty, +\infty)$, и вероятность найти p в интервале $(p', p' + dp')$ равна

$$\Pi(p')\,dp' = |\varphi(p')|^2\,dp', \tag{23}$$

где $\varphi(p)$ — подходящим образом нормированный образ Фурье волновой функции $\psi(q)$.

В обоих случаях спектр возможных значений рассматриваемых величин является непрерывным. В этом и состоит основное отличие от ситуации, изученной выше, когда мы имели дискретный спектр и возможность представить всякую волновую функцию ψ в виде ряда (см. уравнения (14) или (20)), каждый член которого соответствует одному из возможных значений из этого спектра. Естественным обобщением на случай непрерывного спектра является представление волновой функции не в форме ряда, а в форме интеграла.

С формальной точки зрения в случае полностью дискретного спектра ход рассуждений был таков.

Эрмитов оператор A обладает рядом дискретных собственных значений, которые мы ради простоты будем считать невырожденными. Каждому собственному значению a_n соответствует собственная функция φ_n (определяемая с точностью до фазы), причем

$$A\varphi_n = a_n\varphi_n, \tag{24}$$

$$\langle\varphi_n, \varphi_{n'}\rangle = \delta_{nn'}. \tag{25}$$

Поскольку ортонормированная система $\{\varphi_n\}$ полна, всякая функция (по предположению нормированная на единицу) может быть представлена рядом

$$\psi = \sum_n c_n\varphi_n, \tag{26}$$

где, вследствие условий ортонормированности (25),

$$\langle\varphi_n, \psi\rangle = \sum_{n'} c_{n'}\langle\varphi_n, \varphi_{n'}\rangle = c_n. \tag{27}$$

Используя те же соотношения, для характеристической функции находим

$$\langle\psi, e^{i\xi A}\psi\rangle = \sum_{n,\,n'} c_n^* c_{n'} e^{i\xi a_{n'}}\langle\varphi_n, \varphi_{n'}\rangle = \sum_n |c_n|^2 e^{i\xi a_n}, \tag{28}$$

откуда делается вывод, что вероятность того, что A принимает значение a_n, равна квадрату модуля коэффициента при φ_n в разложении (26), т. е. $|c_n|^2$.

Действуя по аналогии, обозначим с помощью $u(p'; q)$ собственную функцию оператора $p = -i\hbar d/dq$, принадлежащую собственному значению p':

$$pu(p'; q) \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dq}u(p'; q) = p'u(p'; q). \tag{24'}$$

Продолжая формальную аналогию, представим волновую функцию $\psi(q)$ в виде интеграла по формуле

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p')\,u(p'; q)\,dp'.$$

Здесь $|c(p')|^2 dp'$ должно быть вероятностью того, что p находится в интервале $(p', p'+dp')$. Поэтому необходимо, чтобы $|c(p')|^2 = |\varphi(p')|^2$, т. е. чтобы $c(p')$ было равным $\varphi(p')$ с точностью до фазового множителя. Поскольку собственная функция сама по себе определяется только с точностью до произвольного постоянного комплексного множителя, можно всегда выбрать его так, чтобы аналог уравнения (26) принял форму

$$\psi(q)=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\,u(p';\ q)\,dp'. \tag{26'}$$

Коэффициент $\varphi(p')$, принадлежащий собственному значению p', по формуле, обобщающей соотношение (27), должен быть равен

$$\varphi(p')=\langle u(p';\ q),\ \psi(q)\rangle,$$

что при подстановке, вместо $\psi(q)$, интегрального представления (26′) дает

$$\varphi(p')=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')\left\langle u_{p'},\ u_{p''}\right\rangle dp''. \tag{29}$$

Здесь мы используем сокращенное обозначение $u_{p'}$ для функции, являющейся собственной функцией, принадлежащей собственному значению p'. Соотношение (29) должно выполняться для любой волновой функции $\varphi(p')$ в пространстве импульсов (единственное ограничение на эту функцию состоит в том, что она должна быть квадратично интегрируемой); это свойство $\langle u_{p'}, u_{p''}\rangle$ обобщает соотношение ортонормированности (25).

Не существует регулярных функций от p' и p'', которые могли бы удовлетворять соотношению (29). Однако, если не очень заботиться о математической строгости[7]), можно, следуя Дираку, ввести «сингулярную функцию» $\delta(x)$, определяемую следующим свойством:

$$\int_a^b f(x)\,\delta(x-x_0)\,dx=$$

$$=\begin{cases} f(x_0), & \text{если } x_0 \text{ лежит внутри интервала } (a,\ b),\\ 0, & \text{если } x_0 \text{ лежит вне интервала } (a,\ b)\end{cases} \tag{30}$$

для всякой функции $f(x)$, непрерывной в точке $x=x_0$.

Уравнение (29) удовлетворяется, если

$$\left\langle u_{p'},\ u_{p''}\right\rangle=\delta(p'-p''), \tag{25'}$$

[7]) Мы уже нарушили требования математической строгости, когда написали уравнение (29). Правильная форма уравнения имеет вид

$$\varphi(p')=\left\langle u_{p'},\ \int\varphi(p'')\,u_{p''}\,dp''\right\rangle.$$

Чтобы получить отсюда уравнение (29), следует поменять порядок интегрирования внутри скалярного произведения и интегрирования по p''. Эта операция, конечно, не является математически строгой, так как скалярное произведение $\langle u_{p'},\ u_{p''}\rangle$ расходится форму

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p')\, u(p';\ q)\, dp'. \tag{26'}$$

Коэффициент $\varphi(p')$, принадлежащий собственному значению p', по формуле, обобщающей соотношение (27), должен быть равен

$$\varphi(p') = \langle u(p';\ q),\ \psi(q)\rangle,$$

что при подстановке, вместо $\psi(q)$, интегрального представления (26') дает

$$\varphi(p') = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p'') \langle u_{p'},\ u_{p''}\rangle\, dp''. \tag{29}$$

Здесь мы используем сокращенное обозначение $u_{p'}$ для функции, являющейся собственной функцией, принадлежащей собственному значению p'. Соотношение (29) должно выполняться для любой волновой функции $\varphi(p')$ в пространстве импульсов (единственное ограничение на эту функцию состоит в том, что она должна быть квадратично интегрируемой); это свойство $\langle u_{p'}, u_{p''}\rangle$ обобщает соотношение ортонормированности (25).

Не существует регулярных функций от p' и p'', которые могли бы удовлетворять соотношению (29). Однако, если не очень заботиться о математической строгости[7]), можно, следуя Дираку, ввести «сингулярную функцию» $\delta(x)$, определяемую следующим свойством:

$$\int_a^b f(x)\, \delta(x - x_0)\, dx = \begin{cases} f(x_0), & \text{если } x_0 \text{ лежит внутри интервала } (a,\ b), \\ 0, & \text{если } x_0 \text{ лежит вне интервала } (a,\ b) \end{cases} \tag{30}$$

для всякой функции $f(x)$, непрерывной в точке $x = x_0$.

Уравнение (29) удовлетворяется, если

$$\langle u_{p'},\ u_{p''}\rangle = \delta(p' - p''), \tag{25'}$$

[7]) Мы уже нарушили требования математической строгости, когда написали уравнение (29). Правильная форма уравнения имеет вид

$$\varphi(p') = \left\langle u_{p'},\ \int \varphi(p'')\, u_{p''}\, dp'' \right\rangle.$$

Чтобы получить отсюда уравнение (29), следует поменять порядок интегрирования внутри скалярного произведения и интегрирования по p''. Эта операция, конечно, не является математически строгой, так как скалярное произведение $\langle u_{p'},\ u_{p''}\rangle$ расходится

Собственные функции $u_{p'}$ образуют полную систему, так как всякая квадратично интегрируемая функция $\psi(q)$ может быть представлена в форме

$$\psi(q)=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\frac{e^{ip'q/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,dp',$$

т. е. в виде интеграла Фурье. Коэффициент $\varphi(p')$ этого «разложения по собственным функциям» равен скалярному произведению $\langle u_{p'},\ \psi\rangle$. Действительно,

$$\langle u_{p'},\ \psi\rangle=\left\langle u_{p'},\ \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')u_{p''}\,dp''\right\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')\langle u_{p'},\ u_{p''}\rangle\,dp''=$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')\,\delta(p'-p'')\,dp''=\varphi(p').$$

Итак, используя обобщенные соотношения ортонормированности, мы получили известное свойство взаимности преобразования Фурье.

Продолжая аналогию со случаем дискретного спектра, введем оператор $e^{i\xi p}$. Имеем

$$e^{i\xi p}u(p';\ q)=e^{i\xi p'}u(p';\ q),$$

следовательно,

$$e^{i\xi p}\psi(q)=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\,e^{i\xi p'}u(p';\ q)\,dp',$$

откуда получаем характеристическую функцию

$$f(\xi)=\langle\psi,\ e^{i\xi p}\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(p'')\,dp''\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\xi p'}\varphi(p')\,dp'\,\langle u_{p''},\ u_{p'}\rangle=$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(p'')\,dp''\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\xi p'}\varphi(p')\,dp'\,\delta(p'-p'')=\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(p')|^2e^{i\xi p'}\,dp'.$$

Соответствующее статистическое распределение (см. сноску [6])) и есть искомое распределение (23).

Обсуждение измерения координаты может быть проведено по той же схеме. Собственной функцией, принадлежащей собственному значению q' уравнения на собственные значения оператора q с правильной нормировкой, является $\delta(q'-q)$. Действительно по уравнению (A.19)

$$q\delta(q'-q)=q'\delta(q'-q).$$

Совокупность функций $\delta(q'-q)$, где q' может принимать все возможные значения от $-\infty$ до $+\infty$, образует ортонормированную систему, так как (см. уравнение (А.21))

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(q-q')\,\delta(q-q'')\,dq = \delta(q'-q''),$$

и эта система является полной, ибо всякая волновая функция $\psi(q)$ может быть представлена в интегральной форме

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(q')\,\delta(q'-q)\,dq. \tag{32}$$

Легко проверить, что коэффициент $\psi(q')$ равен скалярному произведению $\langle\delta(q'-q), \psi(q)\rangle$. Аналогично находим, что квадрат модуля этого коэффициента, т. е. $|\psi(q')|^2$, действительно равен плотности вероятности того, что $q = q'$ в согласии с уравнением (22).

§ 9. Разложение по собственным функциям в общем случае. Условие замкнутости

Вернемся вновь к уравнению (9) на собственные значения

$$A\psi = a\psi.$$

Здесь мы уже не будем предполагать, что собственные решения уравнения имеют ограниченную норму. Потребуем только, чтобы скалярные произведения этих решений на произвольную волновую функцию (т. е. на любую функцию с ограниченной нормой) были ограничены.

В самом общем случае множество собственных значений задачи может содержать:

1°. Дискретный спектр значений a_n, которые образуют либо конечное множество, либо бесконечное, но счетное множество и могут быть перенумерованы дискретным целым индексом n.

2°. Непрерывный спектр значений $a(\nu)$, которые нумеруются непрерывным индексом ν, изменяющимся в некоторой области.

Собственные функции дискретного спектра имеют конечную норму. Все свойства дискретного спектра были изучены в § 5, и мы не будем к этому возвращаться.

Пусть $\psi(\nu; q_1, \ldots, q_R)$ — собственная функция непрерывного спектра, принадлежащая собственному значению $a(\nu)$. Это непрерывная функция параметра ν, норма которой, очевидно, неограничена («вектор бесконечной длины» в функциональном пространстве). Однако будем предполагать, что собственный дифференциал

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta\nu}} \int_{\nu}^{\nu+\Delta\nu} \psi(\nu'; q_1, \ldots, q_R)\,d\nu'$$

является функцией с ограниченной нормой, которая стремится к некоторой постоянной, когда $\Delta\nu$ стремится к нулю. Мы знаем, что собственные функции непрерывного спектра гамильтониана физической системы в одном измерении обладают этим свойством (ср. гл. III); нетрудно проверить, что собственные функции операторов q и $-i\hbar\, d/dq$ предшествующего параграфа также обладают этим свойством.

Часто говорят, что функция *нормируема*, если она обладает ограниченной нормой. Мы будем применять этот термин также и к функциям с бесконечной нормой, если собственный дифференциал, образованный из этих функций, имеет конечную норму. Таким образом, собственные функции непрерывного спектра нормируемы (в указанном смысле), хотя они и не принадлежат пространству Гильберта.

Пользуясь соотношением (8) (которое имеет смысл только для квадратично интегрируемых Φ и Ψ), но применяя его не к собственным функциям как таковым, а к собственным дифференциалам, можно получить основные свойства непрерывного спектра и сопоставить их тем, которые были получены в § 5 для дискретного спектра:

1°. Всякое собственное значение $a(\nu)$ вещественно.

2°. Две собственные функции, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны друг другу. Это свойство ортогональности должно быть обобщением соотношения (III. 42′). Неверно было бы писать

$$\langle \psi_\nu,\ \psi_{\nu'} \rangle = 0,$$

так как скалярное произведение $\langle \psi_\nu, \psi_{\nu'} \rangle$, вообще говоря, расходится. Однако имеем

$$\left\langle \psi_\nu,\ \frac{1}{\sqrt{\Delta\nu'}} \int\limits_{\nu'}^{\nu'+\Delta\nu'} \psi_{\nu''}\, d\nu'' \right\rangle = 0,$$

если ν находится вне интервала $(\nu',\ \nu' + d\nu')$. Доказательство не трудно, и мы предоставляем его читателю.

Если собственные значения непрерывного спектра невырождены, всегда можно нормировать функции так, чтобы

$$\langle \psi_\nu,\ \psi_{\nu'} \rangle = \delta(\nu - \nu').$$

Случай вырожденных собственных значений также не представляет существенных трудностей. Ограничимся формулировкой результатов. Каждому собственному значению принадлежит в зависимости от характера вырождения либо конечное, либо бесконечное (счетное или континуальное) множество линейно независимых собственных функций. Эти функции можно снабдить либо индексом, принимающим конечное число значений, либо одним или несколькими индексами, принимающими бесконечное число дискретных значений, либо одним или несколькими индексами, изменяющимися непрерывно, либо даже некоторым числом дискретных индексов и некоторым числом непрерывных. Предположим для определенности, что необходимо использовать один дискретный индекс r и один индекс ρ, меняющийся непрерывно.

Всегда можно сделать так, чтобы собственные функции $\varphi^{(r)}(\nu, \rho)$ были ортонормированными в обобщенном смысле:

$$\langle \varphi^{(r)}(\nu, \rho), \varphi^{(r')}(\nu', \rho') \rangle = \delta_{rr'} \delta(\rho - \rho') \delta(\nu - \nu'). \tag{33}$$

Будучи присоединены к ортонормированным собственным функциям дискретного спектра $\varphi_n^{(r)}$, они вместе образуют ортонормированную систему собственных функций эрмитового оператора A; всякая собственная функция оператора A может быть представлена как линейная комбинация функций этой системы.

Предположим, что некоторая волновая функция Ψ представима в виде ряда по этим функциям, т. е.

$$\Psi = \sum_{n, r} c_n^{(r)} \varphi_n^{(r)} + \sum_r \int \gamma^{(r)}(\nu, \rho) \varphi^{(r)}(\nu, \rho) \, d\nu \, d\rho. \tag{34}$$

Коэффициенты при каждой функции в этом разложении получаются при умножении (скалярном) обеих частей равенства слева на соответствующую собственную функцию; учитывая соотношения ортонормированности, получаем

$$c_n^{(r)} = \langle \varphi_n^{(r)}, \Psi \rangle, \tag{35а}$$

$$\gamma^{(r)}(\nu, \rho) = \langle \varphi^{(r)}(\nu, \rho), \Psi \rangle. \tag{35б}$$

С помощью тех же соотношений получаем обобщенное равенство Парсеваля

$$\langle \Psi, \Psi \rangle = \sum_{n, r} | c_n^{(r)} |^2 + \sum_r \int | \gamma^{(r)}(\nu, \rho) |^2 \, d\nu \, d\rho. \tag{36}$$

Если такое представление возможно для всех волновых функций (т. е. для всех квадратично интегрируемых функций), то говорят, что система $\{\varphi\}$ является *полной ортонормированной системой* функций.

Существует простой способ выразить тот факт, что ортонормированная система является полной: следует записать разложение (34) для функции

$$\delta(q - q') \equiv \delta(q_1 - q_1') \, \delta(q_2 - q_2') \, \ldots \, \delta(q_R - q_R').$$

Коэффициенты такого разложения получатся, если в выражениях (35)—(36) вместо функции $\Psi(q) \equiv \Psi(q_1, q_2, \ldots, q_R)$ подставить $\delta(q-q')$. Тогда получается так называемое *соотношение замкнутости*

$$\delta(q-q') = \\ = \sum_{n,r} \varphi_n^{*(r)}(q')\,\varphi_n^{(r)}(q) + \sum_r \int \varphi^{*(r)}(\nu, \rho; q')\,\varphi^{(r)}(\nu, \rho; q)\,d\nu\,d\rho. \qquad (37)$$

Присоединяя его к соотношениям ортонормированности:

$$\left\langle \varphi_n^{(r)}, \varphi_{n'}^{(r')} \right\rangle = \delta_{nn'}\delta_{rr'}, \qquad (38а)$$

$$\left\langle \varphi_n^{(r)}, \varphi^{(r')}(\nu, \rho) \right\rangle = 0, \qquad (38б)$$

$$\langle \varphi^{(r)}(\nu, \rho), \varphi^{(r')}(\nu', \rho') \rangle = \delta_{rr'}\delta(\rho-\rho')\,\delta(\nu-\nu'), \qquad (38в)$$

получаем совокупность условий, необходимых и достаточных для того, чтобы система $\{\varphi\}$ была ортонормированной и полной.

Разложение (34) с правильными значениями коэффициентов (35) получается, если записать

$$\Psi(q) = \int \delta(q-q')\,\Psi(q')\,d\tau,$$

а затем вместо δ-функции подставить разложение (37).

Заметим, что полная ортонормированная система, если она существует, не является единственной. Действительно, можно как и в случае полностью дискретного спектра:

1°. Произвольно изменять фазу каждой из собственных функций.

2°. Выбирать бесконечным числом различных способов совокупность ортонормированных функций, принадлежащих одному вырожденному собственному значению.

3°. Кроме того, существует произвол в нормировке собственных функций непрерывного спектра. Действительно можно заменить каждый непрерывный индекс ν на индекс $\mu \equiv \mu(\nu)$, где $\mu(\nu)$ есть произвольная непрерывная дифференцируемая монотонная функция ν. Условие нормировки (38в) при этом заменяется аналогичным условием, в которое входит индекс μ; оно будет удовлетворено, если в качестве новой собственной функции взять функцию

$$\varphi^{(r)}(\mu, \rho; q) = \left| \frac{d\mu}{d\nu} \right|^{-1/2} \varphi^{(r)}(\nu, \rho; q). \qquad (39)$$

Не все эрмитовы операторы обладают полной ортонормированной системой собственных функций[8]). Однако эрмитовы операторы, представляющие физические величины, такой системой обладают: по этой причине мы будем называть такие операторы *наблюдаемыми*. Доказательство того факта, что некоторый эрмитов оператор есть наблюдаемая, является обычно сложной математической задачей. Она была решена в ряде случаев для таких операторов как операторы положения и импульса, гамильтониан системы в одном измерении, оператор момента импульса и т. д. Это свойство столь тесно связано с физической интерпретацией указанных операторов, что в случае его невыполнения потребовалась бы ревизия основ формализма теории. Мы будем предполагать, что оно всегда выполняется.

§ 10. Статистическое распределение результатов измерения в общем случае

Предположим, что A — наблюдаемая. Ввиду того, что разложение (34) существует для любой квадратично интегрируемой функции Ψ, можно (при условии сходимости) определить действие на функцию Ψ оператора вида $F(A)$.

Для сокращения обозначений будем предполагать, что спектр A не имеет вырождения. Тогда

$$\Psi = \sum_n c_n \varphi_n + \int \gamma(\nu)\, \varphi(\nu)\, d\nu. \tag{40}$$

Можно показать, что необходимым и достаточным условием сходимости разложения в правой части является сходимость ряда $\sum\limits_n |c_n|^2$ и интеграла $\int |\gamma(\nu)|^2\, d\nu$.

В общем случае

$$F(A)\,\Psi = \sum_n c_n F(a_n)\, \varphi_n + \int \gamma(\nu)\, F(a_\nu)\, \varphi(\nu)\, d\nu;$$

[8]) Рассмотрим оператор id/dx, действующий на квадратично интегрируемые функции $\psi(x)$, определенные на полуоси $(0, +\infty)$. Этот оператор эрмитов, если его применять к функциям, обращающимся в нуль при $x = 0$. Действительно, при этом условии имеем

$$\int\limits_0^\infty \psi_1^* i \frac{d\psi_2}{dx}\, dx - \int\limits_0^\infty \left(i \frac{d\psi_1}{dx}\right)^* \psi_2\, dx = i\psi_1^*\psi_2 \Big|_0^\infty = 0.$$

Тем не менее, оператор не имеет собственных функций. Единственно возможными собственными функциями являются функции вида e^{-ikx} (k — собственное значение), но эти функции не обращаются в нуль при $x = 0$.

это определение имеет смысл, если

$$\sum_n |c_n|^2 |F(a_n)|^2 \text{ и } \int |\gamma(\nu)|^2 |F(a_\nu)|^2 d\nu$$

сходятся. В частности, действие оператора $e^{i\xi A}$ всегда определено, так как выражение

$$e^{i\xi A}\Psi = \sum_n c_n e^{i\xi a_n}\varphi_n + \int \gamma(\nu) e^{i\xi a_\nu}\varphi(\nu) d\nu \tag{41}$$

сходится всегда.

Чтобы определить характеристическую функцию распределения A, применим соотношение

$$\langle \Psi, e^{i\xi A}\Psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 e^{i\xi a_n} + \int |\gamma(\nu)|^2 e^{i\xi a_\nu} d\nu,$$

полученное при использовании разложений (40) и (41) и условий ортонормированности. Характеристическая функция $f(\xi)$ принимает форму

$$f(\xi) = \frac{\langle \Psi, e^{i\xi A}\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \sum_n w_n e^{i\xi a_n} + \int \omega(\nu) e^{i\xi a_\nu} d\nu,$$

где

$$w_n = \frac{|c_n|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}, \quad \omega(\nu) = \frac{|\gamma(\nu)|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \tag{42}$$

Из вида характеристической функции (сноска [6]) следует, что:

1°. единственными значениями, которые может принимать величина $\mathcal{A}$, являются собственные значения сопоставленного этой величине оператора A;

2°. вероятность того, что $\mathcal{A}$ принимает значение a_n, равна w_n;

3°. вероятность того, что $\mathcal{A}$ принимает значение из непрерывного спектра, заключенное в интервале $[a(\nu), a(\nu + d\nu)]$, равна $\omega(\nu)\, d\nu$.

Сумма всех этих вероятностей $\sum w_n + \int \omega(\nu)\, d\nu$ равна единице (равенство Парсеваля). Находим также, что среднее значение A, если оно существует, выражается формулой $\langle \Psi, A\Psi \rangle / \langle \Psi, \Psi \rangle$ в согласии с основным постулатом.

В случае вырожденного спектра получаются те же результаты, но следует несколько изменить определение величин w_n и $\omega(\nu)$. Так, при замене разложения (40) на разложение (34), мы должны взять

$$w_n = \frac{\sum_r |c_n^{(r)}|^2}{\langle\Psi, \Psi\rangle}, \tag{43}$$

$$\omega(\nu) = \frac{\sum_r \int d\rho\, |\gamma^{(r)}(\nu, \rho)|^2}{\langle\Psi, \Psi\rangle}. \tag{44}$$

В этих выражениях в явном виде присутствует некоторая система собственных функций оператора A. Существует большой произвол в выборе такой системы функций. Очевидно, однако, что закон распределения вероятностей и его характеристическая функция не зависят от этого выбора. Это свойство легко проверить непосредственно на выражениях (43) и (44) (задача 5).

§ 11. Другие методы исследования непрерывного спектра

Большим преимуществом развитого выше подхода к проблеме непрерывного спектра является его формальная простота. Это преимущество компенсирует недостаток математической строгости, возникающий при использовании δ-функции. Впрочем, все операции, производимые с δ-функцией, могут быть строго обоснованы на основе теории обобщенных функций (см. Дополнение А).

Тем не менее, следует иметь в виду, что трудности, возникающие при трактовке непрерывного спектра собственных значений, могут быть преодолены и на основе классических математических приемов. Вместо того, чтобы основываться на проблеме собственных значений и вводить там, где это необходимо, собственные функции, не принадлежащие пространству Гильберта, можно, следуя Нейману, рассматривать задачу строго, не выходя за пределы пространства Гильберта. Метод состоит в использовании так называемого разложения единицы в пространстве Гильберта, причем показывается, что каждой наблюдаемой волновой механики соответствует свое разложение единицы. Это рассмотрение строго эквивалентно по своим результатам приведенному выше. Мы упоминаем о нем только для полноты изложения [9]).

Другой способ рассмотрения проблем, относящихся к непрерывному спектру, состоит в замене задачи на собственные значения (9) другой задачей, в которой последовательность соб-

[9]) Читатель, интересующийся математическими аспектами квантовой теории, найдет их исчерпывающее изложение в книге И. фон Неймана (см. сноску [3])).

ственных значений всюду дискретна, причем первоначальная задача получается как предельный случай при соответствующей модификации условий. Хотя подобная процедура не может претендовать на строгость, она имеет достоинство простоты и интуитивной ясности. Рассмотрим на основании этого метода операторы q и $-i\hbar\, d/dq$. Читатель может сравнить ход рассуждений и результаты с содержанием § 8.

Чтобы подойти к проблеме измерения положения в пространстве, разделим интервал $(-\infty, +\infty)$ на равные сегменты длины η и заменим волновые функции $\psi(q)$ приближенными волновыми функциями $\psi^{\times}(q)$, постоянными на каждом сегменте и определяемыми соотношением

$$\psi^{\times}(q) = \psi(n_q, \eta),$$

где n_q обозначает наибольшее целое число, содержащееся в q/η, иначе говоря: $q - \eta < n_q\eta \leqslant q$. Аналогичным образом заменим оператор q оператором $q^{\times}$ умножение на $n_q\eta$. В пределе, когда $\eta \to 0$, имеем $q^{\times} \to q$ и $\psi^{\times}(q) \to \psi(q)$.

Множество функций $\psi^{\times}$ образует пространство Гильберта, в котором оператор $q^{\times}$ вполне определен и обладает дискретным спектром собственных значений $n\eta$ $(n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots, \pm\infty)$. Каждому собственному значению $n\eta$ принадлежит собственная функция u_n, нормированная на единицу

$$u_n = \begin{cases} \eta^{-1/2}, & \text{если } n\eta \leqslant q < (n+1)\,\eta, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Собственные функции ортонормированы: $\langle u_n, u_{n'}\rangle = \delta_{nn'}$. Кроме того, они образуют полную систему, ибо всякая функция $\psi^{\times}$ может быть представлена разложением в ряд по u_n:

$$\psi^{\times} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \eta^{1/2}\psi(n\eta)\, u_n. \tag{45}$$

Следовательно, можно применить теорию §§ 5, 6 с тем результатом, что вероятность измерить значение $q^{\times} = n\eta$ равна $\eta\,|\psi(n\eta)|^2$. В пределе $\eta \to 0$ промежутки между соседними собственными значениями стремятся к нулю, спектр становится непрерывным. Измерение отличной от нуля координаты $q' = n\eta$ соответствует бесконечно большому значению n; однако вероятность обнаружить это точное значение координаты пропорциональна η и следовательно стремится к нулю. В действительности эта вероятность не интересна, поскольку спектр значений координаты непрерывен. Нам важно знать вероятность $P(q')\delta q'$, найти частицу в интервале $(q', q' + \delta q')$, т. е.

$$P(q')\,\delta q' = \sum\nolimits^{(q',\, q'+\delta q')} \eta\,|\psi(n\eta)|^2,$$

где суммирование распространено на все те n, при которых $n\eta$ находится в интервале $(q', q' + \delta q')$. Поскольку $\delta q'$ является малой постоянной, члены этой суммы числом $\delta q'/\eta$ все примерно равны $\eta\,|\psi(q')|^2$. Следовательно, в пределе $\eta \to 0$ имеем

$$P(q')\,\delta q' = |\psi(q')|^2\,\delta q'.$$

Заметим, что разложение (45) может быть записаио еще н в виде

$$\psi^{\times} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \psi(n\eta)\frac{u_n}{\sqrt{\eta}} \cdot \eta = \sum_{q'} \psi(q')\, v_{\eta}(q') \cdot \eta,$$

где сумма по q' обозначает суммирование по дискретной последовательности значений $q' = n\eta$, а

$$v_\eta(q') = \eta^{-1/2} u_n = \begin{cases} \eta^{-1}, & \text{если } q - \eta < q' \leqslant q, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

При $\eta \to 0$ данный ряд переходит в интеграл от произведения $\psi(q')$ на предел функции $v_\eta(q')$, но этот предел как раз равен $\delta(q'-q)$. Мы приходим, следовательно, к формуле (32).

Аналогичный подход в случае измерения импульса состоит в том, что мы первоначально ограничиваем область изменения координаты q интервалом $(-L/2, +L/2)$, где L на завершающем этапе рассуждений будем стремить к бесконечности. Для того чтобы оператор $p = -i\hbar\, d/dq$ был эрмитовым в этой конечной области, следует наложить на функции $\psi(q)$ из функционального пространства, где действует оператор, некоторые граничные условия. Условие эрмитовости записывается в виде

$$\int_{-L/2}^{+L/2} \varphi^* \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dq}\, dq - \int_{-L/2}^{+L/2} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi}{dq}\right)^* \psi\, dq \equiv \frac{\hbar}{i} \varphi^* \psi \Big|_{-L/2}^{+L/2} = 0$$

для любых функций $\varphi(q)$ и $\psi(q)$, т. е. $\dfrac{\psi(L/2)}{\psi(-L/2)} = \dfrac{\varphi^*(-L/2)}{\varphi^*(L/2)}$ равно постоянной, не зависящей от ψ и φ.

Другими словами, требуется, чтобы для всякой функции $\psi(q)$

$$\psi(L/2) = e^{i\alpha}\psi(-L/2),$$

где $e^{i\alpha}$ — некоторый фиксированный фазовый множитель. Условимся принимать его равным единице, что дает *условие периодичности*

$$\psi(L/2) = \psi(-L/2).$$

В этих условиях задача о собственных значениях оператора $-i\hbar d/dq$ решается без труда. Спектр собственных значений оказывается дискретным:

$$p_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n \qquad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm \infty).$$

Собственному значению p_n соответствует нормированная на единицу собственная функция

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{\hbar} p_n q}.$$

Функции u_n взаимно ортогональны, кроме того, они образуют полную систему, так как согласно теории рядов Фурье всякая квадратично интегрируемая функция $\psi(q)$ в интервале $(-L/2, +L/2)$ может быть представлена в виде ряда

$$\psi(q)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n u_n; \qquad (46)$$

при этом

$$c_n=\langle u_n, \psi(q)\rangle=\frac{1}{\sqrt{L}}\cdot\int_{-L/2}^{+L/2} e^{-\frac{i}{\hbar}p_n q}\psi(q)\,dq.$$

Мы можем, следовательно, применить теорию §§ 5, 6 и находим, что вероятность найти $p=p_n$ равна $|c_n|^2$.

В пределе $L\to\infty$ промежуток $\varepsilon=2\pi\hbar/L$, разделяющий соседние собственные значения, стремится к нулю, и спектр собственных значений импульса $p_n=n\varepsilon$ становится непрерывным. Исследование перехода к пределу проводится совершенно аналогично тому, как это было сделано для q. При $\varepsilon\to 0$, при условии, что $p'=n\varepsilon$ остается постоянным, $\varepsilon^{-1/2}c_n$ стремится к образу Фурье

$$\varphi(p')=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}p'q}\psi(q)\,dq.$$

Мы оставляем читателю возможность самому найти после предельного перехода статистическое распределение результатов измерения импульса и показать, что представление $\psi(q)$ в виде ряда Фурье (46) переходит в интегральное представление Фурье

$$\psi(q)=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\,u(p';\ q)\,dp',$$

где $u(p';q)$ есть предельная форма $\varepsilon^{-1/2}u_n$, т. е.

$$u(p';\ q)=\frac{e^{\frac{i}{\hbar}p'q}}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

§ 12. Комментарии и примеры

Мы показали, что статистическое распределение результатов измерения динамической переменной полностью определяется заданием волновой функции физической системы. Этот результат был получен в самом общем виде. Каждой динамической переменной сопоставляется наблюдаемая A, т. е. эрмитов (самосопряженный) оператор, обладающий полной ортонормированной системой собственных функций. Отправляясь от естественного и формально очень простого постулата, касающегося средних значений, мы показали, что единственно возможными результатами измерений являются собственные значения наблюдаемой A, а искомый закон распределения вероятностей непосредственно выражается через квадраты модулей коэффициентов разложения волновой функции по собственным функциям.

Среди наиболее часто встречающихся динамических переменных, помимо пространственных координат и импульса, следует упомянуть энергию, представляемую гамильтонианом Шредингера, и момент импульса.

Спектр *энергии* может быть в зависимости от физической ситуации дискретным (см. § III. 5), непрерывным (см. § III. 3) или смешанным (см. § III. 6). Проблема собственных значений гамильтониана H имеет важное значение в квантовой теории не только в связи с определением энергии, но и потому, что она играет определяющую роль при решении уравнения Шредингера. Если H не зависит от времени, а это единственный случай, когда понятие энергии имеет действительный смысл, волновая функция $\Psi(t)$ в момент времени t получается из волновой функции $\Psi(t_0)$ в начальный момент t_0 с помощью преобразования

$$\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}\Psi(t_0).$$

Мы можем вычислить выражение в правой части равенства, используя разложение $\Psi(t_0)$ в ряде по собственным функциям H (частный случай уравнения (41)); нетрудно установить, что

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = -\frac{i}{\hbar}He^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}\Psi(t_0) = -\frac{i}{\hbar}H\Psi(t),$$

т. е. что $\Psi(t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера, а также начальному условию при $t = t_0$.

Предположим, в целях упрощения записи, что спектр H является полностью дискретным и невырожденным; пусть $E_n (n = 1, 2, \ldots)$ собственные значения оператора H, а ψ_n — собственные функции, принадлежащие E_n. Разложение $\Psi(t_0)$ запишется в виде

$$\Psi(t_0) = \sum_n c_n\psi_n, \quad c_n = \langle\psi_n, \Psi(t_0)\rangle.$$

Тогда функция $\Psi(t)$ представляется рядом

$$\Psi(t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}\psi_n. \tag{47}$$

Заметим, что модуль коэффициента при ψ_n в этом разложении не зависит от t. Отсюда получается важное свойство: *статисти-*

ческое распределение энергии физической системы (гамильтониан которой не зависит от времени) *постоянно во времени.*

Момент импульса частицы в классической механике выражается вектором $[\boldsymbol{rp}]$. В квантовой теории ему сопоставляется векторный оператор

$$\boldsymbol{l} \equiv -i\hbar[\boldsymbol{r}\nabla]. \tag{48}$$

Выпишем явно одну из его компонент

$$l_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

Выберем Oz в качестве полярной оси и обозначим через (r, θ, φ) сферические координаты частицы; нетрудно проверить, что $\partial/\partial\varphi = x\partial/\partial y - y\partial/\partial x$. Следовательно,

$$l_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{49}$$

Задача нахождения собственных значений упрощается, если искать волновуюфункцию в сферических координатах:

$$l_z\psi(r, \theta, \varphi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r, \theta, \varphi) = l_z'\psi(r, \theta, \varphi).$$

Тогда находим

$$\psi(r, \theta, \varphi) = F(r, \theta)\, e^{\frac{i}{\hbar}l_z'\varphi},$$

где $F(r, \theta)$ — некоторая функция r и θ. Чтобы собственная функция была однозначной, необходимо, чтобы она была периодичной по φ с периодом 2π, т. е.

$$l_z' = m\hbar \qquad (m \text{ — целое}). \tag{50}$$

Следовательно, спектр собственных значений компоненты момента импульса частицы является полностью дискретным. Этот результат без труда распространяется на компоненту полного момента импульса системы частиц в согласии с экспериментальными данными по пространственному квантованию.

Раздел IV. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

§ 13. Операция измерения и редукция волнового пакета. Идеальные измерения

Статистические распределения, полученные в предшествующих разделах, могут быть подвергнуты непосредственной экспериментальной проверке. Так, распределение, сопоставляемое некоторой динамической переменной $\mathcal{A}$, есть распределение результатов, полученных при измерении $\mathcal{A}$ на очень большом числе $\mathcal{N}$ тождественных систем, независимых друг от друга и находящихся в момент измерения в одном и том же динами-