$\ldots, p_k, \ldots$ Пусть $\langle A\rangle_k$ есть среднее значение результатов измерения некоторой величины $\mathscr{A}$ 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 $\mathscr{A}$ 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

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

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.

вид

$$[q_i, q_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \tag{57}$$

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{58}$$

Соотношения (57) очевидны, при этом второе следует из того факта, что операции дифференцирования переставимы. Соотношение (58) есть обобщение (53), причем подразумевается

$$p_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}.$$

Ввиду того, что q и p не коммутируют, определение динамической переменной $\mathscr{A} = A(q_1, \ldots, q_R; p_1, \ldots, p_R)$ требует указания порядка расположения q и p при явном выражении функции $A(q_1, \ldots, q_R; p_1, \ldots, p_R)$. На практике A обычно выражается в виде полинома от p или бесконечного ряда по степеням p, коэффициенты которого суть функции q. Каждый член имеет вид произведения компонент p_i и функций от q, расположенных в определенном порядке. Функция A, рассматриваемая как оператор, вполне определена только тогда, когда точно указан порядок операторов в каждом члене разложения. Важно установить, какой вид имеют коммутаторы q и p с заданной операторной функцией A. Если мы имеем дело с функциями только от q или только от p, то нетрудно получить соотношения:

$$[q_i, F(q_1, \ldots, q_R)] = 0; \tag{59}$$

$$[p_i, G(p_1, \ldots, p_R)] = 0; \tag{60}$$

$$[p_i, F(q_1, \ldots, q_R)] = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial q_i}; \tag{61}$$

$$[q_i, G(p_1, \ldots, p_R)] = +i\hbar\frac{\partial G}{\partial p_i}. \tag{62}$$

Соотношения (59) и (60) являются частными случаями общего правила, установленного в конце § 14. Чтобы доказать равенство (61), необходимо выписать оператор p_i в явном виде и проверить действие левой и правой частей равенства на некоторую волновую функцию (см. уравнение (II. 9)). Уравнение (62) допускает ту же проверку, но в пространстве импульсов; напомним, что если $\Phi(p_1, \ldots, p_R)$ есть волновая функция в пространстве импульсов, соответствующая $\Psi(q_1, \ldots, q_R)$, то функция в пространстве импульсов, соответствующая $q_i\Psi(q_1, \ldots, q_R)$, имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\Phi(p_1, \ldots, p_R).$$

Тот же результат можно получить, воспользовавшись правилами алгебры коммутаторов. Приведем здесь четыре основных правила. Они следуют из определения коммутаторов, и читатель без труда может проверить их непосредственным вычислением. Пусть A, B, C — некоторые линейные операторы. Тогда имеем:

$$[A, B] = -[B, A]; \tag{63}$$

$$[A, B+C] = [A, B] + [A, C]; \tag{64}$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]; \tag{65}$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0. \tag{66}$$

Повторным применением правила (65) получим также

$$[A, B^n] = \sum_{s=0}^{n-1} B^s [A, B] B^{n-s-1}.$$

В частности, для системы в одном измерении имеем

$$[q, p^n] = ni\hbar p^{n-1}.$$

Соотношение (62) доказано, таким образом, если G представляет собой одночлен от p, но согласно формуле (64) оно доказано и для случая, когда G выражается полиномом или, в общем случае, сходящимся рядом по степеням p.

Для произвольных функций от q и p можно написать

$$[p_i, A] = -i\hbar \frac{\partial A}{\partial q_i}, \tag{67}$$

$$[q_i, A] = i\hbar \frac{\partial A}{\partial p_i}, \tag{68}$$

где правые части получаются формальным дифференцированием функции A, причем подразумевается, что порядок операторов p и q при явном выражении функции A выбран правильно.

Проиллюстрируем это на примере квантовой системы в одном измерении. Пусть $f(q)$ есть некоторая функция q. Коммутаторы q и каждой из функций $p^2 f(q)$, $pf(q)p$, $f(q)p^2$ могут быть получены дифференцированием по p этих функций, однако это будут различные операторы. Действительно, повторным применением правила (62) находим:

$$[q, p^2 f(q)] = 2i\hbar pf(q);$$

$$[q, pfp] = i\hbar(fp + pf);$$

$$[q, fp^2] = 2i\hbar fp.$$

Аналогичным образом

$$[p, p^2 f] = -i\hbar p^2 f';$$

$$[p, pfp] = -i\hbar pf'p;$$

$$[p, fp^2] = -i\hbar f'p^2.$$

§ 18. Соотношения коммутации для момента импульса

В качестве приложения правил (63)—(65) алгебры коммутаторов вычислим коммутаторы составляющих момента импульса частицы:

$$\boldsymbol{l} \equiv [\boldsymbol{r}\boldsymbol{p}].$$

Имеем:

$$\begin{aligned}
[l_x, l_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\
&= [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] && \text{правило (64)} \\
&= y[p_z, z]p_x + p_y[z, p_z]x && \text{правило (65)} \\
&= i\hbar(xp_y - yp_x) \\
&= i\hbar l_z.
\end{aligned}$$

Два других коммутатора могут быть получены циклической перестановкой. Получаем

$$[l_x, l_y] = i\hbar l_z, \quad [l_y, l_z] = i\hbar l_x, \quad [l_z, l_x] = i\hbar l_y. \tag{69}$$

Три компоненты момента импульса частицы не коммутируют друг с другом. Не существует полной ортонормированной системы собственных функций, общей для какой-нибудь пары компонент. Другими словами, две компоненты момента импульса в общем случае[13]) не могут быть одновременно точно определены.

Заметим, с другой стороны, что (правило (65))

$$\begin{aligned}
[l_z, l_x^2] &= i\hbar(l_y l_x + l_x l_y); \\
[l_z, l_y^2] &= -i\hbar(l_y l_x + l_x l_y); \\
[l_z, l_z^2] &= 0.
\end{aligned}$$

Складывая эти равенства, имеем (правило (64))

$$[l_z, \boldsymbol{l}^2] = 0, \tag{70}$$

где оператор

$$\boldsymbol{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 \tag{71}$$

есть квадрат длины вектора $\boldsymbol{l}$.

Операторы $\boldsymbol{l}^2$ и l_z коммутируют; следовательно, они могут быть одновременно точно определены. Пары $(\boldsymbol{l}^2, l_x)$ и $(\boldsymbol{l}^2, l_y)$ обладают тем же свойством.

---

[13]) Слова «в общем случае» имеют важное значение. Три компоненты не имеют общей базисной системы, но обладают общими собственными функциями, теми для которых $l_x = l_y = l_z = 0$; эти функции зависят только от модуля радиуса-вектора точки $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, но не от его направления.

§ 19. Изменение статистического распределения во времени. Интегралы движения

Запишем уравнение Шредингера вместе с комплексно сопряженным уравнением:

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

Если Ψ нормирована на единицу в начальный момент времени, она остается нормированной и в последующие моменты времени. Среднее значение наблюдаемой A в каждый момент времени выражается скалярным произведением

$$\langle A\rangle = \langle \Psi, A\Psi\rangle = \int \Psi^* A\Psi \, d\tau.$$

При этом

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t}, A\Psi\right\rangle + \left\langle \Psi, A\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right\rangle + \left\langle \Psi, \frac{\partial A}{\partial t}\Psi\right\rangle.$$

Последний член в правой части $\langle \partial A/\partial t\rangle$ равен нулю, если A не зависит явно от времени.

Используя уравнение Шредингера, а также свойство эрмитовости гамильтониана, получаем

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle H\Psi, A\Psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi, AH\Psi\rangle + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi, [A, H]\Psi\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle.$$

Отсюда следует общее уравнение, определяющее изменение во времени среднего значения A:

$$i\hbar \frac{d}{dt}\langle A\rangle = \langle [A, H]\rangle + i\hbar\left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle. \tag{72}$$

Заменяя A оператором $e^{i\xi A}$, получаем аналогичное уравнение для изменения во времени характеристической функции статистического распределения для A.

В частности, *для всякой наблюдаемой C, коммутирующей с гамильтонианом,*

$$[C, H] = 0,$$

и *от времени явно не зависящей*, получаем результат

$$\frac{d}{dt}\langle C\rangle = 0,$$

т. е. среднее значение наблюдаемой C остается постоянным во времени. Но если наблюдаемая C коммутирует с гамильтонианом H, то функция $e^{i\xi C}$ также коммутирует с H и поэтому

$$\frac{d}{dt}\langle e^{i\xi C}\rangle = 0.$$

т. е. характеристическая функция, а, следовательно, и статистическое распределение наблюдаемой C остаются постоянными во времени.

По аналогии с классической аналитической механикой наблюдаемая C называется постоянной движения (или интегралом движения). В частности, если в начальный момент времени волновая функция была собственной функцией C, принадлежащей данному собственному значению c, то это свойство сохраняется во времени. Тогда говорят, что c является «хорошим квантовым числом». Если, в частности, H от времени явно не зависит и если динамическое состояние системы в момент времени t_0 представляется собственной функцией, общей для операторов H и C, то волновая функция остается постоянной во времени с точностью до фазового множителя; энергия и динамическая переменная C остаются вполне определенными и постоянными во времени.

§ 20. Примеры интегралов движения. Энергия. Четность

Существует наблюдаемая, всегда коммутирующая с гамильтонианом — это сам гамильтониан. Поэтому энергия является постоянной движения для всех физических систем, гамильтониан которых от времени явно не зависит. Этот результат уже был доказан в § 12.

В качестве другой возможной постоянной движения укажем *четность* (ср. с § III. 14). Четностью называется наблюдаемая P, определяемая равенством

$$P\psi(q) = \psi(-q).$$

Нетрудно проверить, что P — эрмитов оператор. Кроме того, $P^2 = 1$ и, следовательно, единственно возможными собственными значениями P являются $+1$ и -1; значению $+1$ соответствуют четные функции, а значению -1 — функции нечетные.

Если гамильтониан инвариантен относительно замены $+q$ на $-q$, то

$$[P, H] = 0.$$

Действительно, если

$$H\left(-i\hbar\frac{d}{dq},\ q\right) = H\left(i\hbar\frac{d}{dq},\ -q\right),$$

то для любой функции $\psi(q)$:

$$PH\psi = H\left(i\hbar\frac{d}{dq},\ -q\right)\psi(-q) = H\left(-i\hbar\frac{d}{dq},\ q\right)\psi(-q) = HP\psi.$$

При этих условиях, если волновая функция имела некоторую четность в заданный начальный момент времени, то она будет сохранять эту четность и в дальнейшем.

Это свойство без труда может быть распространено на системы многих частиц, когда операция четности соответствует инверсии пространства ($\boldsymbol{r}_i \to -\boldsymbol{r}_i$), а наблюдаемая четности определяется равенством

$$P\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots) = \Psi(-\boldsymbol{r}_1, -\boldsymbol{r}_2, \ldots).$$

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Доказать неравенство Шварца $|\langle\varphi, \psi\rangle| \leqslant \sqrt{\langle\varphi, \varphi\rangle\langle\psi, \psi\rangle}$, основываясь только на свойствах а), б), в) скалярного произведения (§ 2). (Достаточно учесть тот факт, что норма некоторой линейной комбинации φ и ψ по определению положительна или равна нулю.) Показать, что равенство выполняется тогда и только тогда, когда функции φ и ψ пропорциональны друг другу.

2. Рассматривается задача на собственные значения оператора $p = -i\hbar\, d/dq$, действующего на функции $\psi(q)$, определенные на интервале $(-\infty, +\infty)$. Проверить, что спектр оказывается непрерывным и собственные функции имеют бесконечную норму. Показать, что с помощью суперпозиции собственных функций, принадлежащих близким собственным значениям, можно построить функции с конечной нормой (собственные дифференциалы), для которых квадратичное отклонение Δp может быть сделано сколь угодно малым. Исследовать тот же вопрос для оператора

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2}.$$

3. Рассматривается оператор q, действующий на функции $\psi(q)$ с конечной нормой на интервале $(-\infty, +\infty)$. а) Образовать последовательность непрерывных функций, зависящих от параметра η, таких, что их норма и среднее значение $\langle q\rangle$ остаются не зависящими от η, а квадратичное отклонение Δq стремится к нулю при $\eta \to 0$ (существует много последовательностей этого типа). Убедиться, что эта последовательность не сходится к функции, принадлежащей пространству Гильберта. б) Образовать аналогичным образом последовательность собственных дифференциалов (это функции с конечной нормой, но они не являются непрерывными), зависящую от параметра δq, путем суперпозиции собственных «функций» $\delta(q - q_0)$, соответствующих собственным значениям, расположенным в интервале δq, и проверить, что квадратичное отклонение Δq по отношению к этим собственным дифференциалам обладает тем же свойством.

4. Проверить, что статистическое распределение измерений некоторой данной величины определяется единственным образом, несмотря на большой произвол в выборе полной ортонормированной системы собственных функций оператора, представляющего эту физическую величину (произвол в выборе фаз собственных функций, произвол в выборе собственных функций вырожденного собственного значения, произвол в нормировке функций непрерывного спектра).

5. Каким образом распространить уравнения (20) и (21) этой главы на случай непрерывного спектра?

6. В полярных координатах (r, θ, φ) компонента l_z момента импульса частицы имеет вид $-i\hbar\, \partial/\partial\varphi$. Это наводит на мысль, что l_z и φ образуют пару дополнительных переменных. Однако, соотношение неопределенности $\Delta l_z \cdot \Delta\varphi \gtrsim \hbar$ не имеет смысла. Объяснить почему. Показать, что когда $\Delta l_z = 0$, угол φ полностью неопределен. Разложить в ряд по собственным функциям l_z волновой пакет

$$\psi(\varphi) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-\sigma(\varphi-\varphi_0+2n\pi)^2}.$$

Сравнить неопределенность по φ и неопределенность по l_z на этом примере и обсудить характер дополнительности указанных двух переменных.