

Вестник МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 5 — 1971

УДК 530.145

В. И. ЮКАЛОВ

ПОНЯТИЕ ВЫДЕЛЕННОСТИ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ПОДСИСТЕМ

В работе рассмотрена выделенная подсистема, принадлежащая замкнутой квантовой системе. Исследован вопрос о возможности описания отдаленной подсистемы с помощью обычной волновой функции. Установлено матричное уравнение для векторной волновой функции, позволяющее точно описывать любую подсистему такой системы. Проводится анализ уравнения и предлагается способ получения высших приближений при изучении квазиизолированных подсистем.

§ 1. Изолированность и отдаленность

Хорошо известно, что все реальные, т. е. существующие в природе системы, являются подсистемами некоторых больших систем. Положим, нас интересует поведение некоей подсистемы, которую мы выделяем, приписывая ей координату x . Оставшуюся часть большой системы назовем фоном и сопоставим ему координату y . Уравнение, описывающее x -подсистему, должно включать в себя как x , так и координату фона y . Пусть:

$$\left[\mathcal{H}(x, y, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi(x, y, t) = 0. \quad (1)$$

Гамильтониан $\mathcal{H}(x, y, t)$ представляется в виде суммы

$$\mathcal{H}(x, y, t) = \mathcal{H}_0(x, t) + F(x, y, t), \quad (2)$$

где $F(x, y, t)$ соответствует взаимодействию x -подсистемы с фоном. Среднее значение оператора $L(x, y, t)$, зависящего от координат как x -подсистемы, так и фона, определяется формулой

$$\langle \Psi | L | \Psi \rangle \equiv \int \Psi^*(x, y, t) L(x, y, t) \Psi(x, y, t) dx dy. \quad (3)$$

Все реальные подсистемы можно подразделить на неизоллированные и квазиизолированные. К неизоллированным подсистемам относятся подсистемы, испытывающие сильное влияние фона, потому проекции на них состояний больших замкнутых систем всегда являются смесями. Квазиизолированные подсистемы — это такие подсистемы, которые в некотором приближении могут рассматриваться как изолированные и, следовательно, описываться обычными волновыми функциями. Квазиизолированной подсистемой является, например, атом водорода успеш-

но описываемый уравнением Шредингера. Но, как известно, описание это приближенное, причем не только с точки зрения релятивистских эффектов.

Каким же образом возможно последовательно и неограниченно повышать степени приближений для квазиизолированных подсистем? Чтобы ответить на этот вопрос, исследуем, существует ли такое уравнение, зависящее от координат лишь выделенной подсистемы, решения которого давали бы по обычным правилам квантовой механики верные средние значения для любых динамических переменных $L(x, t)$.

Прежде всего посмотрим, не может ли выделенная подсистема быть отдаленной от фона настолько, чтобы стать изолированной. Представим себе, что x -подсистема значительно (так что $F(x, t) \rightarrow 0$) удалена от фона. Чтобы это высказывание было корректным, его надо относить к определенному периоду времени, например $[0, t_0]$. Кроме того, понятие отдаленности подсистем друг от друга включает в себя сведения об их сравнительном положении в пространстве. А для того чтобы узнать местонахождение подсистемы в некоторый момент времени t , нужно обязательно провести определение ее координаты в данный момент. Стало быть, если уже мы постулируем взаимодальность подсистем во временном сегменте $[0, t_0]$, то это с необходимостью подразумевает, что в течение данного отрезка времени мы измеряли их координаты. Но всякий акт измерения сопровождается действием измерительного устройства на исследуемую подсистему, у которой в это время, естественно, не может быть своей волновой функции. Пусть даже измерения мгновенны и каждое влияние прибора, являясь достаточно точным и минимально изменяющим свойства подсистемы (т. е. сильным [1]), разрывает связь x -подсистемы с фоном, так что между отдельными наблюдениями отдаленная x -подсистема обладает волновой функцией. Для упрощения будем также считать, что измерения равновероятны и следуют через одинаковые промежутки времени Δt . Тогда их общее число $\Gamma = \frac{t_0}{\Delta t}$. При указанных предположениях непосредственно после γ -ого измерения ($\gamma = 1 \dots \Gamma$) волновая функция x -подсистемы разлагается по собственным функциям гамильтониана $\mathcal{H}_0(x)$, домноженным [1] на непредсказываемые и неконтролируемые фазовые факторы $e^{i\eta_a^\gamma}$:

$$\psi^\gamma(x, t) = \sum_a c_a(t) e^{i\eta_a^\gamma} \psi_a(x), \quad (4)$$

где η_a^γ — случайная величина, равномерно распределенная в интервале $(-\infty, +\infty)$. Истинное среднее оператора $L(x, t)$, не зависящее от номера измерения, есть

$$\frac{1}{\Gamma} \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} (\psi^\gamma | L | \psi^\gamma) = \sum_{ab} \left[\frac{1}{\Gamma} \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} c_a^*(t) c_b(t) e^{-i(\eta_a^\gamma - \eta_b^\gamma)} \right] (\psi_a | L | \psi_b). \quad (5)$$

Вследствие непредсказываемости и неконтролируемости величин η_a^γ и η_b^γ , суммирование по γ , вообще говоря, перепутывает индексы a и b . Отсюда следует, что (5) эквивалентно (3). Поэтому, даже если в промежутках между измерениями приписывать волновую функцию отдаленной x -подсистеме, в произвольном сегменте $[0, t_0]$ она не может быть изолированной.

Особенно наглядно отсутствие у отдаленной подсистемы волновой функции видно для стационарно-отдаленного случая, т. е. когда всякое измерение (сколь угодно большого порядкового номера), проводимое в момент времени $t \in [0, t_0]$, при $t_0 \rightarrow \infty$ констатирует взаимоудаленность данной подсистемы и фона. Предположим, что

$$\xi_{ab}^{\nu} \equiv e^{-i(\eta_a^{\nu} - \eta_b^{\nu})}. \quad (6)$$

Набор $\{\xi_{ab}^{\nu}\}$ представляет собой совокупность независимых случайных величин, имеющих одно и то же распределение вероятностей, в частности одни и те же математические ожидания

$$M \xi_{ab}^{\nu} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(\eta_a^{\nu} - \eta_b^{\nu})} d\eta_a^{\nu} d\eta_b^{\nu}}{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta_a^{\nu} d\eta_b^{\nu}} = \delta_{ab} \quad (7)$$

и дисперсии

$$D \xi_{ab}^{\nu} = M (\xi_{ab}^{\nu} - M \xi_{ab}^{\nu})^2 = 0. \quad (8)$$

Для таких случайных величин при больших Γ справедливо второе неравенство Чебышева

$$P \left\{ \left| \frac{1}{\Gamma} \sum_{\nu=1}^{\Gamma} \xi_{ab}^{\nu} - M \xi_{ab}^{\nu} \right| \ll \varepsilon \right\} \geq 1 - \frac{D \xi_{ab}^{\nu}}{\Gamma \varepsilon^2}, \quad (9)$$

каково бы ни было положительное число ε . Из неравенства (9) следует

$$\lim_{\Gamma \rightarrow \infty} \frac{1}{\Gamma} \sum_{\nu=1}^{\Gamma} (\psi^{\nu} | L | \psi^{\nu}) = \sum_{ab} |c_a(t)|^2 \delta_{ab} (\psi_a | L | \psi_b). \quad (10)$$

В правой части (10) индексы a и b , очевидно, неразделимы, за исключением тривиального случая, когда только одно $c_a(t)$ отлично от нуля. Значит, подсистема, вообще говоря, не имеет волновой функции.

Окончательно делаем вывод: никакая реальная подсистема, в том числе и отдаленная, не может быть изолированной.

§ 2. Уравнение для подсистемы

Предположим, волновая функция $\Psi(x, y, t)$ из уравнения (1) принадлежит векторному пространству Q обладающему базисом [2]. Это предположение эквивалентно важнейшему постулату квантовой механики: принципу суперпозиции. Согласно последнему, любое состояние квантово-механической системы можно рассматривать как результат суперпозиции других состояний [3]. Принцип суперпозиции называется также постулатом разложимости, так как он допускает разложение функции $\Psi(x, y, t)$ в ряд по некоторой полной ортонормированной системе. В качестве последней всегда возможно взять, например, совокупность собственных функций эрмитова оператора. Поскольку в квантовой механике допускаются только гипермаксимальные эрмитовы операторы, т. е. такие операторы, для которых проблема собственных значений разрешима [4]. Постулат разложимости необходим для статистического истолкования коэффициентов разложения.

Нельзя отказаться от этого постулата, не затрагивая коренных положений квантовой механики.

При исследовании $\Psi(x, y, t)$ будем считать x и t параметрами, доопределяющими функциональную зависимость, а y — переменной. Таким образом, каждой точке y ставится в соответствие функция $\Psi(x, y, t)$, принадлежащая пространству Q_y . По определению Q_y — линейное пространство, имеющее базис $\{\Psi_n(y)\}$.

Желая построить уравнение, содержащее кроме времени t координаты лишь выделенной x -подсистемы, но не фона, докажем следующее утверждение.

Теорема. Если справедливо уравнение (1) и правило вычисления средних (3), а нормированная волновая функция $\Psi(x, y, t)$ принадлежит пространству Q_y :

$$\Psi(x, y, t) \in Q_y; \quad (\Psi | \Psi) = 1, \quad (11)$$

тогда выделенная x -подсистема описывается матричным уравнением

$$\left[\tilde{\mathcal{H}}(x, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \vec{\psi}(x, t) = 0, \quad (12)$$

а перенормированные матричные операторы дают среднее вида

$$(\vec{\psi} | \tilde{L} | \vec{\psi}) \equiv \int \vec{\psi}(x, t) \tilde{L}(x, t) \vec{\psi}(x, t) dx. \quad (13)$$

Доказательство. Учитывая условие (11) и данное выше определение пространства Q_y , запишем

$$\Psi(x, y, t) = \sum_n \psi_n(x, t) \Psi_n(y); \quad (\Psi_m | \Psi_n) = \delta_{mn}. \quad (14)$$

Здесь $\psi_n(x, t)$ играет роль коэффициента разложения волновой функции $\Psi(x, y, t)$ по ортонормированному базису пространства Q_y .

В суперпозиции (14) содержатся и непрерывные, и дискретные значения n , т. е. суммирование понимается в обобщенном смысле. Когда индекс n принадлежит непрерывному спектру, вместо \sum_n подразумевается $\int dn$. В случае дискретных m и n δ_{mn} — символ Кронекера, в случае непрерывных δ -функция Дирака $\delta(m-n)$. Подставляем (14) в исходные выражения (1) и (3). Домножаем (1) слева на $\Psi_m^*(y)$ и проводим интегрирование по y . При этом, как обычно, считаем интегрирование, суммирование и дифференцирование перестановочными операциями. Получаем:

$$\sum_n \int \Psi_m^*(y) \left[\mathcal{H}(x, y, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi_n(y) dy \psi_n(x, t) = 0; \quad (15)$$

$$(\Psi | L | \Psi) = \int \sum_{mn} \psi_m^*(x, t) \Psi_m^*(y) L(x, y, t) \Psi_n(y) \psi_n(x, t) dx dy.$$

Преобразуем (15), вводя обозначения:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{mn}(x, t) &\equiv \int \Psi_m^*(y) \mathcal{H}(x, y, t) \Psi_n(y) dy; \\ L_{mn}(x, t) &\equiv \int \Psi_m^*(y) L(x, y, t) \Psi_n(y) dy. \end{aligned} \quad (16)$$

Тогда запишем

$$\sum_n \left[\mathcal{H}_{mn}(x, t) - i\hbar \delta_{mn} \frac{\partial}{\partial t} \right] \psi_n(x, t) = 0; \quad (17)$$

$$(\Psi | L | \Psi) = \int \sum_{mn} \psi_m^*(x, t) L_{mn}(x, t) \psi_n(x, t) dx.$$

Определим квадратные матрицы

$$\tilde{\mathcal{H}}(x, t) \equiv \|\mathcal{H}_{mn}(x, t)\|; \quad \tilde{L}(x, t) \equiv \|L_{mn}(x, t)\|. \quad (18)$$

Введем вектор-функцию, представляющую собой столбец

$$\vec{\psi}(x, t) \equiv \|\psi_n(x, t)\|. \quad (19)$$

Вследствие свойств (11) и (14) для функции (19) верно

$$(\vec{\psi} | \tilde{I} | \vec{\psi}) = 1; \quad \tilde{I} \equiv \|\delta_{mn}\|, \quad (20)$$

где \tilde{I} — очевидно, единичная матрица. С помощью (18) и (19) от (17) легко перейти к (12) и (13). Что и требовалось доказать.

В полученном уравнении (12) матричный гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}(x, t)$ зависит от координат лишь x -подсистемы. Среднее (13), где $\vec{\psi}(x, t)$ означает эрмитово-сопряженную вектор-функцию $\vec{\psi}(x, t)$, совпадает с истинным средним (3). Поэтому $\vec{\psi}(x, t)$ допустимо интерпретировать как обобщение понятия обычной волновой функции.

§ 3. Исследование матричного уравнения

Учитывая структуру гамильтониана $\mathcal{H}(x, y, t)$, даваемую формой (2), вместо уравнения (12) можем записать

$$\tilde{I} \left(\mathcal{H}_0 - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \vec{\psi} = -\tilde{F} \vec{\psi}. \quad (21)$$

Здесь подразумевается, что \mathcal{H}_0 , $\vec{\psi}$, \tilde{F} зависят лишь от (x, t) , а для краткости в (21) указанная зависимость явно не выписана. Матрица $\tilde{F}(x, t)$ соответствует влиянию фона на рассматриваемую x -подсистему и образована согласно правилам (16) и (18).

Если оператор $\tilde{\mathcal{H}}(x, t)$ — самосопряженный, то, используя обычные приемы, нетрудно из (21) получить уравнение для статистического оператора R :

$$\tilde{I} \left([\mathcal{H}_0, R] - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} R \right) = -[\tilde{F}, R]. \quad (22)$$

Или в $x - x'$ -представлении:

$$[\tilde{\mathcal{H}}(x', t) R(x, x', t) - R(x, x', t) \tilde{\mathcal{H}}(x, t)] - i\hbar \tilde{I} \frac{\partial}{\partial t} R(x, x', t) = 0. \quad (23)$$

Взаимодействие операторов \tilde{L} и R определяется выражением

$$\tilde{L}(x', t) R(x, x', t) \equiv \vec{\psi}(x, t) \tilde{L}(x', t) \vec{\psi}(x', t). \quad (24)$$

Вид уравнений (21), (22) показывает, что если не учитывать фон, т. е. положить $\tilde{F} \equiv 0$, тогда мы получим привычные одномерные уравнения квантовой механики. Если же $\tilde{F} \neq 0$, то надо принять во внимание, что размерность уравнения для x -подсистемы расщепляется, а динамические переменные, соответствующие рассматриваемой подсистеме, перенормировываются и становятся матричными. В том случае, когда в гамильтониане выделенной подсистемы \tilde{F} мало по сравнению с \mathcal{H}_0 :

$$F_{mn}(x, t) \ll \mathcal{H}_0(x, t), \quad (25)$$

тогда такая подсистема квазиизолирована. Приближенно ее можно считать изолированной. Однако интересно исследовать возможные способы повышения точности при описании предложенной подсистемы.

Возьмем частный случай пространства Q_y : сепарабельное гильбертово пространство. В квантовой механике чаще всего полагают, что волновая функция принадлежит именно этому пространству. Но известно [5], что в сепарабельном гильбертовом пространстве непременно существует не более чем счетный базис, т. е. последовательность индексов n в полной ортонормированной системе $\{\Psi_n(y)\}$ конечна или счетна. Стало быть, размерность матричного уравнения (12), или (21), тоже либо конечная, либо счетная. В таком случае чтобы повысить степень приближения для квазиизолированной подсистемы, надо повысить матричную размерность уравнения (21). Последнее осуществляется за счет соответствующего моделирования, взаимодействия $\tilde{F}(x, t)$ фона с выделенной подсистемой.

Продемонстрируем сказанное на примере электрона в электромагнитном поле, задаваемом электрическим и магнитным потенциалами $\Phi(x)$ и $A(x)$. В первом приближении $\tilde{F} \equiv 0$, а в качестве \mathcal{H}_0 можно взять, например,

$$\mathcal{H}_0 = e\Phi + \frac{P^2}{2m}; \quad P = p - \frac{e}{c} A. \quad (26)$$

Получаем вместо (21) уравнение Шредингера.

Вводя обозначения

$$\chi_1 \equiv \frac{e\hbar}{2mc} \text{rot}_3 A; \quad \chi_2 \equiv \frac{e\hbar}{2mc} (\text{rot}_1 A - i \text{rot}_2 A), \quad (27)$$

где $\text{rot}_j A$ есть j -тая проекция $\text{rot} A$, получим более высокое приближение. Подставляя в (21) \mathcal{H}_0 из (26) и

$$\tilde{F} = \begin{pmatrix} \chi_1 & \chi_2 \\ \chi_2^* & -\chi_1 \end{pmatrix}, \quad (28)$$

получим уравнение Паули. Еще точнее можно x -подсистему (здесь, электрон) описать, задавая

$$\varepsilon_1 \equiv mc^2 - \frac{P^2}{2m}; \quad \varepsilon_2 \equiv cP_1 - icP_2; \quad (29)$$

$$\varepsilon_3 \equiv cP_3; \quad \varepsilon_4 \equiv -mc^2 - \frac{P^2}{2m}$$

и конструируя матрицу

$$\tilde{F} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & \varepsilon_3 & \varepsilon_2 \\ 0 & \varepsilon_1 & \varepsilon_2^* & -\varepsilon_3 \\ \varepsilon_3 & \varepsilon_2 & \varepsilon_4 & 0 \\ \varepsilon_2^* & -\varepsilon_3 & 0 & \varepsilon_4 \end{pmatrix}; \quad (30)$$

в этом случае уравнение (21) превратится в уравнение Дирака.

Итак, в указанных условиях для получения высших приближений при описании выделенной квазиизолированной подсистемы достаточно повысить размерность матричного уравнения (21).

Автор признателен проф. Я. П. Терлецкому за неоднократные обсуждения работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бом Д. Квантовая теория. М., «Наука», 1965, стр. 668.
2. Эдвардс Р. Функциональный анализ. М., «Мир», 1969, стр. 618.
3. Дирак П. А. Принципы квантовой механики. М., Физматгиз, 1960, стр. 26.
4. Фон Нейман И. Математические основы квантовой механики, М., «Наука», 1964, стр. 80.
5. Вулих Б. З. Введение в функциональный анализ. М., «Наука», 1967, стр. 161.

Поступила в редакцию
4.7 1970 г.

Кафедра
теоретической физики