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 волновую функцию 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 $\mathscr{A}$, есть распределение результатов, полученных при измерении $\mathscr{A}$ на очень большом числе $\mathscr{N}$ тождественных систем, независимых друг от друга и находящихся в момент измерения в одном и том же динамическом состоянии. Каждая система в этот момент времени [10]) представляется одной и той же функцией Ψ (определяемой с точностью до постоянного множителя), которой соответствует вполне определенное теоретическое распределение. Это распределение можно сравнить с экспериментальным.

Для полноты физического истолкования теории остается уточнить:

1) каким образом предшествующие измерения системы позволяют установить ее динамическое состояние и, в частности, как убедиться в том, что все $\mathcal{N}$ систем, упомянутые выше, действительно находятся в динамическом состоянии, представляемом Ψ;

2) что происходит с каждой из систем ансамбля после осуществления измерения.

Эти два вопроса тесно связаны между собой. Рассмотрим сначала второй из них.

После окончания измерения [11]) система может вновь рассматриваться как независимый объект, полностью отделенный от измерительного прибора, вновь становится возможным описание физической системы с помощью ее волновой функции. Волновая функция системы после измерения несомненно отличается от той волновой функции, которая описывала систему в момент времени непосредственно перед измерением, кроме, может быть, того случая, когда волновая функция перед измерением была собственной функцией наблюдаемой A, сопоставленной измеряемой физической величине. Это (не каузальное) изменение волновой функции при осуществлении измерения часто называют *редукцией волнового пакета.*

Мы знаем, что некаузальное изменение волновой функции возникает вследствие неконтролируемого возмущения эволюции системы при взаимодействии с измерительным прибором, причем основной эффект возмущения состоит в том, что значение переменной, дополнительной к измеряемой переменной, становится тем менее определенным, чем точнее было проведено измерение.

Важно отличать это неконтролируемое возмущение от всех других модификаций физической системы в процессе измерения, которые в принципе могут быть точно вычислены. Часто бывает, например, что сама измеряемая величина изменяется в про-

---

[10]) Момент времени, о котором идеть речь, это *момент начала измерения.* Как только измерение началось, система находится во взаимодействии с измерительным прибором и описание ее эволюции с помощью только волновой функции системы становится невозможным.

[11]) Детальное исследование самого механизма измерения находится вне рамок данной книги. См. в этой связи литературу, цитируемую в гл. IV, сноска [10].

цессе измерения. Примером такой ситуации могут служить два способа измерения импульса, которые были разобраны в гл. IV. Модификация измеряемой величины зависит, конечно, от устройства используемого измерительного прибора. Так, при измерении импульса при комптоновском рассеянии, рассмотренном на стр. 148, разность $p' - p$ тем меньше, чем меньше частота ν фотона, и стремится к нулю при $\nu \to 0$. Нельзя поэтому дать общего рецепта, касающегося модификации динамического состояния системы в процессе измерения, ибо эта модификация зависит каждый раз от конкретных условий опыта. Однако можно представить себе идеальные условия опыта, при которых все упомянутые выше контролируемые модификации строго компенсированы и проявляются только неконтролируемые модификации, характерные для квантовых явлений. Мы примем, что такие *идеальные измерения* действительно возможны или что их можно рассматривать как идеальные предельные случаи реальных измерений (например, измерения положения частицы в пределе бесконечно малой длительности измерения, обсуждавшиеся в гл. IV, или измерения импульса при рассеянии Комптона, когда $\nu \to 0$).

Рассмотрим теперь идеальное измерение величины $\mathcal{A}$ и предположим сначала, что найденное в результате измерения значение a_i есть невырожденное собственное значение. Согласно предположению мы достоверно знаем, что по окончании измерения $\mathcal{A} = a_i$, т. е. что волновая функция системы (с точностью до произвольной постоянной) ψ_i — собственная функция, принадлежащая собственному значению a_i. Произвольная постоянная не имеет никакого физического смысла, ибо какими бы ни были предшествующие наблюдения системы, статистическое распределение результатов этих наблюдений не зависит от выбора постоянной. Таким образом, волновая функция системы после измерения точно известна. Измерительный аппарат действует в некотором смысле как «идеальный фильтр». Волновая функция до измерения есть функция $\Psi = \sum\limits_n c_n\psi_n$. Имеется вероятность $|c_i|^2$ найти в результате измерения величину a_i; действие операции измерения сводится к «пропусканию» без изменения единственного члена $c_i\psi_i$ в разложении Ψ по собственным функциям оператора A.

В более общем случае, когда собственные значения наблюдаемой A и, в частности, значение a_i вырождены, волновая функция до измерения (по предположению нормированная на единицу) может быть представлена в форме (ср. уравнение (20)):

$$\Psi = \sum_p \Psi_p, \quad \Psi_p = \sum_r c_p^{(r)}\psi_p^{(r)}. \tag{51}$$

Вероятность получить при измерении величину a_i равна $\langle\Psi_i, \Psi_i\rangle = \sum_r |c_p^{(r)}|^2$. В случае идеального измерения волновая функция после измерения есть собственная функция оператора A, принадлежащая собственному значению a_i: это линейная комбинация функций $\psi_i^{(r)}$ (r — переменный индекс). Информация, содержащаяся в факте обнаружения значения a_i, недостаточна для определения указанной линейной комбинации, причем неопределенность тем больше, чем больше кратность вырождения собственного значения. При идеальном измерении измерительный прибор действует как «идеальный фильтр», «пропускающий» без искажения только часть разложения (51) функции Ψ, относящуюся к собственному значению a_i, т. е. функцию

$$\Psi_i = \sum_r c_i^{(r)} \psi_i^{(r)}.$$

Если измерение неидеально, то «прохождение» этих членов сопровождается некоторым искажением; это искажение в принципе может быть вычислено и зависит от конкретного устройства измерительного прибора.

Далее в этой главе мы будем предполагать, что все измерения, о которых идет речь, являются идеальными. Это сильно упрощает рассуждения. Такое предположение не ограничивает общности и не приводит к фундаментальным изменениям физического истолкования теории.

§ 14. Коммутирующие наблюдаемые и совместные переменные

Рассмотрим две наблюдаемые A и B. Предположим, что спектр их собственных значений полностью дискретный, хотя те свойства, которые мы изучим, справедливы и в общем случае. Пусть эти наблюдаемые имеют одну общую собственную функцию Ψ_0:

$$A\Psi_0 = a\Psi_0,$$
$$B\Psi_0 = b\Psi_0.$$

Физический смысл этих двух уравнений следующий. Если физическая система в данный момент времени находится в состоянии Ψ_0, то точное измерение величин $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ с достоверностью приведет к значениям a и b, соответственно. Необходимым условием того, что эти уравнения удовлетворяются одновременно, является равенство

$$(AB - BA)\Psi_0 \equiv [A, B]\Psi_0 = 0, \tag{52}$$

т. е. коммутатор A и B имеет собственной функцией Ψ_0, принадлежащую собственному значению 0.

В качестве примера величин, для которых это условие не выполняется, могут служить наблюдаемые x и p_x, так как их коммутатор является отличной от нуля постоянной. Именно (см. уравнение (II. 10)):

$$[x,\ p_x] = -i\hbar\left[x,\ \frac{\partial}{\partial x}\right] = i\hbar \neq 0; \qquad (53)$$

действительно, мы хорошо знаем, что эти две величины никогда не могут быть одновременно точно измерены.

С другой стороны, уравнение (52) автоматически выполняется, когда наблюдаемые A и B коммутируют. В этом случае мы имеем важную теорему:

Если две наблюдаемые коммутируют, то они обладают общей полной ортонормированной системой собственных функций, и наоборот.

Физически это означает, что динамические переменные, представляемые этими двумя наблюдаемыми, могут быть одновременно точно измерены: это *совместные* переменные. В частности, можно одновременно произвести идеальное измерение переменных $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ и в этом случае волновая функция после измерения будет общей собственной функцией A и B.

Доказательство прямой теоремы таково. Предполагаем, что наблюдаемые A и B коммутируют

$$[A,\ B] = 0.$$

Пусть ψ_a есть собственная функция A, принадлежащая собственному значению a. Функция ψ_a может быть разложена по системе ортонормированных собственных функций наблюдаемой B, т. е. может быть представлена в форме

$$\psi_a = \sum_m \varphi(a;\ b_m),$$

где $\varphi(a; b_m)$ — собственная функция B, принадлежащая собственному значению b_m. Можно всегда сделать так, чтобы все функции, входящие в эту сумму, принадлежали различным собственным значениям (см. уравнение (20)). Покажем, что

$$\hat{\varphi}_m \equiv (A - a)\varphi(a;\ b_m) = 0.$$

Поскольку A и B коммутируют

$$B\hat{\varphi}_m = (A - a)\,B\varphi(a;\ b_m) = (A - a)\,b_m\varphi(a;\ b_m) = b_m\hat{\varphi}_m.$$

Иными словами, функции $\hat{\varphi}_m$ являются собственными функциями B, и ввиду того что собственные значения различны, эти функции линейно независимы. Однако имеем

$$\sum_m \hat{\varphi}_m = (A - a)\ \psi_a = 0.$$

Это возможно только в том случае, если каждая из функций $\hat{\varphi}_m$ равна нулю. Следовательно, функции $\varphi(a; b_m)$ одновременно являются собственными функциями A и B.

Рассмотрим теперь полную ортонормированную систему $\{\psi_n^{(r)}\}$ собственных функций A

$$A\psi_n^{(r)} = a_n\psi_n^{(r)}.$$

По доказанному эти функции можно представить в форме

$$\psi_n^{(r)} = \sum_m \varphi^{(r)}(a_n, b_m); \qquad (54)$$

где $\varphi^{(r)}(a_m; b_m)$ являются общими собственными функциями A и B. Совокупность функций $\varphi^{(r)}(a_n; b_m)$, соответствующих одной паре собственных значений a_n, b_m, может не быть линейно независимой, однако всегда можно тем или иным способом (например, с помощью процесса ортогонализации Шмидта) выбрать последовательность ортонормированных функций $\chi^{(s)}(a_n; b_m)$, соответствующих той же паре собственных значений, причем функции $\varphi^{(r)}(a_n; b_m)$ будут линейными комбинациями этих новых функций:

$$\varphi^{(r)}(a_n; b_m) = \sum_s c_{rs}\chi^{(s)}(a_n; b_m). \qquad (55)$$

Множество $\{\chi\}$ всех функций χ образует ортонормированную систему собственных функций, общих для A и B. При этом полученная система полная, так как всякая волновая функция Ψ может быть разложена в ряд по функциям χ. Чтобы построить такое разложение следует разложить Ψ в ряд по функциям полной системы $\{\psi_n^{(r)}\}$, затем вместо функций $\psi_n^{(r)}$ подставить их выражения через $\chi^{(s)}(a_n; b_m)$, полученные с помощью уравнений (54) и (55), что и требовалось доказать.

Обратно, если A и B обладают общей полной ортонормированной системой собственных функций $\chi^{(s)}(a_n; b_m)$, то

$$AB\chi^{(s)}(a_n; b_m) = a_n b_m \chi^{(s)}(a_n, b_m) = BA\chi^{(s)}(a_n; b_m),$$

следовательно,

$$[A, B]\chi^{(s)}(a_n; b_m) = 0.$$

Действие коммутатора $[A, B]$ на любые функции из системы $\{\chi\}$ дает нуль. Но поскольку, по предположению, всякая волновая функция Ψ разлагается в ряд по функциям χ, имеем при любой Ψ: $[A, B]\Psi = 0$. Следовательно,

$$[A, B] = 0.$$

С помощью коммутирующих наблюдаемых A, B можно образовать новые наблюдаемые виды $f(A, B)$, где $f(x, y)$ — произвольно выбранная функция. По определению действие наблюдаемой $f(A, B)$ на собственную функцию $\chi(a; b)$, общую для операторов A и B, дает

$$f(A, B)\chi(a; b) = f(a, b)\chi(a; b).$$

Действие новой наблюдаемой на произвольную функцию Ψ получается путем разложения Ψ в ряд по χ и применения оператора $f(A, B)$ к каждому члену разложения, если, конечно, получающийся ряд сходится; в противном случае функция $f(A, B)\ \Psi$ не существует. Из самого определения $f(A, B)$ очевидно, что эта наблюдаемая обладает общей с A и B полной ортонормированной системой собственных функций, а именно системой $\{\chi\}$. Отсюда следует, что $f(A, B)$ коммутирует с A и B.

Все эти результаты очевидно обобщаются на случай произвольного числа R попарно коммутирующих наблюдаемых. Если R наблюдаемых все попарно коммутируют, то они обладают (по крайней мере) одной общей полной ортонормированной системой собственных функций, и наоборот. Кроме того, любая (вещественная) функция этих наблюдаемых есть наблюдаемая, которая коммутирует с каждой из них и обладает общей с ними системой собственных функций.

§ 15. Полные наборы коммутирующих наблюдаемых

Рассмотрим наблюдаемую A. Из ее собственных функций можно образовать полную ортонормированную систему собственных функций; будем называть эту систему функций *базисной системой* наблюдаемой A. Базисная система, вообще говоря, не единственна. Степень произвола при ее выборе обсуждалась в § 9. Условимся считать тождественными две системы, составляющие функции которых отличаются только фазой и (в случае непрерывного спектра) нормировкой. При этом условии базисная система наблюдаемой A единственна, если все собственные значения невырождены. Чтобы исследовать другой случай, примем сначала, что собственное значение a дважды вырождено, и пусть ψ_1, ψ_2 суть две собственные ортонормированные функции, принадлежащие этому собственному значению. Нетрудно проверить, что функции

$$\varphi_1 = \psi_1 \cos\alpha + \psi_2 \sin\alpha,$$
$$\varphi_2 = -\psi_1 \sin\alpha + \psi_2 \cos\alpha$$

также будут ортонормированными, принадлежащими тому же собственному значению. Базисная система наблюдаемой A может быть образована как из функций (ψ_1, ψ_2), так и из функций (φ_1, φ_2). Следовательно, базисная система A не является единственной.

Пусть теперь имеется еще одна наблюдаемая B, коммутирующая с A. Может случиться, что общая базисная система A и B, существование которой мы доказали в § 14, будет единственной. Тогда говорят, что наблюдаемые A и B образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых.

Если A и B не обладают единственной общей базисной системой, мы вынуждены добавить к ним третью наблюдаемую C, коммутирующую с первыми двумя и т. д.

В общем случае говорят, что *наблюдаемые* $A, B, \ldots, L$ *образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых, если они обладают общей базисной системой и эта система единственна.* В этом случае любая наблюдаемая, коммутирующая с каждой наблюдаемой полного набора, по необходимости обладает той же базисной системой, поэтому ее собственные значения являются вполне определенными функциями собственных значений $a, b, \ldots, l$ наблюдаемых $A, B, \ldots, L$; иными словами, эта наблюдаемая может рассматриваться как функция наблюдаемых набора.

Динамические переменные, представляемые полным набором коммутирующих наблюдаемых, могут быть одновременно точно измерены и образуют *полный набор совместных переменных* (§ IV. 17). Если осуществить одновременное точное измерение значений этих переменных, то волновая функция системы будет собственной функцией наблюдаемых $A, B, \ldots, L$, принадлежащей собственным значениям $a, b, \ldots, l$, обнаруженным в результате измерения. *Поскольку существует только одна собственная функция, обладающая этим свойством, то выполнение этих измерений полностью определяет волновую функцию физической системы.* Говорят, что *динамическое состояние физической системы полностью определяется заданием квантовых чисел* $a, b, \ldots, l$. В действительности, эта функция определяется только с точностью до постоянного множителя, но поскольку физически измеряемые величины, а именно статистические распределения результатов различных возможных измерений не зависят от выбора этой постоянной, можно придать ей любое значение, не меняя физической значимости волновой функции. Обычно волновую функцию нормируют на единицу, что оставляет произвольной постоянную фазу, не имеющую физического смысла.

Осуществление физического эксперимента можно описать следующим образом. В начальный момент времени t_0 мы *«приготовляем»* систему, выполняя одновременное измерение полного набора совместных переменных. Таким образом, динамическое состояние физической системы в начальный момент времени оказывается полностью определенным.

В дальнейшем волновая функция физической системы эволюционирует во времени, подчиняясь уравнению Шредингера. В каждый последующий момент времени динамическое состояние системы таким образом точно известно, по крайней мере до того момента, когда оно будет возмущено вмешательством измерительного прибора. Наконец, в некоторый момент времени t мы осуществляем данное измерение. Поскольку волновая функция $\Psi(t)$ в момент измерения известна, можно точно указать статистическое распределение результатов измерения. Повторяя опыт на очень большом числе $\mathcal{N}$ тождественных систем, мы получаем экспериментальное распределение, которое можно сравнить с теоретическим.

§ 16. Чистые и смешанные состояния

На практике полное «приготовление» системы, упомянутое выше, осуществляется редко. Чаще всего измеренные динамические переменные не составляют полного набора, и динамическое состояние системы известно не точно. В этих случаях прибегают к статистическим методам. Вместо строго заданного динамического состояния системы мы имеем статистическую смесь состояний. Не имея возможности описать состояние системы одной определенной волновой функцией, мы рассматриваем статистическую смесь волновых функций, причем каждая волновая функция входит со своим статистическим весом. Подобно классической статистической механике, существует *квантовая статистическая механика.*

Когда «приготовление» полное и, следовательно, динамическое состояние системы известно точно, говорят, что мы имеем дело с *чистым состоянием*, в противном случае говорят, о *смешанном состоянии.*

В предсказании результатов измерений при смешанном состоянии статистика играет двойную роль: с одной стороны она отражает наличие чисто квантовых неопределенностей, связанных с неконтролируемым возмущением системы в операции измерения, с другой стороны — учитывает неполноту информации о динамическом состоянии физической системы.

Предположим, что в момент «приготовления» системы t_0 она может быть описана совокупностью волновых функций $\Psi^{(1)}(t_0), \ldots, \Psi^{(k)}(t_0), \ldots$ со статистическими весами $p_1, \ldots$ $\ldots, p_k, \ldots$ $\left(\sum\limits_k p_k = 1\right)$. Пусть $\Psi^{(1)}(t), \ldots, \Psi^{(k)}(t), \ldots$ решения уравнения Шредингера, соответствующие начальным значениям $\Psi^{(1)}(t_0), \ldots, \Psi^{(k)}(t_0), \ldots$ В момент времени t система представляется ансамблем этих функций $\Psi^{(1)}(t), \ldots$ $\ldots, \Psi^{(k)}(t), \ldots$ с теми же статистическими весами $p_1, \ldots$

..., p_k, ... Пусть $\langle A\rangle_k$ есть среднее значение результатов измерения некоторой величины $\mathcal{A}$ в том случае, когда система находится в динамическом состоянии $\Psi^{(k)}(t)$:

$$\langle A\rangle_k = \frac{\langle\Psi^{(k)}(t),\ A\Psi^{(k)}(t)\rangle}{\langle\Psi^{(k)}(t),\ \Psi^{(k)}(t)\rangle}.$$

Тогда среднее значение результатов измерения $\mathcal{A}$ при статистической смеси состояний в момент времени t дается формулой

$$\langle A\rangle = \sum_k p_k \langle A\rangle_k.$$

Аналогично, если $w_i^{(k)}$ есть вероятность получить результат a_i, когда динамическое состояние системы представляется функцией $\Psi^{(k)}(t)$, то вероятность найти этот результат при измерении на смеси равна

$$w_i = \sum_k p_k w_i^{(k)}. \qquad (56)$$

Важнейший пример квантовостатистического смешанного состояния дает система, находящаяся в термодинамическом равновесии с термостатом при температуре T. Здесь возможными динамическими состояниями являются собственные состояния гамильтониана H системы, статистический вес данного собственного состояния зависит исключительно от соответствующего ему собственного значения H и равен с точностью до нормировочной постоянной фактору Больцмана $e^{-E/kT}$, где E — собственное значение H, а k — постоянная Больцмана.

Раздел V. АЛГЕБРА КОММУТАТОРОВ И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

§ 17. Алгебра коммутаторов и основные свойства коммутаторов

Пока мы оперируем с коммутирующими наблюдаемыми, можно без ограничений пользоваться правилами обычной алгебры. Однако не все наблюдаемые заданной квантовой системы обладают свойством коммутировать друг с другом. Например, наблюдаемые квантовой системы размерности R являются некоторыми функциями наблюдаемых положения q_i $(i = 1, 2, \ldots, R)$ и наблюдаемых импульса p_i $(i = 1, 2, \ldots, R)$[12]), т. е. наблюдаемых, не коммутирующих между собой. Коммутаторы q и p играют фундаментальную роль в теории. Они имеют

[12]) Это верно постольку, поскольку квантовая система имеет классический аналог. В дальнейшем мы введем дополнительные переменные типа спина, которые не имеют классического аналога.