Глава 14

ВЕРОЯТНОСТЬ И ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Состояния системы; наблюдаемые; измерение; вероятностные аксиомы для квантовомеханической системы; спектральные проекторы; ортогональность проекторов как следствие вероятностных аксиом; функция распределения для наблюдаемой; вероятностная основа для представления наблюдаемой в качестве самосопряженного оператора; математическое ожидание; дисперсия; неопределенность; квантовомеханический ансамбль; матрица плотности — положительно определенный оператор с единичным следом; функция ожидания; выражение неограниченных наблюдаемых через ограниченные; соотношения коммутации; банахова алгебра; C^*- и B^*-алгебры; представление B^*-алгебры через C^*-алгебру; положительно определенный элемент; положительный функционал; наблюдаемая с простым спектром; порождающий вектор; спектральное представление гильбертова пространства; полная система коммутирующих наблюдаемых; унитарные «наблюдаемые».

Предварительные сведения: гл. 1—9, 12, 13.

Эта глава посвящена обсуждению роли, которую играет вероятность в основаниях квантовой механики, и предварительному знакомству с той ролью, которую играет вероятность в квантовой статистической механике.

14.1. СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ. НАБЛЮДАЕМЫЕ

В квантовомеханическом описании некоторой физической системы (например, атома) предполагается, что каждое возможное состояние соответствует ненулевому элементу (вектору) φ в некотором гильбертовом пространстве H или, точнее говоря, лучу $\{a\varphi\colon a \in \mathbb{C}\}$, содержащему все кратные φ. Обратно, каждый луч в H соответствует возможному состоянию данной системы. Часто бывает удобно считать, что φ нормирован ($\|\varphi\| = 1$); вектор φ и в этом случае определен неоднозначно, так как любой вектор вида $e^{ia}\varphi$ (a вещественно) также может быть взят в качестве представителя рассматриваемого луча, т. е. состояния данной системы.

Обозначим через $\mathcal{A}$ вещественную наблюдаемую величину в классическом смысле, например энергию данной системы. С классической точки зрения $\mathcal{A}$ имеет определенное значение λ в каждом состоянии системы φ. С другой стороны, в квантовой теории допускается, что если данную систему неоднократно приводить в состояние φ и каждый раз измерять $\mathcal{A}$, то, вообще говоря, получатся различные значения λ, λ', λ'', ..., подчиняющиеся, однако, некоторому вероятностному закону. Пусть $F(\cdot)$ —

функция распределения для этих значений (см. гл. 13), такая, что для любого вещественного λ

$$F(\lambda_0) = \mathbf{P}\{\lambda \leqslant \lambda_0\},$$

где $\mathbf{P}$ обозначает вероятность; функция F зависит, конечно, от начального состояния φ.

Далее, при измерении наблюдаемой $\mathcal{A}$ в общем случае происходит возмущение системы, так что после каждого измерения она оказывается в различных состояниях ψ, ψ', ψ'', ... Эти конечные состояния распределены (в $\boldsymbol{H}$) по некоторому вероятностному закону (также зависящему от начального состояния φ), и ψ взаимосвязаны с λ определенным образом (как именно, будет объяснено ниже). Предполагается, что после каждого измерения $\mathcal{A}$ данная физическая система приводится в начальное состояние φ до осуществления нового измерения.

Из описанных ниже простых аксиом квантовой механики будет следовать, что каждой наблюдаемой $\mathcal{A}$ можно поставить в соответствие самосопряженный оператор A в $\boldsymbol{H}$. Функция распределения $F(\cdot)$ значений $\mathcal{A}$ для данного состояния φ тогда будет выражена через A и φ при помощи формулы (14.3.7).

14.2. ВЕРОЯТНОСТИ: КОНЕЧНАЯ МОДЕЛЬ

Сначала будут сформулированы аксиомы для модели, в которой имеется лишь конечное число возможных конечных состояний (нормированных векторов) $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$, называемых *собственными состояниями* наблюдаемой $\mathcal{A}$, которые могут быть получены в результате измерения. В каждом состоянии ψ_i $\mathcal{A}$ имеет единственное вещественное значение λ_i, которое рассматривается как значение некоторой физической величины, когда система находится в состоянии ψ_i. Числа $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ будем условно называть *собственными значениями*, хотя пока что с $\mathcal{A}$ не было связано никакой матрицы или оператора. Предварительно мы допустим, что все λ_i различны; как будет показано ниже, это допущение легко обойти, несколько изменив формулы. Из аксиом будет следовать, что собственные состояния порождают пространство $\boldsymbol{H}$, которое, следовательно, в данной модели n-мерно.

Основная аксиома разбивается на две части.

(а) Если $\mathcal{A}$ измеряется, когда система находится в состоянии, представляющем собой линейную суперпозицию собственных состояний, т. е. в состоянии вида

$$\varphi = \sum_{j=1}^{n} c_j \psi_j, \tag{14.2.1}$$

то вероятность получения в результате измерения значения λ_k пропорциональна квадрату нормы k-го члена суммы, т. е.

$$\mathbf{P}\{\lambda=\lambda_k\}=\mathrm{const}\cdot|c_k|^2. \tag{14.2.2}$$

(б) Если в результате измерения получается значение λ_k, то система находится в состоянии ψ_k.

Если $\varphi=c_k\psi_k$ (все остальные c_j равны нулю), то измеренное значение равно λ_k (и система не возмущена данным измерением); поэтому коэффициент пропорциональности в (14.2.2) равен $\|\varphi\|^{-2}$ (вспомним, что $\|\psi_k\|=1$). Таким образом, в общем случае

$$\mathbf{P}\{\lambda=\lambda_k\}=|c_k|^2/\|\varphi\|^2. \tag{14.2.3}$$

Из сформулированных выше аксиом следует, что ψ_j ортогональны. В самом деле, поскольку сумма вероятностей (14.2.3) равна единице, мы имеем

$$\sum_{j=1}^{n}|c_j|^2=\|\varphi\|^2=(\varphi,\varphi)=\sum_{j,\,k=1}^{n}\bar{c}_jc_k(\psi_j,\psi_k). \tag{14.2.4}$$

Это тождество относительно c_i, и значит,

$$(\psi_j,\psi_k)=\delta_{jk}. \tag{14.2.5}$$

Отсюда следует, что $c_j=(\psi_j,\varphi)$ для каждого j. Таким образом, аксиома (а) принимает вид

$$\mathbf{P}\{\lambda=\lambda_k\}=|(\psi_k,\varphi)|^2/\|\varphi\|^2. \tag{14.2.6}$$

(В том случае, когда не все λ_i различны, суммирование в правой части следует проводить по всем k, для которых $\lambda_k=\lambda$.) Теперь мы допустим, что (14.2.6) справедливо для всех φ из гильбертова пространства $\boldsymbol{H}$ (которое до сих пор не было определено). Так как сумма вероятностей равна 1, мы имеем

$$\sum_{j=1}^{n}|(\psi_j,\varphi)|^2=\|\varphi\|^2 \quad \text{для любого } \varphi\in\boldsymbol{H}. \tag{14.2.7}$$

В силу теоремы 1 из § 1.6 отсюда следует, что векторы $\psi_1,\ldots,\psi_n$ образуют полную ортонормированную систему в $\boldsymbol{H}$. В этой модели $\boldsymbol{H}$ представляет собой n-мерное комплексное векторное пространство V^n, причем каждый вектор φ имеет вид (14.2.1).

Приведем теперь для n-мерного случая данную аксиому к такому виду, который допускал бы простое обобщение на случай бесконечного числа (быть может, непрерывно распределенных) измеряемых возможных значений λ наблюдаемой $\mathcal{A}$. Впредь будем предполагать, что начальное состояние представляется нормированным вектором, т. е. что $\|\varphi\|=1$.

Пусть Δ — конечный или бесконечный интервал в $\mathbb{R}$, и пусть

$$\mathbf{M}(\Delta)=\text{Линейная оболочка множества } \{\psi_j\colon \lambda_j\in\Delta\}, \tag{14.2.8}$$

т. е. $M(\Delta)$ — подпространство n-мерного пространства, состоящее из линейных комбинаций тех собственных состояний, для которых соответствующие собственные значения лежат в Δ. Обозначим через $P(\Delta)$ ортогональный проектор H на $M(\Delta)$; иначе говоря, если φ задан в виде (14.2.1), то

$$P(\Delta)\varphi = \sum_{\lambda_j \in \Delta} c_j \psi_j. \tag{14.2.9}$$

В силу ортонормированности ψ_j и нормировки φ из (14.2.6) следует, что распределение вероятности определяется как

$$\mathbf{P}\{\lambda \in \Delta\} = \| P(\Delta)\varphi \|^2, \tag{14.2.10}$$

что и является искомым видом аксиомы вероятности. Более того, если измеренное значение лежит в Δ, то последующее состояние системы представляется вектором в области значений проектора $P(\Delta)$, т. е. в $M(\Delta)$.

Пусть теперь Δ и Δ' — два любых непересекающихся интервала ($\Delta \cap \Delta'$ пусто). Из ортогональности ψ_j следует, что

$$M(\Delta) \perp M(\Delta'), \tag{14.2.11}$$

или

$$P(\Delta)P(\Delta') = P(\Delta')P(\Delta) = 0. \tag{14.2.12}$$

Наконец, соотношение полноты (14.2.7) эквивалентно следующему требованию:

$$P(\Delta) = I, \quad \text{если } \Delta = (-\infty, \infty), \tag{14.2.13}$$

так что $M(\mathbb{R}) = H$. Четыре последних соотношения (14.2.10) — (14.2.13) непосредственно переносятся на бесконечномерный случай.

14.3. ВЕРОЯТНОСТИ: ОБЩИЙ СЛУЧАЙ (H БЕСКОНЕЧНОМЕРНО)

Для того чтобы обосновать аксиомы, рассмотрим следующую пару физических операций, повторяемых бесконечное число раз:

1) физическая система приводится в состояние φ;

2) измеряется наблюдаемая $\mathcal{A}$.

Пусть $\lambda^{(i)}$ — измеренное значение $\mathcal{A}$ (вещественное число), полученное при i-м повторении, а $\psi^{(i)}$ — конечное состояние системы. Для любого интервала Δ на $\mathbb{R}$ определим

$$M(\Delta) = \text{Подпространство пространства } H, \text{ порожденное векторами } \{\psi^{(i)}: \text{все } i, \text{ такие, что } \lambda^{(i)} \in \Delta\}. \tag{14.3.1}$$

Как и в конечной модели, мы допускаем, что $\lambda^{(i)}$ однозначно определяется конечным состоянием $\psi^{(i)}$, так что никакие два различных λ не могут соответствовать одному и тому же ψ.

Поэтому если Δ_1 и Δ_2 — непересекающиеся интервалы, то $\boldsymbol{M}(\Delta_1)$ и $\boldsymbol{M}(\Delta_2)$ — непересекающиеся многообразия, иначе говоря, они имеют в качестве общего элемента лишь нулевой вектор. По дальнейшей аналогии с конечной моделью допустим, что любой вектор ψ из $\boldsymbol{H}$ является возможным результатом измерения, так что все эти многообразия в совокупности порождают $\boldsymbol{H}$. Это делает возможным следующее определение проекторов $P(\Delta)$: пусть Δ_1, Δ_2 и Δ_3 — непересекающиеся интервалы, объединение которых совпадает с $\mathbb{R}$, например $(-\infty, a]$, $(a, b]$, (b, ∞); тогда $\boldsymbol{M}(\Delta_1)$, $\boldsymbol{M}(\Delta_2)$ и $\boldsymbol{M}(\Delta_3)$ — непересекающиеся многообразия, которые порождают $\boldsymbol{H}$. Если произвольный $x \in \boldsymbol{H}$ представлен в виде $x_1 + x_2 + x_3$, где $x_i \in \boldsymbol{M}(\Delta_i)$, мы полагаем $x_i = P(\Delta_i)x$ ($i = 1, 2, 3$) и таким образом определяем проектор $P(\Delta)$ для произвольного интервала Δ. Вскоре мы увидим, что $P(\Delta)$ являются *ортогональными* проекторами.

Итак, мы приходим к следующим аксиомам относительно распределения значений (λ) наблюдаемой $\mathcal{A}$.

1. Для любого интервала Δ на $\mathbb{R}$ существует проектор $P(\Delta)$ (зависящий от $\mathcal{A}$), такой, что если начальное состояние есть φ ($\|\varphi\| = 1$), то

$$\mathbf{P}\{\lambda \in \Delta\} = \|P(\Delta)\varphi\|^2. \tag{14.3.2}$$

2. Если в результате измерения $\mathcal{A}$ получается значение, лежащее в Δ, то конечное состояние системы принадлежит многообразию

$$\boldsymbol{M}(\Delta) = \boldsymbol{R}(P(\Delta)).$$

Из этих аксиом следует, что если Δ_1, Δ_2 — непересекающиеся интервалы, то

$$P(\Delta_1)P(\Delta_2) = 0 = P(\Delta_2)P(\Delta_1),$$

а если $\Delta_1 \subset \Delta_2$, то

$$P(\Delta_1)P(\Delta_2) = P(\Delta_1) = P(\Delta_2)P(\Delta_1).$$

Следовательно, достаточно рассмотреть проекторы

$$E_{\lambda_0} \overset{\text{def}}{=} P((-\infty, \lambda_0]) \quad (-\infty < \lambda_0 < \infty), \tag{14.3.3}$$

поскольку тогда, например,

$$P((a, b]) = E_b - E_a.$$

Покажем теперь, что эти проекторы ортогональны, т. е. являются самосопряженными операторами, так что, например, для непересекающихся интервалов Δ_1 и Δ_2 многообразия $\boldsymbol{M}(\Delta_1)$ и $\boldsymbol{M}(\Delta_2)$ ортогональны (см. § 9.2). Пусть φ и ψ — произвольные элементы этих многообразий, соответствующих интервалам $(-\infty, \lambda_0]$ и (λ_0, ∞), т. е.

$$\varphi \in \boldsymbol{M}((-\infty, \lambda_0]), \quad \psi \in \boldsymbol{M}((\lambda_0, \infty)). \tag{14.3.4}$$

Если система первоначально находится в состоянии $\alpha\varphi+\beta\psi$ (α и β — произвольные числа), то

$$\mathbf{P}(\lambda \leqslant \lambda_0) = \frac{\|\alpha\varphi\|^2}{\|\alpha\varphi+\beta\psi\|^2}, \quad \mathbf{P}(\lambda > \lambda_0) = \frac{\|\beta\psi\|^2}{\|\alpha\varphi+\beta\psi\|^2}, \qquad (14.3.5)$$

откуда следует, что

$$\|\alpha\varphi\|^2 + \|\beta\psi\|^2 = \|\alpha\varphi+\beta\psi\|^2 = (\alpha\varphi+\beta\psi,\ \alpha\varphi+\beta\psi).$$

Раскрывая скалярное произведение, получаем

$$2\,\mathrm{Re}\,\bar{\alpha}\beta\,(\varphi,\ \psi) = 0.$$

Так как α и β произвольны, мы имеем $(\varphi, \psi) = 0$, и поэтому многообразия (14.3.4) ортогональны. Следовательно, E_{λ_0}, определенный в (14.3.3), является ортогональным проектором (см. упражнение ниже). Видно, что семейство проекторов $E_\lambda\,(-\infty < \lambda < \infty)$ имеет все свойства разложения единицы (см. § 9.6). В частности, соотношения

$$E_\lambda \to 0 \text{ (сильно) при } \lambda \to -\infty,$$
$$E_\lambda \to I \text{ (сильно) при } \lambda \to +\infty$$

получаются из допущения, что $\mathcal{A}$ всегда может быть измерена (или наблюдена), когда система находится в произвольном состоянии $\varphi \in \boldsymbol{H}$, и что полученное значение λ всегда является вещественным числом.

Тогда формула

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda\, dE_\lambda \qquad (14.3.6)$$

определяет самосопряженный оператор A, который можно рассматривать как математическое представление наблюдаемой $\mathcal{A}$. Возможные измеряемые значения $\mathcal{A}$ составляют спектр оператора A.

Из (14.3.2) видно, что если система находится в состоянии φ ($\|\varphi\| = 1$), то функция распределения λ имеет вид

$$F(\lambda_0) \overset{\mathrm{def}}{=} \mathbf{P}\{\lambda \leqslant \lambda_0\} = \|E_{\lambda_0}\varphi\|^2 = (\varphi, E_{\lambda_0}\varphi). \qquad (14.3.7)$$

В этом определении отражается основной физический смысл семейства проекторов E_λ.

Упражнение

1. Покажите, что если области значений проекторов P и $I-P$ ортогональны, то P самосопряжен.

14.4. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОЖИДАНИЯ. ОБЛАСТЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ A

В этом параграфе мы покажем, что область определения самосопряженного оператора A, который соответствует наблюдаемой $\mathcal{A}$, допускает следующую интерпретацию: данный элемент φ из $\boldsymbol{H}$

принадлежит области определения A тогда и только тогда, когда распределение вероятности значений $\mathcal{A}$ имеет конечную дисперсию, если система находится в состоянии φ.

Функцией распределения измеряемых значений $\mathcal{A}$, когда система находится в состоянии φ, является функция $F(\cdot)$, определенная в (14.3.7). Поэтому математические ожидания получаются следующим образом: математическое ожидание или среднее самой величины $\mathcal{A}$, обозначаемое через $\mathbf{E}(\mathcal{A};\ \varphi)$, есть

$$\mathbf{E}(\mathcal{A};\ \varphi)=\int_{-\infty}^{\infty}\lambda d(\varphi,\ E_{\lambda}\varphi)\overset{\text{def}}{=}\lambda_0, \tag{14.4.1}$$

дисперсия есть

$$\mathbf{E}((\mathcal{A}-\lambda_0)^2;\ \varphi)=\int_{-\infty}^{\infty}(\lambda-\lambda_0)^2\,d(\varphi,\ E_{\lambda}\varphi), \tag{14.4.2}$$

и если $f(\cdot)$ — любая непрерывная функция, то

$$\mathbf{E}(f(\mathcal{A});\ \varphi)=\int_{-\infty}^{\infty}f(\lambda)\,d(\varphi,\ E_{\lambda}\varphi), \tag{14.4.3}$$

причем во всех случаях мы исходим из допущения, что интегралы сходятся при $\lambda=\pm\infty$.

Согласно § 9.10, если A — самосопряженный оператор, E_{λ} — соответствующее ему разложение единицы, а $f(\lambda)$ — любая непрерывная функция, определенная для вещественных значений λ, то оператор $f(A)$ определяется следующим образом: во-первых,

$$\mathbf{D}(f(A))=\left\{\varphi\colon\ \int_{-\infty}^{\infty}|f(\lambda)|^2\,d(\varphi,\ E_{\lambda}\varphi)<\infty\right\} \tag{14.4.4}$$

(эта область является плотной в $\boldsymbol{H}$); во-вторых, для любого $\varphi\in\mathbf{D}(f(A))$

$$f(A)\,\varphi=\int_{-\infty}^{\infty}f(\lambda)\,dE_{\lambda}\varphi. \tag{14.4.5}$$

Поэтому интеграл в (14.4.3) сходится, в частности, если $\varphi\in\in\mathbf{D}(f(A))$. Для таких φ интеграл в (14.4.5) сходится сильно, т. е. представляет собой сильный предел в $\boldsymbol{H}$ последовательности интегралов $\int_{-n}^{n}f(\lambda)\,dE_{\lambda}\varphi$ при $n\to\infty$. Следовательно, из (14.4.1)—(14.4.3) следует, что

$$\mathbf{E}(\mathcal{A};\ \varphi)=(\varphi,\ A\varphi)\qquad \text{для}\quad \varphi\in\mathbf{D}(A), \tag{14.4.6}$$

$$\mathbf{E}((\mathcal{A}-\lambda_0)^2;\ \varphi)=(\varphi,\ (A-\lambda_0)^2\,\varphi)\qquad \text{для}\quad \varphi\in\mathbf{D}(A^2), \tag{14.4.7}$$

$$\mathbf{E}(f(\mathcal{A});\varphi)=(\varphi,\ f(A)\,\varphi)\qquad \text{для}\quad \varphi\in\mathbf{D}(f(A)). \tag{14.4.8}$$

[Поскольку $\mathcal{A}$ может быть любой наблюдаемой, последние два равенства являются всего лишь частными случаями (14.4.6) для наблюдаемых $(\mathcal{A}-\lambda_0)^2$ и $f(\mathcal{A})$ соответственно.] Вообще говоря, эти формулы могут быть взяты за основу аксиоматической трактовки квантовой теории, но в некоторых отношениях предпочтительней трактовка, предложенная в предыдущем параграфе, потому что в ней *существование* самосопряженного оператора A, соответствующего наблюдаемой $\mathcal{A}$, следует из вероятностной интерпретации квантовой механики. Более того, распределение вероятности, заданное формулой (14.3.7) для измеряемых значений $\mathcal{A}$ в состоянии φ, вполне определено для любого φ, а не только для φ, принадлежащих области $\boldsymbol{D}(A)$. В силу формулы (9.8.5) φ принадлежит $\boldsymbol{D}(A)$ тогда и только тогда, когда второй момент этого распределения конечен, т. е. когда дисперсия (14.4.2) конечна, как утверждалось в начале данного параграфа. В этом случае дисперсия равна $\|(A-\lambda_0)\varphi\|^2/\|\varphi\|^2$, где λ_0 — среднее значение A, заданное посредством (14.4.1). *Неопределенность* $\mathcal{A}$ (или A) *в состоянии* φ есть квадратный корень из дисперсии (называемый в статистике стандартным отклонением). Неопределенность равна $\|(A-\lambda_0)\varphi\|$, если φ нормирован и принадлежит $\boldsymbol{D}(A)$, и бесконечна, если $\varphi \notin \boldsymbol{D}(A)$.

Упражнение

1. В соотношении коммутации $pq-qp=-i\hbar$ координата q и соответствующий импульс p являются неограниченными операторами, и значит, это равенство не имеет смысла как соотношение для операторов. Здесь имеется в виду, что для любого ψ, принадлежащего как области определения pq, так и области определения qp, т. е. для $\psi \in \boldsymbol{D}(pq) \cap \boldsymbol{D}(qp)$, справедливо уравнение

$$(pq-qp)\psi = -i\hbar\psi. \tag{14.4.9}$$

Далее, чтобы придать этому соотношению достаточную силу, естественно допустить, что $\boldsymbol{D}(pq) \cap \boldsymbol{D}(qp)$ плотно в $\boldsymbol{H}$. Покажите, что если Δp и Δq — неопределенности p и q в состоянии ψ, то

$$\Delta p \Delta q \geqslant \hbar/2. \tag{14.4.10}$$

В качестве другой предельной ситуации рассмотрим случай, когда ψ не принадлежит даже $\boldsymbol{D}(p) \cap \boldsymbol{D}(q)$. В этом случае хотя бы одна из неопределенностей (Δp или Δq) бесконечна и ни одна из них не равна нулю, так что (14.4.10) все еще остается в силе. Что можно сказать о случае, когда ψ принадлежит $\boldsymbol{D}(p) \cap \boldsymbol{D}(q)$, но не принадлежит $\boldsymbol{D}(pq) \cap \boldsymbol{D}(qp)$?

Обсуждение соотношений коммутации будет продолжено в § 14.6.

Определение (14.4.4), (14.4.5) для $f(A)$ справедливо также для комплекснозначной $f(\cdot)$. В частности, если $f(\lambda)=e^{it\lambda}$, то характеристической функцией распределения будет

$$\chi(t) = \mathbf{E}(e^{it\mathcal{A}};\ \varphi) = (\varphi,\ e^{itA}\varphi),$$

где e^{itA} — унитарный оператор, определенный во всем $\boldsymbol{H}$. [В этом случае условие конечности интеграла (14.4.4) выполняется для всех φ — в самом деле, значение этого интеграла просто равно $\|\varphi\|^2$.] Если A — гамильтониан H, то e^{itH} представляет собой оператор, описывающий эволюцию физической системы во времени: $\varphi(t) = e^{-i\hbar tH}\varphi(0)$.

14.5. МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ

До сих пор мы сталкивались с двумя различными видами недетерминированности измерения: во-первых, классический вид, связанный лишь с недостаточным знанием состояния системы (в принципе можно было бы полностью предсказать движение брошенной монеты, располагая точными начальными данными, но на практике исход случаен); во-вторых, квантовомеханический вид, когда вообще существует специфическая неопределенность значения наблюдаемой $\mathcal{A}$, даже если система находится в точно определенном состоянии φ. Для целей квантовой механики необходимо скомбинировать оба вида неопределенности. Это достигается путем рассмотрения больших ансамблей идентичных невзаимодействующих физических систем. Так же, как в классическом случае, предполагается, что каждая система из ансамбля находится в определенном состоянии, но различные системы находятся в различных состояниях, и когда мы случайным образом выбираем одну из этих систем, то получаем случайный результат с некоторой вероятностью, которая зависит как от структуры ансамбля, так и от квантовомеханических неопределенностей, связанных с индивидуальными системами.

Сначала рассмотрим конечную модель из § 14.2, в которой любой вектор φ, определяющий состояние системы, можно представить в виде $\sum_{j=1}^{n} c_j \psi_j$, где $\{\psi_1, \ldots, \psi_n\}$ — ортонормированная система. Тогда, полагая $c_j = (x_j + iy_j)$, каждому состоянию можно поставить в соответствие точку из $\mathbb{R}^{2n}$ с координатами $(x_1, \ldots, x_n, y_1, \ldots, y_n) = \mathbf{x}$. В случае $\|\varphi\| = 1$ $\sum (x_j^2 + y_j^2) = 1$ и точка лежит на единичной сфере в $\mathbb{R}^{2n}$. Для того чтобы описать ансамбль из N систем ($N \gg 1$), каждой системе можно сопоставить точку на единичной сфере, а затем ввести плотность $\rho = \rho(\mathbf{x})$ таких точек, т. е. число точек на единицу площади $(2n-1)$-мерной поверхности сферы.

Только что описанный метод непригоден для случая бесконечного числа измерений, поскольку, как было указано в § 13.11, в этом случае невозможно сколь-нибудь разумным образом определить объем. Обратившись непосредственно к вероятностям, можно избежать этой трудности, а тем самым избежать и попытки описания распределения состояний в $\boldsymbol{H}$. Сначала рассмотрим дискретную модель. Допустим, что $\{\varphi_k\}$ — некоторая конечная или счетная совокупность нормированных состояний (не обязательно предполагать их ортогональность или даже линейную независимость); допустим далее, что каждая из систем рассматриваемого ансамбля находится в одном из этих состояний. Обозначим через p_k долю полного числа N ($\gg 1$) систем, находящихся в состоянии φ_k, так что если некую систему случайно выбрать из ансамбля, то p_k определяет вероятность того, что она находится в состоянии φ_k. Если A — самосопряженный оператор, соответствующий некоторой ограниченной наблюдаемой, то математическое ожидание A, когда система находится в состоянии φ, равно $(\varphi, A\varphi)$; см. предыдущий параграф. Поэтому математическое ожидание A для всего ансамбля составляет

$$\mathsf{E}(A) = \sum_k p_k (\varphi_k, A\varphi_k). \tag{14.5.1}$$

Согласно § 12.3, $(\varphi_k, A\varphi_k)$ равно $\operatorname{tr}(P_{\varphi_k} A)$, где P_{φ_k} — ортогональный проектор пространства $\boldsymbol{H}$ на одномерное подпространство, содержащее φ_k, и где tr означает trace (след). Следовательно, $\mathsf{E}(A) = \operatorname{tr}(DA)$, где через D обозначен оператор

$$D = \sum_k p_k P_{\varphi_k}. \tag{14.5.2}$$

Каждый оператор P_{φ_k} самосопряжен, положительно определен и является ядерным оператором со следом, равным единице, как это следует из § 12.3. Поскольку каждая вероятность p_k неотрицательна и $\sum p_k = 1$, видно, что D также положительно определен и имеет след, равный единице.

Если начальная совокупность состояний $\{\varphi_k\}$ плотна на единичной сфере в $\boldsymbol{H}$, то любой ансамбль систем можно аппроксимировать при помощи некоторой дискретной модели; поэтому можно получить основную аксиому статистической квантовой механики, принадлежащую фон Нейману, просто опустив условие дискретности.

Аксиома. Любому ансамблю идентичных невзаимодействующих квантовомеханических систем можно поставить в соответствие ядерный положительно определенный оператор D с единичным следом, называемый *матрицей плотности* данного ансамбля. Математическое ожидание любого ограниченного самосопряженного оператора (наблюдаемой) A задается для данного ансамбля величиной

$$\mathsf{E}(A) = \operatorname{tr}(DA). \tag{14.5.3}$$

Фон Нейман доказал следующее утверждение. Допустим, что $\mathsf{E}(\cdot)$ — любая вещественнозначная функция, определенная для всех ограниченных самосопряженных операторов в некотором гильбертовом пространстве, причем функция обладает свойствами линейности и положительности (это, очевидно, необходимые свойства, если $\mathsf{E}(\cdot)$ рассматривать как математическое ожидание), а именно:

$$\mathsf{E}(aA + bB) = a\mathsf{E}(A) + b\mathsf{E}(B) \quad (a,\ b \text{ вещественны}),$$
$$\mathsf{E}(A) \geqslant 0, \quad \text{если } A \text{ положительно определен.}$$

Тогда существует положительно определенный ядерный оператор D, такой, что $\mathbf{E}(A) = \operatorname{tr}(DA)$ для всех A. Если к тому же $\mathbf{E}(I) = 1$, где I — единичный оператор, то $\operatorname{tr} D = 1$. Это показывает, что описание при помощи матрицы плотности является совершенно общим.

Все статистические величины можно выразить через $\mathbf{E}(\cdot)$. Например, дисперсия A равна $\mathbf{E}(A^2) - (\mathbf{E}(A))^2$. Если функция $f_x(t)$ равна единице при $t \leqslant x$ и равна нулю при $t > x$, то $F(x)$, определенная как $\mathbf{E}(f_x(A))$, представляет собой функцию распределения A для данного ансамбля.

На первый взгляд может показаться, что рассмотрение лишь ограниченных операторов снижает действие этой теории, но на самом деле для физических применений не возникает никаких помех. Если A — неограниченный самосопряженный оператор, а $f(t)$ — ограниченная возрастающая функция, скажем $f(t) = \operatorname{th}(t)$, то оператор $B = f(A)$ ограничен. В этом случае измерение B дает точно такую же информацию о системе, что и измерение A; если b — измеряемое значение B, то соответствующим измеряемым значением A является $\operatorname{ar}\operatorname{th} b$. (См. также упражнение 4 в следующем параграфе.)

Упражнение

1. Допустим, что система представляет собой атом, который имеет в точности два энергетических состояния с векторами состояния ψ_1 и ψ_2. Оператор D может быть представлен в виде (2×2)-матрицы с матричными элементами $D_{jk} = (\psi_j, D\psi_k)$. Вычислите эту матрицу в трех следующих случаях и проверьте, что она положительно определена и имеет единичный след. (1) Половина систем (атомов) ансамбля находится в состоянии ψ_1, а другая половина — в состоянии ψ_2. (2) Все системы ансамбля находятся в одном и том же состоянии, вектор которого представлен в виде $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$, где α и β — некоторые постоянные, такие, что $|\alpha|^2 \times |\beta|^2 = 1$. Покажите, что в этом случае собственные значения матрицы D_{jk} равны нулю и единице, и обобщите этот результат на системы (атомы), имеющие любое конечное число энергетических состояний. (3) Системы находятся в различных состояниях, так что если вектор состояния записать в виде $\psi_1 \sin\theta e^{i\varphi_1} + \psi_2 \cos\theta e^{i\varphi_2}$, то все значения углов θ, φ_1 и φ_2 равновероятны в ансамбле.

Обратим внимание на то, что первый и третий ансамбли в этом упражнении имеют одинаковые статистические свойства, хотя при их построении используются совершенно различные векторы состояния. Это одна из причин, почему многие из тех, кто работает в области статистической квантовой механики (или квантовой статистики), предпочитают чисто алгебраическую формулировку квантовой механики (кратко описанную в следующем параграфе), в которой гильбертовы пространства и векторы состояния вообще не используются.

Матрицу плотности можно рассматривать в связи не с ансамблем, а лишь с единственной системой, истинное состояние которой нам неизвестно; в первом примере упражнения мы полагаем, что система равновероятно может находиться как в состоянии 1, так и в состоянии 2, но мы не знаем, в каком именно; заметим, что это весьма отличается от уверенности в том, что система находится в состоянии $(1/\sqrt{2})\ (\psi_1+\psi_2)$.

14.6. АЛГЕБРЫ ОГРАНИЧЕННЫХ ОПЕРАТОРОВ. КАНОНИЧЕСКИЕ СООТНОШЕНИЯ КОММУТАЦИИ

В предыдущем параграфе было отмечено, что свойства квантовомеханической системы могут быть выражены исключительно через ограниченные наблюдаемые и что с некоторых точек зрения описание более фундаментально, если оно не ссылается на векторы состояния в гильбертовом пространстве.

Множество $\boldsymbol{A}$ всех ограниченных операторов (не обязательно самосопряженных) в гильбертовом пространстве образует алгебру, называемую *C^*-алгеброй*. В более общей формулировке $\boldsymbol{A}$ не обязано содержать *все* ограниченные операторы, но от этого множества требуется: во-первых, быть замкнутым по отношению к операциям умножения (AB) и образования линейных комбинаций ($aA+bB$; a, $b\in\mathbb{C}$), во-вторых, содержать сопряженный оператор A^* для любого $A\in\boldsymbol{A}$, в-третьих, быть полным пространством. Последнее означает, что если $\|A_n-A_m\|\to 0$ при n, $m\to\infty$, то найдется оператор $A\in\boldsymbol{A}$, такой, что $\|A_n-A\|\to 0$ при $n\to\infty$. Данная алгебра обладает следующими свойствами.

1. Это полное нормированное линейное пространство, и следовательно, банахово пространство (см. гл. 15). Нормой элемента A является его операторная норма $\|A\|$.

3. Определено ассоциативное умножение: если A, B, C принадлежат $\boldsymbol{A}$, то $\boldsymbol{A}$ принадлежат также AB и т. д.; $(AB)C=$ $=A(BC)$; $\|AB\|\leqslant\|A\|\|B\|$; $(aA)(bB)=(ab)(AB)$.

2. Умножение дистрибутивно: $A(B+C)=AB+AC$, $(A+B)C=$ $=AC+BC$.

4. *Инволюция* $A\to A^*$ определена так, что $(A^*)^*=A$, $(A+B)^*=$ $=A^*+B^*$, $(AB)^*=B^*A^*$, $(aA^*)=\bar{a}A^*$.

5. $\|A^*A\|=\|A\|^2$ (откуда следует, что $\|A^*\|=\|A\|$).

6. В алгебре содержится единица I, так что $AI=IA=A$.

(Комплексная) *B^*-алгебра* определяется как *абстрактная* алгебра, обладающая свойствами 1—5. В данном кратком изложений мы допустим для нее также свойство 6 (существование единицы).

Замечания. Иногда рассматривают соответствующие вещественные алгебры. Например, алгебра коммутирующих самосопряженных ограниченных операторов является одной из таких алгебр, если скаляры a, b ограничиваются вещественным полем $\mathbb{R}$. В случае некоммутирующих операторов нельзя избежать несамосопряженных элементов, ибо, допустив $A^*=A$ и $B^*=B$, получим, что

$(AB)^* = AB$ тогда и только тогда, когда $AB = BA$. Известное равенство $pq - qp = \hbar/i$ показывает, что в этом случае нельзя также избежать невещественных скаляров.

Некоторые авторы, например Рикарт (но не все), рассматривают B^*-алгебру как абстрактную, а C^*-алгебру как алгебру ограниченных операторов в гильбертовом пространстве. Основная теорема утверждает, что любую B^*-алгебру можно представлять себе как C^*-алгебру, т. е. что B^*-алгебра изометрически изоморфна некоторой алгебре ограниченных линейных операторов в некотором гильбертовом пространстве (это соответствие неоднозначно). Эти алгебры являются частными случаями более общих *банаховых* алгебр, возможно, не обладающих некоторыми из свойств 4, 5 и 6 (или всеми этими свойствами).

Упражнения

1. Проверьте, что для ограниченных операторов $\|AB\| \leqslant \|A\| \|B\|$ и $\|A^*A\| = \|A\|^2$.

2. Для B^*-алгебры с единицей покажите, что $I^* = I$, $\|I\| = 1$. Покажите, что $(A^{-1})^* = (A^*)^{-1}$, если элемент A имеет обратный A^{-1}. (Элемент B называется *обратным* A и обозначается через A^{-1}, если $AB = I$ *и* $BA = I$.)

3. Допустим, что $F(\cdot)$ — некоторый вещественный линейный функционал, определенный для самосопряженных элементов B^*-алгебры $\boldsymbol{A}$. [Например, в качестве $F(\cdot)$ можно взять математическое ожидание $\mathrm{E}(\cdot)$, рассмотренное в предыдущем параграфе.] Для любого $A \in \boldsymbol{A}$, положив $B = (A + A^*)/2$, $C = (A - A^*)/(2i)$, определите $F_1(A) = F(B) + iF(C)$ и покажите, что $F_1(\cdot)$ — линейное расширение (уже невещественное) на все элементы $\boldsymbol{A}$. [В частности, покажите, что $F_1(aA) = aF_1(A)$ для любого комплексного числа a.]

Теперь приведем без доказательства несколько основных фактов относительно B^*-алгебр.

В любой банаховой алгебре $\boldsymbol{A}$ с единицей *спектр* элемента A, $\sigma(A)$, представляет собой множество всех комплексных чисел λ, таких, что элемент $\lambda I - A$ не имеет обратного в $\boldsymbol{A}$. [Это согласуется с определением, данным в гл. 7, если $\boldsymbol{A}$ — алгебра всех ограниченных операторов в гильбертовом пространстве.]

С нашей точки зрения, теория общих банаховых алгебр имеет следующий недостаток: если $\boldsymbol{A}$ — подалгебра банаховой алгебры $\boldsymbol{B}$, то спектры данного элемента A относительно этих двух алгебр могут не совпадать, поскольку $\lambda I - A$ может иметь обратный в $\boldsymbol{B}$, но не иметь обратного в $\boldsymbol{A}$. Поэтому надо различать $\sigma_{\boldsymbol{A}}(A)$ и $\sigma_{\boldsymbol{B}}(A)$. Однако в частном случае B^*-алгебр с единицей и $\boldsymbol{A} \subset \boldsymbol{B}$ в том смысле, что $\boldsymbol{A}$ — подмножество $\boldsymbol{B}$ и само является B^*-алгеброй с той же единицей, той же нормой, теми же умножением и сопряжением, как и в $\boldsymbol{B}$, спектры $\sigma_{\boldsymbol{A}}(A)$ и $\sigma_{\boldsymbol{B}}(A)$ совпадают для любых A в $\boldsymbol{A}$. Важность этого случая для квантовой механики очевидна, поскольку спектр A представляет собой возможные измеримые значения A, которые не должны зависеть от того, рассматривается ли A как элемент, принадлежащий $\boldsymbol{A}$ или принадлежащий $\boldsymbol{B}$.

Если A — самосопряженный элемент (т. е. $A^* = A$), то спектр A лежит на вещественной оси в плоскости λ.

Линейная функция F на $\boldsymbol{A}$ называется *ограниченной*, если существует число $\|F\|$, такое, что $|F(A)| \leqslant \|F\| \|A\|$ для всех A. Элемент A называется *положительно определенным*, если его можно представить в виде B^*B для некоторого $B \in \boldsymbol{A}$. Линейный функционал F на $\boldsymbol{A}$ называется *положительным*, если для любого положительно определенного элемента A $F(A)$ — вещественное неотрицательное число, т. е. $F(B^*B) \geqslant 0$ для любого B. Можно доказать, что F — положительный функционал тогда и только тогда, когда $\|F\| = F(I)$. Вспомним, что математическое ожидание $\mathbf{E}(\cdot)$ для наблюдаемых в квантовомеханическом статистическом ансамбле представляет собой положительный линейный функционал, причем $\mathbf{E}(I) = 1$.

В абстрактной алгебраической формулировке квантовой статистической механики *динамическая система* описывается при помощи B^*-алгебры $\boldsymbol{A}$. Самосопряженные элементы $\boldsymbol{A}$ представляют собой наблюдаемые этой системы, и на них наложены различные (вообще говоря, нелинейные) связи, характеризующие данную систему: эти связи могут описывать, например, соотношения коммутации, зависимость гамильтониана от различных координат и импульсов и т. п. В свою очередь эти соотношения определяют алгебраическую структуру $\boldsymbol{A}$. *Ансамбль* таких одинаковых и невзаимодействующих систем тогда описывается положительно определенным функционалом $\mathbf{E}(\cdot)$ на $\boldsymbol{A}$, причем $\mathbf{E}(I) = 1$. Возможные измеримые значения наблюдаемой A представляют собой точки спектра A, а ожидаемым значением A в данном ансамбле является $\mathbf{E}(A)$.

Упражнение

4. Пусть q и p — координата и соответствующий ей импульс, как в упражнении § 14.4. В силу своей самосопряженности унитарные операторы $U(\alpha) = e^{ip\alpha}$ и $V(\beta) = e^{iq\beta}$ вполне определены (см. § 9.10) и ограничены и, следовательно, принадлежат C^*-алгебре всех ограниченных операторов в H. Покажите, что соотношение коммутации (14.4.9) можно записать следующим образом:

$$U(\alpha) V(\beta) U(-\alpha) V(-\beta) = e^{i\hbar\alpha\beta}. \tag{14.6.1}$$

Для этой цели допустите, что существует множество S векторов ψ, плотное в H, для которого вполне определены такие выражения, как $pq\,U(\alpha)\psi$ и т. п. (обратите внимание на упражнение 6 ниже.) Сначала покажите, что для таких ψ

$$\frac{d}{d\alpha}[U(\alpha) q - qU(\alpha)]\psi = ip[U(\alpha) q - qU(\alpha)]\psi + \hbar U(\alpha)\psi.$$

Затем покажите, что вектор $\psi(\alpha) \overset{\text{def}}{=} [U(\alpha) q - qU(\alpha)]\psi$ удовлетворяет тому же дифференциальному уравнению и тем же начальным условиям, что и вектор $\hbar\alpha U(\alpha)\psi$. Далее установите, что

$$[U(\alpha) q - qU(\alpha)]\psi = \hbar\alpha U(\alpha)\psi.$$

Наконец, покажите, что результат применения обеих частей равенства (14.6.1) к ψ удовлетворяет одному и тому же дифференциальному уравнению относительно переменной β и одним и тем же начальным условиям.

Классические соотношения коммутации для p и q впервые были приведены к виду (14.6.1) Германом Вейлем. Затем фон Нейман [1931] в соответствии с предложением М. Стоуна доказал, что любые операторы p и q, удовлетворяющие соотношениям коммутации в форме Вейля, эквивалентны соответственно оператору $(\hbar/i)(d/dx)$ и оператору умножения на x, которые применяются к функциям от x. Точнее говоря, фон Нейман доказал, что если p и q — операторы в сепарабельном гильбертовом пространстве $\boldsymbol{H}$ и если полученные при их помощи $U(\alpha)$ и $V(\beta)$ удовлетворяют (14.6.1), то $\boldsymbol{H}$ можно представить в виде конечной или счетной прямой суммы гильбертовых пространств $\boldsymbol{H}_n$, $n = 1, 2, \ldots$, каждое из которых инвариантно относительно p и q и может быть отображено на $L^2(\mathbb{R})$ с помощью унитарного преобразования W, такого, что $WpW^{-1} = (\hbar/i)(d/dx)$ и $WqW^{-1} = x$ (оператор умножения на x). В этом смысле $(\hbar/i)(d/dx)$ и x — единственно возможные представления таких операторов p и q с точностью до унитарного преобразования.

Упражнения

5. Найдите явные выражения для $U(\alpha)$ и $V(\beta)$, когда $\boldsymbol{H} = L^2(\mathbb{R})$, $p = (\hbar/i)(d/dx)$, $q = x$ (области определения выбрать подходящим образом), и проверьте (14.6.1) непосредственно. В этом случае в качестве множества S можно взять класс Шварца $\mathcal{S} = \mathcal{S}(\mathbb{R})$ пробных функций для распределений медленного роста; каждое $\psi \in \mathcal{S}$ принадлежит области определения любого конечного произведения операторов, взятых из множества

$$\{p^m,\ q^n,\ U(\alpha),\ V(\beta)\text{: все положительные целые } m, n, \text{ все вещественные } \alpha, \beta\}.$$

6. Покажите, что нельзя полностью избавиться от сделанного в упражнении 4 допущения о существовании множества S векторов ψ путем рассмотрения следующего примера (Б. Мисра, частное сообщение). Пусть гильбертово пространство $\boldsymbol{H} = L^2(0, 1)$, а p и q — самосопряженные операторы, определяемые уравнениями

$$\boldsymbol{D}(p) = \{f \in L^2\colon f' \in L^2,\ f(0) = f(1)\}; \quad \text{для } f \in \boldsymbol{D}(p) \quad pf = -i\hbar f'$$

(производную f' следует понимать в смысле теории распределений),

$$\boldsymbol{D}(q) = \boldsymbol{H}, \quad (qf)(x) = xf(x).$$

Покажите, что $(pq - qp)\psi = i\hbar\psi$ для всех ψ, принадлежащих некоторому плотному в $\boldsymbol{H}$ множеству, тогда как (14.6.1) остается верным лишь для некоторых значений β. Заметим, что если $\psi \in \boldsymbol{D}(p)$, то $q\psi$ и $V(\beta)\psi$, вообще говоря, не принадлежат $\boldsymbol{D}(p)$. Заметим также, что p и q не обязательно эквивалентны соответствующим операторам в $L^2(\mathbb{R})$, поскольку оператор q, ограниченный в $L^2(0, 1)$, неограничен в $L^2(\mathbb{R})$.

Следствие теоремы Стоуна — фон Неймана заключается в том, что каждый из самосопряженных операторов p и q, удовлетворяющих (14.6.1), имеет чисто непрерывный спектр, состоящий из всех вещественных чисел.

В книге Путнама [1967] имеются теоремы об условиях, при которых из равенства $pq-qp=-i\hbar$ на плотном в $\boldsymbol{H}$ множестве следует соотношение Вейля (14.6.1), а также соответствующие теоремы для систем канонических переменных p_j, q_j, $j=1, 2, \ldots$. Когда существует бесконечное множество таких пар $\{p_j, q_j\}$, теорема Стоуна—фон Неймана не применима, и в общем случае имеется много различных и неэквивалентных представлений соотношений коммутации Вейля. Этот факт играет определенную роль в квантовой теории поля (см. книгу Йоста [1965]).

14.7. САМОСОПРЯЖЕННЫЙ ОПЕРАТОР С ПРОСТЫМ СПЕКТРОМ

Говорят, что $(n\times n)$-матрица M имеет простой спектр, если каждое из ее n собственных значений $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ — простое, т. е. все λ_i различны. Как известно, в этом случае собственные векторы $\mathbf{v}^1, \ldots, \mathbf{v}^n$ порождают все n-мерное комплексное векторное пространство V^n или $\mathbb{C}^n$.

[*Доказательство.* Для того чтобы доказать линейную независимость $\mathbf{v}^{(i)}$, допустим, что

$$c_1\mathbf{v}^{(1)}+\ldots+c_n\mathbf{v}^{(n)}=0, \qquad (14.7.1)$$

и покажем, что все $c_i=0$. Пусть $p_k(\cdot)$ обозначает интерполяционный полином Лагранжа для любого $k=1, \ldots, n$, такой, что $p_k(\lambda_j)=0$ при $j\neq k$, а $p_k(\lambda_k)\neq 0$. Если матрицу $p_k(M)$ умножить на вектор (14.7.1), то все члены в левой части обратятся в нуль, кроме k-го члена; отсюда следует, что $c_k=0$.]

Приведенное выше определение простого спектра не распространяется на операторы в $\boldsymbol{H}$, поскольку в $\boldsymbol{H}$ нет собственных векторов, соответствующих непрерывному спектру. Следовательно, это определение надо заменить таким, которое было бы пригодно и для $\boldsymbol{H}$. Пусть $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ — различные собственные значения M (при $k=n$ спектр простой), а $P_1, \ldots, P_k$ — соответствующие проекторы на собственные подпространства $\boldsymbol{E}_1, \ldots, \boldsymbol{E}_k$ ($P_j\boldsymbol{E}_l=\delta_{jl}\boldsymbol{E}_l$). Спектр является простым тогда и только тогда, когда существует вектор $\xi\in V^n$, такой, что его проекции $P_j\xi$ ($j=1, \ldots, k$) порождают V^n (например, если все λ_j различны, в качестве ξ можно взять линейную комбинацию $\sum c_j\mathbf{v}^{(j)}$, причем все c_j отличны от нуля).

Если M — эрмитова матрица (и следовательно, представляет самосопряженный оператор в V^n), то соответствующее разложение единицы имеет вид

$$E_t=\sum_{\lambda_i\leqslant t} P_i,$$

а спектр является простым тогда и только тогда, когда векторы $E_t\xi$, в которых t пробегает $\mathbb{R}$, порождают V^n.

Допустим теперь, что $A = \int\limits_{-\infty}^{\infty} t\,dE_t$ — самосопряженный оператор в $\boldsymbol{H}$. Назовем спектр A *простым*, если существует элемент ξ в $\boldsymbol{H}$, такой, что замкнутая линейная оболочка элементов

$$\{E_t\xi:\ -\infty < t < \infty\} \tag{14.7.2}$$

совпадает с $\boldsymbol{H}$, т. е. совокупность конечных линейных комбинаций таких элементов плотна в $\boldsymbol{H}$. Вектор ξ называется *порождающим вектором* для A.

Аналогично спектр унитарного оператора

$$U = \int\limits_{0}^{2\pi} e^{i\theta}\, dF_\theta$$

является *простым*, если существует *порождающий вектор* ξ, такой, что элементы $\{F_\theta\xi:\ 0 \leqslant \theta < 2\pi\}$ порождают $\boldsymbol{H}$.

Если A имеет простой спектр, то, в частности, для любого λ из точечного спектра $P\sigma(A)$ собственное подпространство $\boldsymbol{E}_\lambda$ одномерно, как и в конечномерном случае. Чтобы это показать, допустим, что ξ — порождающий вектор, а

$$P_\lambda = E_{\lambda+0} - E_{\lambda-0}$$

является проектором на $\boldsymbol{E}_\lambda$. Тогда $P_\lambda E_t\xi = P_\lambda\xi$ при $t \geqslant \lambda$ и $P_\lambda E_t\xi = 0$ при $t < \lambda$. Следовательно, для любой линейной комбинации η элементов $E_t\xi$, а значит, для любого η в $\boldsymbol{H}$, $P_\lambda\eta = \mathrm{const}\cdot P_\lambda\xi$, откуда следует, что $\boldsymbol{E}_\lambda$ одномерно.

Грубо говоря, если A соответствует наблюдаемой $\mathcal{A}$, то измеримое значение $\mathcal{A}$ однозначно определяет состояние системы (т. е. состояние, в котором система остается после измерения) при условии, что A имеет простой спектр; в противном случае для однозначного описания состояния системы необходимы также значения других (коммутирующих с $\mathcal{A}$) наблюдаемых $\mathcal{B}$, $\mathcal{C}$ и т. д. (см. § 14.9).

Обозначенный через A_α оператор Штурма—Лиувилля с одной регулярной концевой точкой и с одной особой концевой точкой типа предельной точки был описан в § 10.11 и 10.12. В разложении по собственным функциям (10.12.7) заданной функции $g(x)$ для любого данного значения спектрального параметра $s = \lambda$ оказывается единственная функция, а именно $f_2(x, \lambda)$. Это наводит на мысль, что A_α имеет простой спектр. Для данного λ $f_2(x, \lambda)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению $-(pf')' + qf = \lambda f$ и граничному условию (10.11.2). Следовательно, эта функция является собственной функцией в обобщенном смысле, но не в строгом смысле, поскольку она не интегрируема квадратично на $(0, \infty)$ (если только λ не лежит в точечном спектре) и, значит, не принадлежит данному гильбертову пространству. Для доказательства простоты спектра A_α нам нужно найти порождающий вектор $\xi=\xi(x)$ в $H=L^2(0, \infty)$.

Упражнения

1. Пусть $\eta(s)$—функция класса $C^1(\mathbb{R})$, отличная от нуля для всех s и принадлежащая L^2_σ. Покажите, что функция

$$\xi(x)=\int_{-\infty}^{\infty} f_2(x, s)\,\eta(s)\,d\rho(s)$$

является порождающим вектором для A_α. *Указание.* Функции $h(s)$ класса $C^1_0(\mathbb{R})$ плотны в L^2_σ, а отображение (10.12.6), (10.12.7) устанавливает изоморфизм $L^2(0, \infty)$ и L^2_σ.

2. Сформулируйте определение кратности (положительное целое) спектра самосопряженного оператора, спектр которого не обязательно простой.

3. Покажите, что оператор $-id/dx$ из § 10.1 имеет простой спектр, и укажите порождающий вектор $\xi(x)$. Разложение единицы приведено в § 10.1.

4. Установите, что оператор $-(d/dx)^2$ из § 10.2 не имеет простого спектра. Это можно сделать, показав, что если $\xi(x)$—порождающий вектор, то формула

$$\varphi(x)=\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\,d(E_t\xi)(x)$$

(f произвольно) не дает всех φ из $L^2(\mathbb{R})$. В самом деле, любая $\varphi(x)$, определенная этой формулой, имеет преобразование Фурье вида $g(s)\,\hat{\xi}(s)$, где $g(s)$ — *четная* функция.

14.8. СПЕКТРАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПРОСТРАНСТВА H ДЛЯ САМОСОПРЯЖЕННОГО ОПЕРАТОРА С ПРОСТЫМ СПЕКТРОМ

В гл. 1 было показано, что все бесконечномерные сепарабельные гильбертовы пространства по структуре идентичны. Гильбертово пространство некоторой квантовомеханической системы можно представить себе абстрактным пространством, но часто бывает удобным иметь его конкретную реализацию, например в виде пространства L^2 функций, точно так же, как часто удобно вводить декартовы координаты в конечномерном пространстве. Одной из таких реализаций является так называемое спектральное представление, связанное с заданным самосопряженным оператором A, имеющим простой спектр. В квантовой механике оно называется *представлением, в котором оператор A диагонален.* Некоторые теоремы о спектральном представлении приведены в этом параграфе лишь с эвристическими «доказательствами» — детали читатель может найти в книге Ахиезера и Глазмана [1950].

Пусть в гильбертовом пространстве (абстрактном или конкретном) задан самосопряженный оператор A с простым спектром и порождающим вектором ξ. Обозначим через E_t разложение единицы для A. Допустим, что некий элемент u из $\boldsymbol{H}$ задается интегралом вида

$$u=\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\,dE_t\xi, \tag{14.8.1}$$

где $f(t)$ — комплекснозначная функция вещественной переменной t. Иначе говоря, мы предполагаем, что сумма Римана — Стилтьеса

$$\sum_j f(t_j)\,E(\Delta_j)\,\xi \tag{14.8.2}$$

сходится в $\boldsymbol{H}$ к элементу u, когда разбиение оси t измельчается. Поскольку спектр A простой, любой элемент u из $\boldsymbol{H}$ можно аппроксимировать суммой (14.8.2); поэтому разумно считать, что любой элемент u можно представить в виде (14.8.1).

Положим теперь, что другим таким элементом является

$$v=\int_{-\infty}^{\infty} g(t)\,dE_t\xi, \tag{14.8.3}$$

и получим выражение для скалярного произведения (u, v) через функции f и g. Развернув скалярное произведение сумм Римана — Стилтьеса, соответствующих (14.8.1) и (14.8.3), мы будем иметь сумму членов, которые содержат произведения $\overline{f(t_j)}\,g(t_k)$ на $(E(\Delta_j)\,\xi,\ E(\Delta_k)\,\xi)$. В силу свойств проекторов полученные скалярные произведения равны $\delta_{jk}(\xi,\ E(\Delta_k)\,\xi)$, а если учесть, что интервал $\Delta_k=(\tau_k,\ \tau_{k+1})$, то эти произведения будут равны

$$\delta_{jk}\left[(\xi,\ E_{\tau_{k+1}}\xi)-(\xi,\ E_{\tau_k}\xi)\right].$$

Таким образом, мы установили, что сумма

$$\sum_j \overline{f(t_j)}\,g(t_j)\left[(\xi,\ E_{\tau_{j+1}}\xi)-(\xi,\ E_{\tau_j}\xi)\right]$$

является приближением для (u, v). Но это тоже сумма Римана — Стилтьеса. Поэтому, переходя к пределу, мы можем допустить, что

$$(u,\ v)=\int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(t)}\,g(t)\,d(\xi,\ E_t\xi). \tag{14.8.4}$$

Функция

$$\sigma(t)\overset{\text{def}}{=}(\xi,\ E_t\xi) \tag{14.8.5}$$

является вещественной благодаря самосопряженности E_t. Кроме того, это неубывающая функция, так как при $t_2>t_1$

$$\begin{aligned}\sigma(t_2)-\sigma(t_1)&=(\xi,\ (E_{t_2}-E_{t_1})\,\xi)=\\&=(\xi,\ (E_{t_2}-E_{t_1})^2\,\xi)=\\&=((E_{t_2}-E_{t_1})\,\xi,\ (E_{t_2}-E_{t_1})\,\xi)\geqslant 0.\end{aligned}$$

Подставив $\sigma(\cdot)$ в выражение (14.8.4), получаем

$$(u, v) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(t)}\, g(t)\, d\sigma(t), \tag{14.8.6}$$

$$\| u \|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} | f(t) |^2\, d\sigma(t). \tag{14.8.7}$$

Это и есть искомые выражения.

В § 5.9 были определены пространства типа L_σ^2, причем скалярное произведение и норма описывались выражениями, совпадающими с (14.8.6) и (14.8.7), где $f(\cdot)$ и $g(\cdot)$ предполагались гладкими функциями. Для гладких функций проведенные выше рассуждения нетрудно сделать строгими, и, следовательно, отображение $f(\cdot) \to u$ является изометрическим изоморфизмом плотного в L_σ^2 множества на плотное в H множество. Это отображение представляет собой ограниченное линейное преобразование гильбертова пространства L_σ^2 в гильбертово пространство H. Путем очевидного обобщения теоремы о расширении из § 7.1 его можно распространить на все элементы каждого из пространств.

Наконец, если оператор $A = \int_{-\infty}^{\infty} t\, dE_t$ аппроксимировать суммой Римана—Стилтьеса

$$\sum_j t_j E(\Delta_j), \tag{14.8.8}$$

используя то же разбиение оси t, что и в (14.8.2), а затем применить оператор (14.8.8) к вектору (14.8.2), то полученную двойную сумму можно свести (в силу свойств проекторов) к одинарной сумме, а именно к

$$\sum_j t_j f(t_j)\, E(\Delta_j)\, \xi.$$

Это наводит на мысль, что если u соответствует $f(t)$, то Au соответствует $tf(t)$. Подобные соображения приводят к следующей теореме.

Теорема. *Пусть A—самосопряженный оператор с простым спектром в гильбертовом пространстве H. Тогда существуют неубывающая функция $\sigma(\cdot)$ и взаимно однозначное отображение $u \to f(\cdot)$ пространства H на пространство L_σ^2, такие, что из $u \to f(\cdot)$ и $v \to g(\cdot)$ следует $(u, v) = (f(\cdot), g(\cdot))$. Операторам в H соответствуют операторы в L_σ^2. В частности, оператору A соответствует в L_σ^2 операция умножения $f(t)$ на t, т. е. если u из H соответствует функция $f(t)$, то Au соответствует функция $tf(t)$.*

Заметим, что A неоднозначно определяет L^2_σ в силу неоднозначности порождающего вектора ξ. Если ξ_1—другой порождающий вектор для A, а $\sigma_1(t)=(\xi_1, E_t\xi_1)$—соответствующая неубывающая функция, то существует положительная функция $\rho(t)$, такая, что

$$\sigma_1(t)=\int_{-\infty}^{t}\rho(t')\,d\sigma(t'),$$

и поэтому мера $d\sigma_1$ абсолютно непрерывна относительно меры $d\sigma$. Если $u\in \boldsymbol{H}$ представляется функцией $f(t)\in L^2_\sigma$, то этот же элемент представляется функцией $\rho(t)^{-1/2}f(t)\in L^2_{\sigma_1}$. В квантовой механике переход от σ к σ_1 представляет собой лишь изменение нормировки базисных векторов. В случае когда A имеет чисто точечный спектр, σ можно выбрать так, чтобы все базисные векторы имели норму, равную единице. Во всех других случаях не существует однозначного выбора σ, поскольку нет общих соглашений о наиболее удобной нормировке волновых функций непрерывных состояний.

Упражнение

1. Взяв приведенные выше ξ и ξ_1, покажите, что если

$$\xi_1=\int_{-\infty}^{\infty}a(t)\,dE_t\xi,$$

то

$$\rho(t)=|a(t)|^2.$$

14.9. ПОЛНАЯ СИСТЕМА КОММУТИРУЮЩИХ НАБЛЮДАЕМЫХ

Рассмотрим два самосопряженных оператора

$$A=\int_{-\infty}^{\infty}t\,dE_t \quad \text{и} \quad B=\int_{-\infty}^{\infty}t\,dF_t. \tag{14.9.1}$$

Говорят, что они *коммутируют*, если

$$E_tF_s=F_sE_t \quad \text{для всех } s,\ t. \tag{14.9.2}$$

[*Замечание*. Так как A и B в общем случае неограничены, нельзя сказать, что $AB=BA$, исключая случай, когда области определения операторов AB и BA совпадают, тогда как E_t и F_s определены во всем $\boldsymbol{H}$; однако $ABu=BAu$ для всех таких u (если они существуют), для которых обе части равенства имеют смысл.] Говорят, что коммутирующие операторы A и B имеют *простой совместный спектр* или образуют *полную систему коммутирующих наблюдаемых*, если в $\boldsymbol{H}$ существует элемент ξ

(*порождающий вектор*), такой, что замкнутая линейная оболочка элементов

$$\{E_s F_t \xi: \ -\infty < s, t < \infty\} \tag{14.9.3}$$

совпадает с $\boldsymbol{H}$.

Обобщение на любое конечное число самосопряженных или унитарных операторов очевидно.

Если A и B образуют полную систему, как определено выше, то мера на плоскости s, t определяется следующим образом:

$$\sigma(s, t) = (\xi, E_s F_t \xi), \tag{14.9.4}$$

где ξ — порождающий вектор. Эта мера — неубывающая функция в смысле, определенном в гл. 13. Именно, если через $\square$ обозначить прямоугольную область в плоскости s, t:

$$\square = \{s, t\colon a \leqslant s < b, \ c \leqslant t < d\}, \tag{14.9.5}$$

а $\sigma(\square)$ определить как

$$\sigma(\square) = \sigma(b, d) - \sigma(a, d) - \sigma(b, c) + \sigma(a, c),$$

то $\sigma(\square) \geqslant 0$ для всех таких $\square$. Пространство $L^2_\sigma(\mathbb{R}^2)$ определяем по аналогии с § 5.9 при помощи двойных интегралов Стилтьеса (см. § 13.3) следующим образом. В $\mathscr{S}(\mathbb{R}^2)$ определяем скалярное произведение

$$(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(s, t)}\, \psi(s, t)\, d^2\sigma(s, t).$$

Полученное таким образом пространство со скалярным произведением расширяем до полного пространства $L^2_\sigma(\mathbb{R}^2)$ распределений на $\mathbb{R}^2$ точно так же, как это было сделано для $L^2_\sigma = L^2_\sigma(\mathbb{R})$ в § 5.9.

Переформулируем теперь теорему предыдущего параграфа для конечного числа операторов.

Теорема. *Пусть $A_1, \ldots, A_k$ — коммутирующие самосопряженные операторы в $\boldsymbol{H}$ с совместным простым спектром. Тогда существуют неубывающая функция $\sigma(t_1, \ldots, t_k)$ и взаимно однозначное отображение $u \to f(t_1, \ldots, t_k)$ пространства $\boldsymbol{H}$ на пространство $L^2_\sigma(\mathbb{R}^k)$, такие, что из $u \to f(\cdots)$ и $v \to g(\cdots)$ следует $(u, v) = (f(\cdots), g(\cdots))$. Операторам в $\boldsymbol{H}$ соответствуют операторы в $L^2_\sigma(\mathbb{R}^k)$. В частности, для любого $j = 1, \ldots, k$ оператору A_j соответствует в $L^2_\sigma(\mathbb{R}^k)$ операция умножения $f(t_1, \ldots, t_k)$ на t_j, т. е. если u соответствует функция $f(t_1, \ldots, t_k)$, то $A_j u$ соответствует функция $t_j f(t_1, \ldots, t_k)$.*

В квантовой механике гильбертово пространство $L^2_\sigma(\mathbb{R}^k)$ дает представление физической системы, в котором наблюдаемые $\mathcal{A}_1, \ldots, \mathcal{A}_k$ диагональны.

Пример 1

Пусть A — оператор $-(d/dx)^2$ (см. упражнение 4 § 14.7), спектр которого не является простым. Другой оператор B определим при помощи равенства

$$(Bf)(x) = f(-x)$$

для всех $f \in L^2$. Этот оператор коммутирует с A. Оператор B имеет чисто точечный спектр, состоящий из двух собственных значений $\mu = \pm 1$, так как $B^2 = I$. Любое четное распределение в L^2 является собственной функцией для $\mu = +1$, а любое нечетное распределение — для $\mu = -1$. Система уравнений

$$-f''(x) = \lambda f(x), \quad f(-x) = \mu f(x)$$

имеет (с точностью до нормировки) единственное решение, а именно $\cos \sqrt{\lambda}\, x$ для $\mu = 1$ и $\sin \sqrt{\lambda}\, x$ для $\mu = -1$. По-видимому, A и B имеют простой совместный спектр, т. е. A и B образуют полную систему коммутирующих операторов. Нетрудно установить, что разложение единицы F_t для B имеет вид

$$(F_t\varphi)(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } t < -1, \\ {}^1/_2\varphi(x) - {}^1/_2\varphi(-x) & \text{при } -1 \leqslant t < 1, \\ \varphi(x) & \text{при } t \geqslant 1. \end{cases}$$

Задача об отыскании представления произвольного $u \in H$ через элементы вида $E_s F_t \xi$ сводится к тому, чтобы выразить $\varphi(x)$ в следующем виде:

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} [g(s)\, e^{-ixs} + h(s)\, e^{ixs}]\, \xi(s)\, ds$$

(детали мы опускаем). Хотя и требуется, чтобы $g(\cdot)$ и $f(\cdot)$ были четными функциями, мы располагаем достаточной свободой для такого представления любого $\varphi(x)$, взяв, скажем, $\xi(s)$ равным e^{-s} для $s \geqslant 0$ и равным нулю для $s < 0$. Отсюда следует, что совместный спектр операторов A и B будет простым.