Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 1 — 1970

УДК 530.145

В. И. ЮКАЛОВ

СУЩЕСТВОВАНИЕ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ ДЛЯ ПОДСИСТЕМЫ

Исследовано существование волновой функции для одной подсистемы из совокупности N-подсистем. Показано, что даже в случае невзаимодействующих подсистем ни одна из них не имеет волновой функции обычного смысла. Введена обобщенная волновая функция, позволяющая описывать любую подсистему любой системы, и выяснена взаимосвязь этой функции с генеалогическими коэффициентами и матрицей плотности.

Введение

В квантовой теории отдельной системе с координатой x и гамильтонианом $\mathscr{H}(x)$ сопоставляется волновая функция $\psi(x, t)$. Под этим понимается, что функция $\psi(x, t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\mathscr{H}(x)\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t). \tag{1}$$

Среднее значение некоторой динамической переменной $\mathscr{L}(x, t)$ по определению:

$$(\psi|\mathscr{L}|\psi) = \int \psi^*(x, t)\mathscr{L}(x, t)\psi(x, t)\,dx, \tag{2}$$

причем функция считается заданной, если заданы комплексные числа $C_a(t)$ в разложении по состояниям

$$\psi(x, t) = \sum_a C_a(t)\psi_a(x). \tag{3}$$

Функции $\psi_a(x)$ находятся из равенств

$$\mathscr{H}(x)\psi_a(x) = E_a\psi_a(x), \quad (\psi_a|\psi_b) = \delta_{ab}.$$

Подставляя (3) в (2), получаем

$$(\psi|\mathscr{L}|\psi) = \sum_{ab} C_a^*(t)C_b(t)(\psi_a|\mathscr{L}|\psi_b). \tag{4}$$

Если же рассматривается система, состоящая из N взаимодействующих подсистем, то, обозначая координаты одной из них x, остальных y, запишем уравнение

$$\mathscr{H}(x, y)\,\Psi(x, y, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, y, t), \tag{5}$$

среднее для $\mathscr{L}(x, t)$:

$$(\Psi\,|\,\mathscr{L}\,|\,\Psi) = \int \Psi^*(x, y, t)\,\mathscr{L}(x, t)\,\Psi(x, y, t)\,dx\,dy \tag{6}$$

и разложение волновой функции по состояниям

$$\Psi(x, y, t) = \sum_A D_A(t)\,\Psi_A(x, y). \tag{7}$$

Из (7) и (6) получается

$$(\Psi\,|\,\mathscr{L}\,|\,\Psi) = \sum_{AB} D_A^*(t)\,D_B(t)\,(\Psi_A\,|\,\mathscr{L}\,|\,\Psi_B). \tag{8}$$

В статье выясняется вопрос, можно ли подсистеме с координатой x сопоставить волновую функцию вида (3), чтобы вычисляемое с ее помощью по правилу (2) среднее значение для динамической переменной $\mathscr{L}(x, t)$ совпадало с истинным средним (6).

Обычная волновая функция. Очевидно, что если взаимодействие x-подсистемы (описываемой координатой x) и Y-подсистемы (описываемой координатой Y) отлично от нуля, то у x-подсистемы не существует волновой функции в смысле (1—3). Покажем, что такой волновой функции, вообще говоря, нет также и в том случае, когда указанное взаимодействие равно нулю.

Отсутствие взаимодействия. Пусть N-подсистем подчиняются принципу симметрии. Поскольку свойство симметрии является интегралом движения [1], постольку в результате предельного перехода от невырожденного к исчезающему взаимодействию волновые функции сохраняют тип симметрии, оставаясь симметричными (s) либо антисимметричными (as).

Введем индексы α и β, обозначающие определенные наборы $\{a_i\}$ и $\{b_i\}$ из всех возможных состояний по N, и индексы p и r, обозначающие различные перестановки состояний отдельных подсистем внутри соответствующих сочетаний α или β. Для N тождественных невзаимодействующих подсистем наиболее общая симметризованная волновая функция [2] принимает вид

$$\Psi^{(s,as)}(x, y, t) = \sum_\alpha\sum_p\prod_{i=1}^N D_\alpha(t)\,(-1)^{\lambda_p(s,as)}\sqrt{\frac{N_{ai}!}{N!}}\,\psi_{a_i}(x_i).$$

Здесь для бозе-симметрии $\lambda_p(s)$ равно нулю, а для ферми-симметрии $\lambda_p(as)$ представляет собой четность перестановки p. Число частиц в состоянии a_i есть N_{a_i}. Используя полученную функцию, находим:

$$(\Psi^{(s,as)}\,|\,\mathscr{L}\,|\,\Psi^{(s,as)}) =$$

$$= \sum_{ab}\sum_{\alpha\beta}\sum_{pr}\prod_{i\neq k} D_\alpha^*(t)\,D_\beta(t)\,(-1)^{\lambda_p(s,as)+\lambda_r(s,as)}\,\frac{\sqrt{N_{ai}!\,N_{bi}!\,N_{ak}!\,N_{bk}!}}{N!}\times$$

$$\times\,\delta_{a_i b_i}\delta_{aa_k}\delta_{bb_k}(\psi_a\,|\,\mathscr{L}\,|\,\psi_b), \tag{9}$$

где за x принято x_k.

Для того чтобы одна подсистема из совокупности N тождественных невзаимодействующих систем описывалась волновой функцией в смысле

(1—3), выражения (4) и (9) должны совпадать. А для этого, ввиду произвольности $\mathscr{L}(x, t)$, необходимо и достаточно, чтобы коэффициенты при $(\psi_a | \mathscr{L} | \psi_b)$ в (9) были представлены как $C_a^*(t) C_b(t)$.

Упростим задачу, положив

$$|D_\alpha(t)| = \delta_{\alpha\alpha_0},$$

тогда (9) трансформируется в

$$(\Psi^{(s,as)} | \mathscr{L} | \Psi^{(s,as)}) = \sum_{ab} \frac{N_a}{N} \delta_{ab} (\psi_a | \mathscr{L} | \psi_b). \tag{10}$$

За исключением тривиального случая, заключающегося в том, что все подсистемы находятся в одном и том же состоянии a_0, $N_a = N\delta_{aa_0}$; $\frac{N_a}{N} \delta_{ab}$ не представимо в виде $C_a^*(t) C_b(t)$, что и требовалось показать.

Теперь убедимся, что не существует уравнения Шредингера, зависящего только от одной координаты x, решение которого являлось бы волновой функцией для x-подсистемы.

Однокоординатное уравнение Шредингера

Допустим, можно найти такой гамильтониан $\mathscr{H}'(x)$, для которого:

$$\mathscr{H}'(x) \psi'(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(x, t),$$

где $\psi'(x, t)$ есть волновая функция x-подсистемы.

Тогда среднее для $\mathscr{L}(x, t)$ вычисляется посредством скалярного произведения $(\psi' | \mathscr{L} | \psi')$, и по условию оно должно всегда совпадать со средним (6). Для $\psi'(x, t)$ справедливо разложение: $\psi'(x, t) = \sum_c C'_c(t) \psi'_c(x)$.

В свою очередь $\psi'_c(x) = \sum_a (\psi_a | \psi'_c) \psi_a(x)$.

Так что

$$(\psi' | \mathscr{L} | \psi') = \sum_{ab} \left[\sum_c C'_c(t) (\psi_a | \psi'_c) \right]^* \left[\sum_d C'_d(t) (\psi_b | \psi'_d) \right] (\psi_a | \mathscr{L} | \psi_b).$$

Беря случай (10), приходим к противоречию:

$$\left[\sum_c C'_c(t) (\psi_a | \psi'_c) \right]^* \left[\sum_d C'_d(t) (\psi_b | \psi'_d) \right] \neq \frac{N_a}{N} \delta_{ab},$$

доказывающему несостоятельность исходного допущения.

Таким образом, одной подсистеме из совокупности N, хотя бы и не взаимодействующих подсистем, вообще говоря, нельзя приписать волновой функции в смысле (1—3).

Обобщенная волновая функция

Волновая функция представляет собой формальное математическое выражение, поскольку сама по себе она не может быть измерена на опыте. Поэтому будет правомерным, выходя за рамки условия (3), попытаться найти для x-подсистемы волновую функцию, удовлетворяющую (1, 2). Для этого выберем произвольный $(N-1)$ координатный ортонор-

мированный базис $\{\Psi_M(y)\}$. Разложим с его помощью общую функцию N-подсистем:

$$\Psi(x, y, t) = \sum_{Ma} (\Psi_M \psi_a | \Psi) \Psi_M(y) \psi_a(x).$$

Вычислим среднее для $\mathscr{L}(x, t)$ по правилу (6)

$$(\Psi | \mathscr{L} | \Psi) = \sum_{ab} \Big[\sum_M (\Psi_M \psi_a | \Psi)^* (\Psi_M \psi_b | \Psi) \Big] (\psi_a | \mathscr{L} | \psi_a). \tag{11}$$

Теперь определим вектор $\vec{C}_a(t)$ с компонентами

$$C_a^M(t) = (\Psi_M \psi_a | \Psi). \tag{12}$$

Скалярное произведение таких векторов, как обычно:

$$\vec{C}_a(t)^* \vec{C}_b(t) = \sum_M C_a^M(t)^* C_b^M(t). \tag{13}$$

Составляем векторную функцию

$$\vec{\psi}(x, t) = \sum_a \vec{C}_a(t) \psi_a^{(x)},$$

которая удовлетворяет условию (1):

$$\mathscr{H}(x) \vec{\psi}(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{\psi}(x, t),$$

а также (2):

$$(\vec{\psi} | \mathscr{L} | \vec{\psi}) = \sum_{ab} \vec{C}_a(t)^* \vec{C}_b(t) (\psi_a | \mathscr{L} | \psi_b), \tag{14}$$

причем (14), имея структуру (4), совпадает с (11). Исходя из вышесказанного функцию $\vec{\psi}(x, t)$ допустимо интерпретировать как обобщенную волновую функцию x-подсистемы из ансамбля N взаимодействующих подсистем.

Заметим, что при $N=1$ базис $\{\Psi_M(y)\}$ вырождается в одномерный и обобщенная волновая функция переходит в обычную.

Изучим взаимоотношения описания, использующего обобщенную волновую функцию, с другими, известными способами описаний подсистем.

Связь с генеалогическими коэффициентами. Метод обобщенной волновой функции справедлив для любой подсистемы любой системы. Рассмотрим частный случай: N подсистем подчиняются принципу симметрии.

Общая волновая функция разлагается подобно (7):

$$\Psi^{(s,as)}(x, y, t) = \sum_A D_A(t) \Psi_A^{(s,as)}(x, y).$$

В свою очередь симметричную или антисимметричную функцию N-подсистем в состоянии A можно представить в виде линейной комбинации произведений симметризованных функций N—1 подсистемы $\Psi_{M'}^{(s,as)}(y)$ на волновые функции одной подсистемы $\Psi_{a'}(x)$, так что каждая совокупность состояний M' и a' дает состояние A [3]:

$$\Psi_A^{(s,as)}(x, y) = \sum_{(M'a')=A} G_{a'}^{M'} \Psi_{M'}^{(s,as)}(y) \psi_{a'}(x),$$

где коэффициенты $G_{a'}^{M'}$ эквивалентны генеалогическим. Или, распространяя суммирование по всем M' и a', запишем

$$\Psi_A^{(s,as)}(x, y) = \sum_{M'a'} \delta_{(M'a')A} G_{a'}^{M'} \Psi_{M'}^{(s,as)}(y) \psi_{a'}(x).$$

Используя (12), получаем связь $C_a^M(t)$ с генеалогическими коэффициентами:

$$C_a^M(t) = \sum_A \sum_{M'} D_A(t)\, \delta_{(M'a)A} (\Psi_M \mid \Psi_{M'}^{(s,as)})\, G_a^{M'}.$$

Базис $\{\Psi_M(y)\}$ выберем также симметризованным, тогда

$$C_a^M(t) = \sum_A D_A(t)\, \delta_{(Ma)A} G_a^M.$$

Если, кроме того, положить $D_A(t) = \delta_{AA_0}$ (что соответствует существованию только одного состояния A_0), то $C_a^M(t) = \delta_{(Ma)A_0} G_a^M$.

Как видим, техника генеалогических коэффициентов — гораздо менее общий способ описания подсистем, если не считать отличия в математическом аппарате.

Связь с матрицей плотности. Выражению (13) можно придать смысл матрицы плотности в энергетическом представлении [4] и обозначить:

$$W_{ab}(t) = \sum_M C_a^M(t)\, C_b^M(t),$$

тогда (14) имеет вид $(\vec{\psi} \mid \mathscr{L} \mid \vec{\psi}) = \sum_{ab} W_{ab}(t) (\psi_a \mid \mathscr{L} \mid \psi_b)$.

Так как в природе нет абсолютно уединенных систем, то каждую из них надо рассматривать как подсистему и, даже если она не взаимодействует с остальными, ее следует описывать матрицей плотности или использовать метод обобщенной волновой функции [5].

Положим, нас интересует поведение электрона в некотором внешнем поле, и в этом же поле присутствует множество других электронов. Пусть взаимодействия между ними пренебрежимо малы, а общее число их, равное N, столь велико, что заняты все возможные состояния a. В таком случае

$$\Psi^{(as)}(x, y, t) = \sum_p \prod_{i=1}^{N} (-1)^{\lambda_p(as)} \sqrt{\frac{N_{a_i}!}{N!}}\, \psi_{a_i}(x_i).$$

Полагая координату рассматриваемого электрона $x = x_k$ выбираем антисимметричный ортонормированный базис:

$$\Psi_M^{(as)}(y) = \sum_m \prod_{i \neq k} (-1)^{\lambda_m(as)} \sqrt{\frac{N_{bi}!}{(N-1)!}}\, \psi_{b_i}(x_i),$$

где m — перестановка $N-1$ состояния b_i. Используя (12), получаем

$$C_a^M(t) = \sum_{pm} \prod_{l \neq k} (-1)^{\lambda_m(as) + \lambda_p(as)} \sqrt{\frac{N_{b_i}!\, N_{a_i}!\, N_{a_k}!}{(N-1)!\, N!}}\, \delta_{a_i b_i} \delta_{aa_k}. \qquad (15)$$

На основании (13) и (15) имеем $\vec{C}_a(t)^* \vec{C}_b(t) = \frac{N_a}{N} \delta_{ab}$.

Исключаем явную зависимость от N: $N=\sum_a N_a$. Обозначим $W_a=N_a/\sum_a N_a$. Под W_a подразумеваем вероятность нахождения частицы в состоянии a и определяем на основании положений в [4] и [5]. Итак, несмотря на то, что отдельный электрон не взаимодействует с остальными, он не обладает волновой функцией в обычном смысле, а описывается обобщенной функцией, которая дает среднее:

$$(\vec{\psi}\,|\,\mathscr{L}\,|\,\vec{\psi})=\sum_a W_a(\psi_a\,|\,\mathscr{L}\,|\,\psi_a).$$

В заключение выражаю благодарность проф. Я. П. Терлецкому за постановку темы и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ферми Э. Квантовая механика. М., «Мир», 1965.
2. Перель В. И. ЖЭТФ, 35, 685, 1958.
3. Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М., Физматгиз, 1963.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М., «Наука». 1964.
5. Сб. «Вопросы причинности в квантовой механике». М., ИЛ, 1955.

Поступила в редакцию
16.4 1969 г.

Кафедра
теоретической физики