1977 г. Август *Том 122, вып. 4*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

530.145.6

КЛАССИЧЕСКАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Д. И. Блохинцев

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовую механику обычно рассматривают как обобщение классической механики. Физическое содержание этого обобщения в основном выражается в принципе дополнительности Н. Бора.

Как будет объяснено в дальнейшем, возможен, и в некоторых отношениях кажется необходимым, другой подход к основам квантовой механики. В этом другом подходе квантовая механика рассматривается как обобщение классической статистической механики. При таком понимании квантовой механики основным понятием является не волновая функция ψ, а *статистический оператор*, введенный еще в 1932 г. фон Нейманом [1]. Теперь его обычно называют оператором плотности $\hat{\rho}$. Известно, что этот оператор является аналогом плотности $\rho(q, p)$ в фазовом пространстве $\mathcal{R}(q, p)$, которое используется в классической статистической механике для описания движения систем. Здесь q — координаты изучаемой системы, p — канонически сопряженные им импульсы *).

Соотношение между классической механикой и классической статистической механикой принципиально отличается от соотношения между квантовой механикой, оперирующей с волновой функцией ψ, и квантовой механикой, опирающейся на понятие статистического оператора $\hat{\rho}$.

Суть дела заключается в том, что классическая механика составляет науку, совершенно не нуждающуюся в статистической механике. В границах своей применимости она дает максимально полную информацию о движении механической системы и не оперирует ни с понятием вероятности, ни с понятием о каком-либо статистическом коллективе. В области квантовых явлений аналогом классической механики является квантовая механика, оперирующая с волновой функцией ψ, которая также дает максимально полную информацию о движении квантовых систем, совместимую с основой этой теории — с принципом дополнительности Н. Бора. Однако давно было установлено, что в теории квантовых измерений нельзя обойтись понятием волновой функции — необходимо прибегать к понятию оператора плотности $\hat{\rho}$, который имеет своего аналога в механике статистической. Таким образом, в отличие от классической механики, квантовая механика нуждается в квантовой статистической механике. Точнее говоря, она ею и является.

---

*) Под q следует разуметь координаты $q_1, q_2, \ldots, q_f$ рассматриваемой системы, под p — $p_1, p_2, \ldots, p_f$ — сопряженные им импульсы, f есть число степеней свободы. В дальнейшем, во избежание громоздкости, все формулы выписываются явно, так, как если бы $f = 1$. Например, $dq\,dp = dq_1 \ldots dq_f \cdot dp_1 \ldots dp_f$.

После этих замечаний обратимся к классической статистической механике. В классической статистической механике информация выражается на языке вероятностей.

Вероятность есть числовая мера потенциальной возможности того или иного розыгрыша событий.

Розыгрыш происходит в некотором статистическом ансамбле событий, который должен быть определен ясно сформулированными материальными условиями. Так, в термодинамической статистике ансамбль Гиббса определен температурой большого термостата, с которым слабо взаимодействует изучаемая молекулярная система *).

Знание вероятности того или иного события позволяет предсказать математическое ожидание того или иного исхода розыгрыша, среднее значение наблюдаемых величин, флуктуацию этих величин и т. п.

Вероятность не есть характеристика индивидуальной механической системы самой по себе. Она постольку принадлежит такой системе, поскольку эта система является членом определенного статистического ансамбля. В классической статистической механике ансамбль определяется вероятностью нахождения механической системы $d\rho(q, p, t)$ в окрестности точки (q, p) фазового пространства $\mathcal{R}(q, p)$ в момент времени t **).

Вместо вероятности $d\rho$ обычно рассматривают плотность вероятности в фазовом пространстве $\rho\,(q, p, t)$:

$$\rho(q, p, t) = \frac{d\rho\,(q, p, t)}{dq\,dp}. \tag{1}$$

Поскольку речь идет о микроскопических атомных системах, то для определенности такого ансамбля должны быть заданы внешние макроскопические условия, в которых реализуется жизнь изучаемого ансамбля, например: размер сосуда, температура стенок, внешние поля и т. п.

Плотность вероятности $\rho\,(q, p)$ подчиняется уравнению движения, которое гласит:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + [\mathcal{H}, \rho]_{q,p} = 0, \tag{2}$$

где $\mathcal{H} = \mathcal{H}(q, p)$ есть функция Гамильтона, а $[\mathcal{H}, \rho]_{q,p}$ — классическая скобка Пуассона, которая для любых динамических величин A и B гласит:

$$[A, B]_{q,p} = \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q} - \frac{\partial B}{\partial p}\frac{\partial A}{\partial q}. \tag{3}$$

В частности, для пары канонически сопряженных переменных имеем

$$[p, q]_{q,p} = 1. \tag{4}$$

В явном виде, для одной степени свободы функция Гамильтона равна

$$\mathcal{H}(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q); \tag{5}$$

здесь m — масса частицы, $V(q)$ — ее потенциальная энергия. Из (2) и (3) получим уравнение движения для плотности вероятности в раскрытом виде

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{p}{m}\frac{\partial\rho}{\partial q} - \frac{\partial V}{\partial q}\frac{\partial\rho}{\partial p} = 0. \tag{6}$$

---

*) Мы пользуемся термином «ансамбль», происходящим от основоположника термодинамической статистики Гиббса [2]. Другие названия ансамбля: статистический коллектив (Мизес) [3], статистическая совокупность (фон Нейман) [1].

**) В дальнейшем мы не будем явно выписывать аргумент t.

Это уравнение выражает закон сохранения числа частиц в каждом элементе фазового пространства.

Вероятность найти систему в окрестности точки q в конфигурационном пространстве $\mathscr{R}(q)$ будет равна

$$\rho(q)\,dq = dq\int \rho(q, p)\,dp, \tag{7}$$

а вероятность системе иметь импульс в окрестности точки p будет выражаться формулой

$$\rho(p)\,dp = dp\int \rho(q, p)\,dq. \tag{8}$$

Наконец, среднее значение $\bar{L}$ любой динамической переменной $L(q, p)$ определяется формулой

$$\bar{L} = \int \rho(q, p)\,L(q, p)\,dq\,dp \tag{9}$$

при условии нормировки

$$\int \rho(q, p)\,dq\,dp = 1. \tag{10}$$

Это условие в силу уравнения движения (6) выполняется для любого момента времени t.

2. КЛАССИЧЕСКАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА В КОНФИГУРАЦИОННОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Классическая статистическая механика может быть сформулирована не только в пространстве фаз $\mathscr{R}(q, p)$, как это обычно принято делать, но и в пространстве конфигураций $\mathscr{R}(q)$ *). Для того чтобы перейти к такому представлению статистической механики, мы будем вместо импульса p брать вторую, любую точку q' в пространстве конфигураций $\mathscr{R}(q)$. Иными словами, вместо пространства фаз $\mathscr{R}(q, p)$ мы обращаемся к удвоенному конфигурационному пространству

$$\mathscr{R}(q, q') \equiv \mathscr{R}(q) \times \mathscr{R}(q'). \tag{11}$$

Переход от описания в пространстве $\mathscr{R}(q, p)$ к описанию в пространстве $\mathscr{R}(q, q')$ определим с помощью преобразования Фурье, пригодного для любой динамической переменной $L(q, p)$, определенной в пространстве фаз $\mathscr{R}(q, p)$. Это преобразование гласит:

$$L(q, q') \equiv L(q, \zeta) = \int L(q, p)\frac{e^{ip\zeta/\hbar^*}}{2\pi\hbar^*}\,dp, \tag{12}$$

$$L(q, p) = \int L(q, \zeta)\,e^{-ip\zeta/\hbar^*}\,d\zeta, \tag{12'}$$

где $\zeta = q' - q$, а $\hbar^*$ есть некоторая постоянная размерности действия. Эта величина в рамках классической механики произвольна. Выбирая некоторый характерный масштаб координаты a и масштаб импульса b, естественно положить $\hbar^* = ab$. Ввиду того, что для фурье-преобразований не столь важны абсолютные значения q и p, сколько область их изменения, целесообразно положить

$$\hbar^* = \sqrt{\overline{\Delta p^2}\,\overline{\Delta q^2}}, \tag{13}$$

*) Этот раздел основывается на работе [4]; см. также [5].

где $\overline{\Delta p^2}$ и $\overline{\Delta q^2}$ — средние квадратичные отклонения p и q, скажем, при $t=0$.

Преобразование для плотности $\rho(q, p)$ удобнее определить так:

$$\rho(q, q') \equiv \rho(q, \zeta) = \int \rho(q, p)\, e^{ip\zeta/\hbar^*}\, dp, \tag{14}$$

$$\rho(q, p) = \int \rho(q, \zeta) \frac{e^{-ip\zeta/\hbar^*}}{2\pi\hbar^*}\, d\zeta; \tag{14'}$$

здесь $L(q, q')$ и $L(q, \zeta)$, как видно из формул, означают одни и те же величины. Эти величины, вообще говоря, оказываются обобщенными функциями. Правила обращения с ними теперь хорошо известны. Уравнение движения (2) для плотности вероятности может быть также переписано в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$. С помощью формулы (12) найдем изображение гамильтониана $\mathcal{H}(q, p)$ (5) в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$. Оно гласит:

$$\mathcal{H}(q, q') \equiv \mathcal{H}(q, \zeta) = -\frac{\hbar^{*2}}{2m}\frac{d^2\delta(\zeta)}{d\zeta^2} + V(q)\,\delta(\zeta), \tag{15}$$

где $\delta(\zeta)$ есть обычная дельта-функция. Далее, имеем следующие выражения для компонент Фурье от производных функции Гамильтона $\mathcal{H}$ и плотности ρ:

$$\left(\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q}\right)_{q,q'} \equiv \left(\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q}\right)_{q,\zeta} = \frac{\partial V}{\partial q}\,\delta(\zeta), \tag{16}$$

$$\left(\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p}\right)_{q,q'} \equiv \left(\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p}\right)_{q,\zeta} = -\frac{i\hbar^*}{m}\frac{d\delta(\zeta)}{d\zeta}, \tag{17}$$

$$\left(\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)_{q,q'} \equiv \left(\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)_{q,\zeta} = \frac{\partial\rho(q, \zeta)}{\partial q}, \tag{18}$$

$$\left(\frac{\partial\rho}{\partial p}\right)_{q,q'} \equiv \left(\frac{\partial\rho}{\partial p}\right)_{q,\zeta} = -\frac{i}{\hbar^*}\,\zeta\rho(q, \zeta). \tag{19}$$

Подстановка этих компонент Фурье в (2) с помощью (12′) приводит к уравнению для плотности $\rho(q, \zeta)$ в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$:

$$\frac{\partial\rho(q, \zeta)}{\partial t} - \frac{i\hbar^*}{m}\frac{\partial^2\rho(q, \zeta)}{\partial q\, d\zeta} - \frac{1}{i\hbar^*}\frac{\partial V}{\partial q}\,\zeta\cdot\rho(q, \zeta) = 0. \tag{20}$$

Это уравнение заменяет в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$ уравнение (6) в пространстве $\mathcal{R}(q, p)$. Это уравнение лаконично может быть записано в форме

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + [\mathcal{H}, \rho]_{q,\zeta} = 0, \tag{21}$$

где под $[AB]_{q,\zeta}$ понимается скобка Пуассона в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$. Разумеется, плотность ρ в (18) берется в этом же пространстве.

Уравнения (7) и (8) принимают вид

$$\rho(q)\, dq = \rho(q, q)\, dq, \tag{7'}$$

$$\rho(p)\, dp = dp \int \rho(q, \zeta) \frac{e^{-iq\zeta/\hbar^*}}{2\pi\hbar^*}\, dq\, d\zeta. \tag{8'}$$

Условие нормировки (10) гласит:

$$\int \rho(q, q)\, dq = 1. \tag{10'}$$

Уравнение (9) для определения среднего значения динамической величины $L(q, p)$ такими же путями приводится к виду

$$\overline{L} = \int \rho(q, \zeta)\, L^*(q, \zeta)\, dq\, d\zeta$$

или, что то же, к виду

$$\overline{L} = \int \rho(q, q') L^*(q, q')\, dq\, dq'. \tag{9'}$$

В добавление к этим формулам выпишем формулы для компонент Фурье координаты q и импульса p:

$$q_{qq'} = q\delta(\zeta), \tag{16'}$$

$$p_{qq'} = -i\hbar^* \frac{d\delta(\zeta)}{d\zeta}. \tag{17'}$$

Эти выражения полностью совпадают с известными квантовомеханическими выражениями для операторов $\hat{q}$ и $\hat{p}$ в координатном представлении.

Однако следует помнить, что величины (16') и (17') перемножаются как компоненты Фурье (а не как матрицы).

В заключение этого раздела привожу два простых примера решения уравнения (20).

а) Свободное движение

В этом случае $V(q) = 0$. Представим $\rho(q, \zeta, t)$ в форме интеграла Фурье:

$$\rho(q, \zeta, t) = \int \tilde{\rho}(\alpha, \beta)\, e^{i\omega(\alpha, \beta) t - i(\alpha q + \beta\zeta)}\, d\alpha\, d\beta. \tag{22}$$

Подстановка $\rho(q, \zeta, t)$ в таком виде в (20) приводит к соотношению

$$\left[\omega(\alpha, \beta) + \frac{\hbar^*}{m}\alpha\beta\right] \tilde{\rho}(\alpha, \beta) = 0, \tag{23}$$

откуда

$$\omega(\alpha,\beta) = -\frac{\hbar^*}{m}\alpha\beta. \tag{24}$$

Полагая в (23) правую часть равной единице, найдем фурье-образ функции Грина

$$G(\alpha,\beta) = \frac{1}{\omega(\alpha, \beta) + (\hbar^*/m)\alpha\beta \pm i\varepsilon} \tag{25}$$

уравнения (17) для свободного движения частиц.

б) Гармонический осциллятор

В этом случае $V(q) = (m\omega_0^2/2)\, q^2$, где ω_0 — частота осциллятора, а m — его масса. Функцию $\rho(q, \zeta, t)$ в этом случае можно искать в виде $\rho(q, \zeta, t) = e^{i\omega t}\rho(z)$, где $z = q\zeta/\Lambda^2$, а $\Lambda^2 = \hbar^*/m\omega_0$. В терминах этой переменной уравнение для $\rho(q, \zeta, t)$ легко приводится к виду

$$\frac{d^2\rho}{dz^2} + \frac{1}{z}\frac{d\rho}{dz} - \left(1 + \frac{\omega}{\omega_0}\frac{1}{z}\right)\rho = 0. \tag{26}$$

Общее решение этого уравнения выражается через гипергеометрический ряд ${}_1F_1$ *):

$$\rho(z) = e^{\pm z}{}_1F_1\left(\frac{1}{2} \mp \frac{\omega}{2\omega_0},\ 1,\ \mp 2z\right). \tag{27}$$

*) См., например: Дж. Ватсон, Теория бесселевых функций, М., 1949, с. 118.

3. КВАНТОВЫЙ АНСАМБЛЬ

Еще в 1932 г. фон Нейман ввел важное различие чистых квантовых ансамблей (по Нейману «einheitliche Gesamtheiten») и смешанных ансамблей («gemischte Gesamtheiten»)[1]. Первые ансамбли — ансамбли, описываемые волновой функцией ψ, отвечают случаю максимальной информации, допустимой законами квантовой механики. Второй тип ансамблей содержит состояния с различными волновыми функциями $\psi_1, \psi_2, \ldots$ $\ldots, \psi_s, \ldots$, относительно которых известны лишь вероятности этих состояний $W_1, W_2, \ldots, W_s, \ldots$. Такой ансамбль аналогичен ансамблям классической статистической механике, но не самой классической механике, в которой такому ансамблю нет места. Смешанный ансамбль описывается оператором плотности ρ.

Отмеченная в разделе 1 необходимость введения в квантовую механику оператора плотности, как понятия более общего, нежели волновая функция, основывается на том, что в квантовой области измерения, производимые над системами, описываемыми волновой функцией ψ («чистый» ансамбль), переводят эти системы в состояния, описываемые набором волновых функций, т. е. в «смешанный» ансамбль.

Поэтому, если мы хотим рассматривать теорию квантовых измерений как главу квантовой механики, то нельзя исключить из рассмотрения смешанные ансамбли, которые не имеют аналогов в классической механике. Они являются аналогами механики статистической. В этом пункте лежит вся суть отличия моей концепции квантовой механики от концепции копенгагенской школы.

Н. Бор явно предпочитал рассматривать ситуацию, когда атомная система описывается волновой функцией (т. е. чистый ансамбль).

При таком подходе сам процесс измерения полностью исключается из квантовомеханического рассмотрения и тем более не может быть предметом теоретического расчета. Интерпретация измерения при таком подходе ограничивается пониманием измерения как явления изменения информации. Следует подчеркнуть, что в рамках анализа, сосредоточенного на чистом ансамбле, такое толкование измерения логически последовательно и единственно возможно. Но оно исключает на самом деле существующую возможность, на основе этой же квантовой механики, исследовать и рассчитать явления измерения. В этой связи концепция фон Неймана, основанная на понятии статистических совокупностей, представляется более широкой основой для понимания квантовой механики, нежели концепция, основанная на более ограниченном понятии волновой функции. Идеи фон Неймана, изложенные им в блестящей, но трудно одолеваемой книге: «Математические основы квантовой механики» (1932 г. [1]), оказали в свое время большое влияние на Л. И. Мандельштама [6], особенно на К. В. Никольского (см. его монографию [7]) и меня. В отличие от нас, эти идеи, видимо, не очень заинтересовали в свое время Н. Бора.

На основании сказанного естественно рассматривать квантовую механику как *обобщение классической статистической* механики. Представление классической статистической механики в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$ оказывается удобным исходным пунктом. Это представление, как было показано в разделе 2, оперирует с компонентами Фурье динамических переменных $L(q, q')$ и плотности $\rho(q, q')$.

Последуем теперь рецепту перехода от классической механики к квантовой, принадлежащему В. Гейзенбергу. Суть его предписания сводится к двум пунктам: а) замены компонент Фурье динамических переменных на элементы эрмитовых матриц и б) замена классической скобки Пуассона на квантовую скобку Пуассона.

Обращаясь к классической статистической механике, представленной в пространстве $\mathcal{R}$ (q, q'), мы реализуем эту программу с помощью следующих формул, выражающих соответствие классических и квантовых величин по Гейзенбергу *):

$$L(q, \zeta) \equiv L(q, q') \to L(q, q') = L^+(q, q'), \tag{28}$$

$$\rho(q, \zeta) \equiv \rho(q, q') \to \rho(q, q') = \rho^+(q, q'). \tag{29}$$

Эта замена означает, что динамические переменные и их функции становятся *эрмитовыми операторами*, которые мы будем означать через $\hat{L}$, $\hat{\rho}$ и т. п. $\hat{L}^+$, $\hat{\rho}^+$ означают эрмитово-сопряженные операторы. Далее, согласно пункту б),

$$[A, B]_{\text{класс}} \to [\hat{A}, \hat{B}]_{\text{кв}} = -\frac{1}{i\hbar}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}). \tag{30}$$

В частности,

$$[\hat{p}, \hat{q}] = 1. \tag{31}$$

Следуя (28,) (29) и (30), заменим в (9′) $\rho(q, q')$ и $L(q, q')$ на соответствующие элементы эрмитовых матриц $\hat{\rho}$ и $\hat{L}$. Тогда получим

$$\overline{L} = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{L}), \tag{32}$$

где Sp означает след матрицы. Формулы (7′), (8′) и (10′) принимают вид

$$\rho(q)\,dq = \rho(q, q)\,dq, \tag{33}$$

$$\rho(p)\,dp = \rho(p, p)\,dp \tag{34}$$

и

$$\mathrm{Sp}\,\hat{\rho} = 1. \tag{35}$$

Причем во всех формулах постоянная $\hbar^*$ теперь фиксирована и равна постоянной Планка $\hbar$. Тем самым устраняется масштабный произвол в выборе постоянной $\hbar^*$, характерный для классической статистической механики.

Уравнение (20) для плотности $\rho(q, q')$, согласно (30), заменяется на операторное уравнение с квантовыми скобками Пуассона:

$$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}]_{\text{кв}} = 0. \tag{36}$$

Оператор функции Гамильтона $\hat{\mathcal{H}}$ имеет вид (в простейшем случае)

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{q}). \tag{37}$$

Выпишем теперь уравнение (36) в пространстве $\mathcal{R}$ (q, q'). В этом пространстве матрицы операторов $\hat{p}$ и $\hat{q}$, удовлетворяющие условию (31), имеют вид

$$p(q, q') = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\delta(q - q'), \tag{38}$$

$$q(q, q') = q\delta(q - q'). \tag{39}$$

Эти выражения тождественны с выражениями для компонент Фурье величин p и q в классической статистической механике, представленной в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$. Чтобы убедиться в этом, следует вспомнить, что в формулах (16′) и (17′) величина $\zeta = q' - q$.

*) В. Гейзенберг имел в виду компоненты Фурье, отображающие зависимость динамических переменных от времени. У меня этот принцип соответствия расширен и на координатные зависимости динамических переменных.

Воспользовавшись правилами умножения матриц, получим из (36), (37), (38) и (39) уравнение (36) в пространстве $\mathscr{R}(q, q')$:

$$\frac{\partial \rho(Q, \zeta)}{\partial t} - \frac{i\hbar}{m}\frac{\partial^2 \rho(Q, \zeta)}{\partial Q\,\partial \zeta} - \frac{1}{i\hbar}\left[V\left(Q+\frac{\zeta}{2}\right) - V\left(Q-\frac{\zeta}{2}\right)\right]\rho(Q, \zeta) = 0, \quad (40)$$

где $Q = \frac{1}{2}(q + q')$, $\zeta = q' - q$. Сравнение с (20) показывает, что уравнение классической статистической механики при $\hbar^* = \hbar$ можно рассматривать как приближение к точному квантовому уравнению (36) при условии достаточно гладких потенциалов $V(q)$ и гладких распределений $\rho(q, \zeta)$. В этом случае в (36) можно положить $V(Q + \zeta/2) - V(Q - \zeta/2) \approx \frac{\partial V}{\partial q}\zeta + \ldots$ Тогда уравнение (40) совпадает с (20).

4. СОБСТВЕННЫЕ ВЕКТОРЫ

Обратимся сперва к специальному случаю, когда оператор плотности $\hat{\rho}$ подчиняется специальному условию

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}. \quad (41)$$

Рассмотрим, каким еще условиям должен удовлетворять этот оператор, чтобы описываемый им статистический ансамбль обладал той особенностью, что в нем некоторая избранная динамическая переменная L имела бы *одно* и только одно определенное значение.

Пусть среднее значение этой величины есть $\overline{L}$, тогда среднее квадратичное отклонение равно

$$\overline{\Delta L^2} = \overline{(L - \overline{L})^2}. \quad (42)$$

Пусть $\hat{\mathscr{L}}$ есть эрмитов оператор, изображающий величину L. Тогда, согласно основной формуле (32), $\overline{\Delta L^2}$ определяется формулой

$$\overline{\Delta L^2} = \mathrm{Sp}\,\{\hat{\rho}(\hat{\mathscr{L}} - \overline{L})^2\} \quad (43)$$

и требование того, чтобы величина L имела лишь одно значение $L = \lambda$, сводится к условию

$$\mathrm{Sp}\,\{\hat{\rho}\,(\hat{\mathscr{L}} - \lambda)^2\} = 0. \quad (44)$$

Обозначим $\hat{\rho}\,(\hat{\mathscr{L}} - \lambda) = \hat{C}$, тогда $(\hat{\mathscr{L}} - \lambda)\,\hat{\rho} = \hat{C}^+$. Пользуясь (43) и возможностью перестановки операторов под знаком Sp, получим из (44)

$$\mathrm{Sp}\,\{\hat{C}\hat{C}^+\} = 0. \quad (45)$$

Это условие может быть выполнено лишь в том случае, если оператор $\hat{C} = 0$, а следовательно, и $\hat{C}^+ = 0$. Таким образом, мы приходим к уравнениям для оператора $\hat{\rho}$:

$$(\hat{\mathscr{L}} - \lambda)\,\hat{\rho} = 0, \quad \hat{\rho}\,(\hat{\mathscr{L}} - \lambda) = 0. \quad (46)$$

Рассмотрим эти уравнения в координатном представлении, т. е. для матричных элементов $\rho(q, q')$ оператора $\hat{\rho}$. В первом из этих уравнений оператор $\hat{\mathscr{L}}$ действует на аргумент q элемента $\rho(q, q')$, а во втором оператор $\hat{\mathscr{L}}^*$ действует на аргумент q' того же матричного элемента. Поэтому из первого уравнения (46) следует, что элемент $\rho(q, q')$ пропорционален собственной функции $\psi_\lambda(q)$ оператора $\hat{\mathscr{L}}$, принадлежащей собственному значению λ; эта функция подчиняется уравнению

$$\mathscr{L}\,\psi_\lambda(q) = \lambda\psi_\lambda(q). \quad (47)$$

Подобным же образом из второго уравнения вытекает, что $\rho(q, q')$ пропорционален $\psi_\lambda^*(q')$:

$$\hat{\mathscr{L}}^*\psi_\lambda^*(q') = \lambda\psi_\lambda^*(q'). \qquad (47')$$

Как известно, функции $\psi_\lambda(q)$ образуют ортогональную систему. Мы можем считать ее ортонормированной. Тогда

$$\rho(q, q') = \psi_\lambda(q)\,\psi_\lambda^*(q'). \qquad (48)$$

Нетрудно проверить, что условие (47) выполнено, а уравнения (46) удовлетворены.

Собственные функции эрмитовых операторов образуют систему ортов в пространстве Гильберта. Любой другой вектор в этом пространстве $\varphi(q)$ может быть представлен в виде

$$\varphi(q) = \sum_\lambda c_\lambda\psi_\lambda(q), \qquad (49)$$

где c_λ — его компоненты.

Применяя оператор $\hat{\rho}_\lambda$ к φ, получим из (48) и (49)

$$\hat{\rho}_\lambda\varphi = c_\lambda\psi_\lambda(q). \qquad (50)$$

Отсюда следует, что оператор $\hat{\rho}_\lambda$ есть оператор проектирования на ось λ: $\hat{\rho}_\lambda \equiv \hat{P}_\lambda$. В более общем случае

$$\rho(q, q') = \varphi(q)\,\varphi^*(q') \qquad (48')$$

есть оператор проектирования на вектор φ (считая его норму равной 1).

Нетрудно показать, что векторы $\varphi(q)$ пространства Гильберта подчиняются уравнению Шрёдингера

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}}\varphi. \qquad (51)$$

Для доказательства достаточно подставить $\rho(q, q')$ в виде (48′) в уравнение (36) и разделить результат на $\varphi(q)\,\varphi^*(q')$. Эта подстановка приводит к соотношению

$$\left[\frac{\partial\varphi(q)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\hat{\mathscr{H}}\varphi(q)\right]\varphi^{-1}(q) + \left[\frac{\partial\varphi^*(q')}{\partial t} - \frac{1}{i\hbar}\hat{\mathscr{H}}\varphi^*(q')\right][\varphi^*(q')]^{-1} = 0.$$

Отсюда следует, что $\left[\frac{\partial\varphi(q)}{\partial t} + \ldots\right] = ic\varphi(q)$, где c — действительная константа, которая может быть включена в $\mathscr{H}$ за счет сдвига отсчета энергии.

Таким образом, исходя из (28) и (36), мы получаем все уравнения линейной волновой механики.

Статистический ансамбль, описываемый матрицей плотности, являющейся оператором проекции, называют *чистым*. Чистый ансамбль соответствует описанию квантовых явлений с помощью одной волновой функции.

Исходные уравнения (32) и (36) позволяют рассмотреть ансамбль с матрицей плотности $\hat{\rho}$ более общего вида, именно

$$\hat{\rho} = \sum_\lambda W_\lambda\hat{\rho}_\lambda, \qquad (52)$$

где

$$W_\lambda \geqslant 0 \quad \text{и} \quad \sum_\lambda W_\lambda = 1. \qquad (53)$$

Такой ансамбль, по терминологии фон Неймана, называют *смешанным*. Величины W_λ указывают вероятность найти изучаемую систему в состоянии λ, принадлежащем чистому ансамблю, описываемому оператором плотности $\hat{\rho}_\lambda$. Из (52) и (53) получается

$$\hat{\rho}^2 = \sum_\lambda W_\lambda^2 \hat{\rho}_\lambda \leqslant \hat{\rho}. \tag{54}$$

В заключение этого раздела укажем формулу матричных элементов для $\hat{\rho}_\lambda$ в собственном λ-представлении:

$$\rho_{\lambda\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}. \tag{55}$$

В этом же представлении для смешанного ансамбля

$$\rho_{\lambda\lambda'} = W_\lambda \delta_{\lambda\lambda'}. \tag{56}$$

5. ИЗМЕРЕНИЯ И НЕОБРАТИМОСТЬ

Обсуждению измерений предпошлем несколько замечаний, относящихся к связи оператора плотности $\hat{\rho}$ с термодинамической статистикой. Эта связь была указана в той же монографии фон Неймана [1]. И. фон Нейман предложил формулу для энтропии S системы, обобщающую известную формулу Л. Больцмана, именно

$$S = -k \operatorname{Sp} \{\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\}; \tag{57}$$

здесь k — постоянная Больцмана. Из этой формулы сразу следует, что для чистого ансамбля $S = 0$. Чтобы убедиться в этом, достаточно привести оператор $\hat{\rho}$ к диагональному виду. Согласно (55), собственное значение такого оператора равно 1, а $\ln 1 = 0$.

Эта особенность чистого ансамбля есть выражение того обстоятельства, что чистый ансамбль является статистической совокупностью систем, которые *все находятся в одном и том же состоянии.*

Для смешанного ансамбля в том же представлении, на основании (56), получим

$$S = -k \sum_\lambda W_\lambda \ln W_\lambda > 0. \tag{58}$$

Поэтому энтропия смешанного ансамбля всегда больше энтропии чистого ансамбля. Этот результат также был доказан фон Нейманом [1].

Если изучаемая система находится в тепловом равновесии с большим термостатом температуры Θ, то, согласно теории термодинамического ансамбля Гиббса,

$$W_\lambda(\Theta) = e^{(F - E_\lambda)/\Theta}, \tag{59}$$

где $\Theta = kT$, k — постоянная Больцмана, E_λ — собственные значения оператора энергии $\hat{H}$, F — свободная энергия. Подстановка (59) в (58) приводит к известному из термодинамики соотношению

$$F = E - TS, \tag{60}$$

где E — среднее значение энергии системы

$$E = \sum_\lambda E_\lambda W_\lambda(\Theta) \tag{61}$$

при обычном условии нормировки: $\sum_\lambda W_\lambda(\Theta) = 1$.

После этих замечаний обратимся к процессу измерения. Процесс измерения основывается на физическом процессе взаимодействия микросистемы с макроскопической системой ИП — измерительным прибором.

Этот прибор должен быть обязательно макроскопически неустойчивой системой. В противном случае микросистема не может привести его в действие. Она не обладает достаточными для этого энергией и импульсом. На это важное и тривиальное для экспериментаторов обстоятельство не обращалось достаточного внимания со стороны теоретиков. На ранней поре развития квантовой маханики внимание теоретиков было более сосредоточено на новом обстоятельстве — на влиянии измерения на состояние квантовой системы.

Значение этого обстоятельства для понимания процесса измерения было показано в работах автора этой статьи [8].

В этих работах было показано, что процесс измерения начинается на микроскопическом, квантовомеханическом уровне и в силу макроскопической неустойчивости измерительного прибора (ИП) превращается в макроскопический процесс. Поэтому процесс измерения носит характер взрыва, инициируемого измеряемой микросистемой.

Для математического описания этого процесса использование аппарата оператора плотности $\hat{\rho}$ является совершенно необходимым. Эта необходимость вытекает из того обстоятельства, что макроскопический прибор, являясь сложной, микроскопически, системой, не может быть описан волновой функцией. Для включения прибора в квантовомеханическое описание необходимо прибегать к понятию смешанного ансамбля и, следовательно, к аппарату оператора плотности $\hat{\rho}$. Обозначим динамические переменные, описывающие состояние измеряемой системы буквой x, а динамические переменные, описывающие макроскопический прибор — буквой q. Этих переменных может быть очень много. Вообще говоря, прибору должна быть приписана и некоторая температура Θ. Оператор плотности $\hat{\rho}$ объединенной системы будет зависеть от переменных x, q, времени t, и, может быть, от температуры Θ так, что матричный элемент оператора $\hat{\rho}$ в представлении переменных x и q будет $\rho(x, q; x', q', t)$. Разложим этот оператор по собственным функциям $\psi_n(x)$ оператора $\hat{\mathscr{L}}$, представляющего измеряемую величину, которую для простоты будем считать дискретной (n — номер собственного значения $\lambda = L_n$):

$$\rho(x, q; x', q', t) = \sum_{n,m} W_{nm}(q; q', t)\,\psi_n(x)\,\psi_m^*(x'). \tag{62}$$

Среди переменных q лишь немногие будут наблюдаемыми. Для определенности положим, что такая переменная только одна: $q = Q$ *).

Беря диагональный элемент по всем q, кроме $q = Q$, интегрируем (62) по этим переменным; в результате получим матрицу относительно наблюдаемых переменных Q:

$$\rho(x, x', Q; Q', t) = \sum_{n} W_{nm}(Q, Q', t)\,\psi_n(x)\,\psi_m^*(x'). \tag{63}$$

В силу макроскопичности прибора недиагональные элементы по Q исчезающе малы. Таким образом, в (63) $Q' = Q$. Устройство будет измерительным, если при $t \to \infty$ **) величины $W_{nm} = 0$ при $n \neq m$, а W_{nn} отлично от нуля лишь в том случае, если наблюдаемая переменная Q лежит в области $Q \in \Omega_n$ (Ω_n не пересекается с Ω_m, $n \neq m$). Учитывая все возможные результаты измерений: $Q \in \Omega_1$, $Q \in \Omega_2$, ..., $Q \in \Omega_n$, ...,

*) Q есть положение условной «стрелки» измерительного прибора.

**) Под $t \to \infty$ мы понимаем длительность процесса измерения.

интегрируем (63) по всем возможным Q. Тогда получим

$$\rho(x, x', t) = \sum_n W_{nn}(t)\,\psi_n(x)\,\psi_n(x'). \tag{64}$$

где

$$W_{nn}(t) = \int\limits_{\Omega_n} W_{nn}(Q, t)\,dQ \tag{65}$$

и

$$W_{nm}(t) = 0$$

Из этих формул видно, что когерентность различных частных состояний микросистемы $\psi_n(x)$, $\psi_m(x)$, ... в результате взаимодействия с макроскопическим измерительным прибором разрушена. Это нарушение когерентности обусловлено неопределенностью микроскопических переменных прибора q и макроскопичностью наблюдаемых переменных Q.

Рассмотрим теперь характер ансамбля, возникающего после измерений. Допустим, что исходный ансамбль был чистым:

$$\rho(x, x') = \varphi(x)\,\varphi^*(x') \tag{66}$$

и

$$\varphi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x), \tag{67}$$

где $\varphi_n(x)$ — собственные функции оператора $\hat{\mathscr{L}}$, изображающего динамическую переменную L. Если эта величина не меняется в процессе измерения (для этого необходимо, чтобы оператор энергии взаимодействия системы с прибором $\hat{W}$ коммутировал с оператором $\hat{\mathscr{L}}$), то можно показать, что при $t \to \infty$ вероятность пропорциональна $|c_n|^2$:

$$W_{nn}(t)_{t\to\infty} \approx |c_n|^2. \tag{68}$$

Поэтому при надлежащей нормировке в L-представлении элементы матрицы $\rho(x, x', t)$ равны

$$\rho_{nm} = |c_n|^2\,\delta_{nm}. \tag{69}$$

Если после измерений собрать экземпляры системы с $L = L_n$ в n-й ящик, а с $L = L_m$ в m-й и т. д., то совокупность частиц в каждом ящике представляет собой чистый ансамбль, описываемый матрицей плотности $\rho(x, x') = \varphi_n(x)\,\varphi_n^*(x')$. Мы будем иметь дело с несколькими независимыми чистыми ансамблями. Энтропия каждого из них равна нулю. Из теории информации известно, что ее объем можно измерять энтропией [9,10]. При описанном способе проведения измерений объем информации не меняется. Информация изменяет лишь свою форму. Она была максимальной в исходном ансамбле и остается такой же в совокупности ансамблей после измерения *).

Если же все системы после измерения собрать в одном ящике, то мы получим смешанный ансамбль, описываемый матрицей

$$\rho(x, x') = \sum_n |c_n|^2\,\varphi_n(x)\,\varphi_n^*(x'), \tag{70}$$

$$\sum_n |c_n|^2 = 1, \tag{70'}$$

*) Мы не рассматриваем возможного и обычно имеющего место возрастания энтропии измерительного прибора.

энтропия которого равна

$$S = -k \sum_n |c_n|^2 \ln |c_n|^2. \tag{71}$$

Это возрастание энтропии соответствует потере информации, которая имелась ранее относительно исходного ансамбля и была максимальной — она равнялась нулю.

Таким образом, вопрос о характере ансамбля, возникающего после измерений, решается по-разному, в зависимости от того, как объединяются системы, подвергнутые измерению. Это может быть ансамбль смешанный, а может быть и чистый, или несколько чистых. Последний случай возникает тогда, когда наблюдатель, изучающий новый ансамбль, имеет информацию о том, в *каком* из «ящиков» находится система с данным значением $L = L_n$.

Объединенный институт ядерных исследований,
Дубна (Московская обл.)

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. J. von Neumann, Mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik, Brl., J. Springer, 1932. (имеется перевод: И. фон Нейман, Математические основы квантовой механики, М., Физматгиз, 1963.)
2. Дж. Гиббс, Основные принципы статистической механики, М., Гостехиздат, 1946.
3. R. V. Mises, Wahrscheinlichneit, Statistik und Wahrcheit, Brl., J. Springer, 1928.
4. Д. Блохинцев, Ч. Брискина, Вестн. МГУ, № 10 (1942).
5. Д. И. Блохинцев, Принципиальные вопросы квантовой механики, М., «Наука», 1966.
6. Л. И. Мандельштам, Полн. собр. трудов, т. 5, М.— Л., Изд-во АН СССР, 1950.
7. К. В. Никольский, Квантовые процессы, М., Гостехиздат, 1940.
8. Д. И. Блохинцев, УФН **95**, 75 (1968); см. также [5] и «Основы квантовой механики», изд. 5-е, М., «Наука», 1976.
9. Р. П. Поплавский, УФН **115**, 465 (1975).
10. А. М. Яглом, И. М. Яглом, Вероятность и информация, М., Физматгиз, 1960.