СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

P2 - 9409

Т.С.Тодоров

О СОВМЕСТИМОСТИ НАБЛЮДАЕМЫХ ВЕЛИЧИН И ИХ ИЗМЕРЕНИИ В КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОМ ФОРМАЛИЗМЕ

1975

P2 - 9409

Т.С.Тодоров

О СОВМЕСТИМОСТИ НАБЛЮДАЕМЫХ ВЕЛИЧИН И ИХ ИЗМЕРЕНИИ В КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОМ ФОРМАЛИЗМЕ

1. Наблюдаемые и формализм фон Неймана

Как известно, фон Нейман [1] впервые дал последовательную математическую формулировку квантовой механики с использованием методов пространства Гильберта H. В этой формулировке каждому состоянию квантовой системы отвечает луч в H, а каждой наблюдаемой величине системы отвечает самосопряженный /в общем случае неограниченный/ оператор S. Обычно область определения $D(S)$ оператора является линейным подмножеством H, всюду плотным в H. Для дальнейшего обсуждения существенным является различие между симметрическими /эрмитовыми/ и самосопряженными операторами [x]. Оператор S называется симметрическим, если для любых двух векторов f, g, принадлежащих области определения $D(S)$, $f, g \in D(S)$, выполняется равенство /1/ для скалярных произведений:

$$(Sf, g) = (f, Sg). \qquad /1/$$

Если дополнительно к /1/ выполняется и соотношение

$$D(S^*) \subset D(S), \qquad /2/$$

т.е. область определения $D(S^*)$, сопряженного к S оператора S^*, содержится в $D(S)$, то S называется самосопряженным оператором. Так как для симметрического оператора S всегда имеется включение $D(S) \subset D(S^*)$,

---

[x] Для целей физики иногда такое различие делается недостаточно четко.

то из /1/ и /2/ следует, что самосопряженность S эквивалентна совпадению S и S^*, $S = S^*$ на их общей области определения, $D(S) = D(S^*)$.

В формулировке фон Неймана, как известно, существенно используется самосопряженность операторов, отвечающих наблюдаемым, например, при определении вероятностей измерения наблюдаемых в данных состояниях, при вычислении средних значений и т.д. с помощью спектральных семейств операторов.

2. *О математическом описании одной квантовомеханической системы*[x]

Рассмотрим квантовомеханическую частицу, движущуюся в трехмерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Пусть потенциальная яма имеет пространственную форму, различающуюся от параллелепипеда /с поверхностями, параллельными координатным плоскостям/, например, форму эллипсоида. Пусть /числовые/ значения энергии $E(\vec{p}, m_i^*)$ частицы связаны со значениями трех проекций p_i, $i = 1, 2, 3$ ее импульса $\vec{p}$ выражением:

$$E = (\vec{p}, m_i^*) = \sum_{i=1}^{3} p_i^2 / 2m_i^* , \qquad /3/$$

где $m_1^* \neq m_2^* \neq m_3^*$ /"эффективные массы" частицы по трем направлениям координатной системы/ - положительные константы.

Этой квантовомеханической системе отвечает, например, электрон или другая "квазичастица", движущаяся в анизотропном периодическом поле кристаллической решетки с "законом дисперсии" вида /3/, см. напр. /2/, гл. XIII.

Указанный вид /3/ функциональной зависимости для энергии /"приближение эффективной массы"/ возможен при небольших значениях импульса $\vec{p}$ /2/. После введения

---

x/Рассмотрение, близкое данному, делалось также автором совместно с Р.Денчевым и Д.Пушкаровым.

эффективных масс m_i^* движение электрона в периодическом поле, как известно, будет во многом сходно с движением квазичастицы с энергией /3/ и квадратом квазиимпульса /4/:

$$\vec{p}^{\,2} = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 \qquad /4/$$

в потенциальной яме M в вакууме. /Строго говоря, закон дисперсии вида /3/ имеет место для бесконечного кристалла, см. /2/, §126, §128/. Однако для достаточно больших, но конечных кристаллических образцов влияние конечных размеров на вид зависимости /3/ становится исчезающе малым. В дальнейшем использование зависимости /3/ вместо точной зависимости не сказывается на характере выводов, т.к. зависимость /3/ далее постулируется, т.е. рассматривается некоторая идеализация.

Для дальнейшего обсуждения существенно рассматривать финитное движение квазичастицы. Поэтому вводится условие бесконечно глубокой потенциальной ямы, а значит, волновая функция ψ аннулируется на поверхности Σ эллипсоида M. Другими словами, рассматривается достаточно большой, но конечный кусок кристалла и такое движение частицы, при котором она не достигает его поверхности Σ. /Если в качестве квазичастицы рассмотреть, например, магнон в магнитном кристалле, то очевидно, что такая частица существует только внутри кристалла/.

Согласно квантовомеханическому формализму фон Неймана, гильбертово пространство состояний H системы можно отождествить с $L_2(M)$ совокупностью всех интегрируемых с квадратом функций $\psi(x)$, определенных на M, $x \in M$. Далее определим операторы, отвечающие энергии и квадрату импульса частицы. По известной теореме фон Неймана проекции на оси координат оператора импульса в квантовой механике определяются по существу однозначно, с точностью до унитарной эквивалентности, как операторы дифференцирования по соответствующим переменным $\vec{p} = -i\hbar(\partial/\partial x_1, \partial/\partial x_2, \partial/\partial x_3)$. При помощи этих выражений, используя принцип соответствия с классической механикой, обычно строятся дифференциальные выражения для других операторов квантовой системы, например, энергии и квадрату импульса частицы отвечают соответственно выражения /с точностью до константы/:

$$\hat{E} \approx \sum_{i=1}^{3} 1/2m_i^* \, \partial^2/\partial x_i^2 \,, \qquad /5/$$

$$\hat{p}^2 \approx \sum_{i=1}^{3} \partial^2/\partial x_i^2 \,. \qquad /6/$$

/Выражение /5/ можно получить также из уравнения Шредингера, отвечающего движению квазичастицы для малых $\vec{p}$ /см. обсуждение формулы /128.1.5/ в [2] /.

Рассмотрим совокупность $C^\infty(M)$ функций ψ, бесконечно дифференцируемых в M и равных нулю на границе Σ области M. Пользуясь этим, а также интегрированием по частям, можно показать, как это обычно делается в квантовой механике, что операторы $\hat{E}$ и $\hat{p}^2$, определенные на совокупности $C^\infty(M)$ выражениями /5/ и /6/, являются симметрическими /эрмитовыми/, т.е. удовлетворяется равенство /1/. Легко видеть, что $\hat{E}$ и $\hat{p}^2$ не являются самосопряженными операторами, так как области определения $D(\hat{E}^*)$ и $D(\hat{p}^{2*})$ сопряженных к ним операторов $\hat{E}^*$ и $\hat{p}^{2*}$ шире, чем $C^\infty(M)$. В $D(\hat{E}^*)$ и $D(\hat{p}^{2*})$ входят, например, и дважды дифференцируемые в обобщенном смысле на M функции, аннулирующиеся на Σ и квадратично интегрируемые вместе с производными до второго порядка включительно.

При математическом описании квантовомеханических величин интерес представляют условия, при которых дифференциальные выражения, отвечающие этим величинам, являются существенно самосопряженными операторами[x]. /Подробное обсуждение этого пункта см. в [3], гл. IX § 3.5/. Тогда этим физическим величинам отвечают единственные самосопряженные операторы, являющиеся расширениями соответствующих дифференциальных выражений /см. [3], там же/. Эта единственная возможность сопоставить самосопряженный оператор физической величине освобождает нас от необходимости выбирать с помощью дополнительных соображений одно из многих самосопряженных расширений операторов, способных представить величину в квантовомеханическом формализме фон Неймана /см. [4], гл. VI, §4.1, и [5] /.

В данном случае условие аннулирования волновой функции на Σ обеспечивает существенную самосопряженность операторов $\hat{E}$ и $\hat{p}^2$, заданных на $C^\infty(M)$ формулами /5/ и /6/. Это утверждение следует непосредственно из общих результатов [6], примененных к /5/, /6/, /теорема 25 гл. XIV /. Через $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$ обозначим самосопряженные операторы, отвечающие по фон Нейману энергии и квадрату импульса квазичастицы и получающиеся замыканием операторов $\hat{E}$ и $\hat{p}^2$ соответственно. Из этих же результатов [6] непосредственно следует также, что спектры операторов $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$ являются чисто дискретными, т.е. $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$ имеют полные системы собственных функций с интегрируемым квадратом.

После построения операторов $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$ обратимся к исследованию их перестановочности. Ясно, что операторы $\hat{E}$ и $\hat{p}^2$, определенные на $C^\infty(M)$, перестановочны в алгебраическом смысле:

$$\hat{E}\,\hat{p}^2 = \hat{p}^2\,\hat{E} \,. \qquad /7/$$

Такое утверждение не следует из общих соображений для их самосопряженных расширений $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$. Это так не только потому, что произведения операторов $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$, аналогичные произведениям $\hat{E}$ и $\hat{p}^2$ в /7/, могут не иметь смысла из-за расширений областей определения. Если принять более общее определение перестановочности[x], приспособленное к неограниченным само-

---

x/Оператор A называется существенно самосопряженным, если его замыкание $\bar{A}$ самосопряженный оператор. /Замыкание $\bar{A}$ определяется как замыкание множества пар $\{f, Af\}$ для $f \in D(A)$ /. Так как область $D(\bar{A})$ определения $\bar{A}$ шире $D(A)$, т.е. $D(\bar{A}) \supset D(A)$, говорят, что $\bar{A}$ есть расширение A (см [3]).

x/Использованное фон Нейманом в его формулировке квантовой механики.

сопряженным операторам, а именно: $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$ перестановочны, если их спектральные семейства перестановочны, то $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$ могут не быть перестановочными вопреки /7/. По-видимому, первый пример двух перестановочных симметрических операторов, не имеющих самосопряженных расширений, дан Нельсоном /7/. Покажем, что в данном случае имеется аналогичная ситуация, т.е. операторы $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$ не перестановочны. Для этого воспользуемся общим результатом Денчева /8/, дающим необходимые и достаточные условия для перестановочности самосопряженных расширений по Фридрихсу [x] одного класса эллиптических дифференциальных операторов. Примененный к нашему частному случаю, этот результат дает следующее. Расширения по Фридрихсу $\hat{E}_F$ и $\hat{p}_F^2$ операторов /5/ и /6/ /определенных на подмножестве $C_0^\infty(M)$, состоящем из функций, аннулирующихся не только на Σ, но и в некоторой граничной полосе, см. /8/ /, перестановочны тогда и только тогда, когда Σ имеет форму параллелепипеда со стенками, параллельными координатным плоскостям. Для областей определения $D(\hat{E}_F)$ и $D(\hat{p}_F^2)$ имеем [xx] /см /8/ /:

$$D(\hat{E}_F) \supset C^\infty(M), \quad D(\hat{p}_F^2) \supset C^\infty(M), \qquad /8/$$

т.е. $\hat{E}_F$ и $\hat{p}_F^2$ являются самосопряженными расширениями $\hat{E}$ и $\hat{p}^2$. В силу единственности самосопряженных расширений операторов /5/ и /6/ получаем $\hat{E}_F = \hat{E}_N$, $\hat{p}_N^2 = \hat{p}_F^2$, а также некоммутативность операторов $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$, соответствующих по фон Нейману энергии и квадрату квазиимпульса частицы, в случае, когда M - эллипсоид.

---

[x] По поводу определения этого специального типа самосопряженных расширений читатель отсылается, напр., к работе /3/. Ниже мы пользуемся только их свойством /8/.

[xx] Автор обязан д-ру физ.мат.наук Р.Денчеву за указание на соотношения /8/, необходимые для проведения доказательства.

3. *О совместимости и измерении квантовомеханических величин энергии и квадрата квазиимпульса частицы*

В квантовой механике, наряду с формально-математическим описанием наблюдаемых как конкретных операторов, возможно и другое их описание при помощи измерительных устройств и измерительных предписаний, используемых при их экспериментальном определении. В любой физической теории, отвечающей эксперименту, существуют такие "правила соответствия" между ее абстрактными символами и высказываниями и экспериментальными измерениями. Так, например, две квантовомеханические величины считаются совместимыми, если последовательность при их измерении не оказывает влияния на получающиеся результаты измерений /измерение каждой из величин в отдельности не изменяет результата последующего измерения другой величины/. В квантовомеханическом формализме фон Неймана совместимым величинам отвечают коммутирующие операторы. Совместимыми в смысле измерительных предписаний являются, например, две такие величины Q_1, Q_2, измеренные значения которых задаются двумя функциями от измеренных значений /рассматриваемых как аргументы/ других совместимых величин, $R_1, R_2, \dots, R_k$. Тогда процедура совместного измерения Q_1 и Q_2 состоит в измерении $R_1, \dots, R_k$ и последующем вычислении значений Q_1 и Q_2 /результаты не зависимы от порядка вычислений для Q_1 и Q_2 /. Так, например, в рассматриваемом в пункте 2 случае, чтобы измерить значения энергии и квадрата квазиимпульса частицы, можно поступить следующим образом. Измеряем значения $\vec{p}$ /т.е. p_1, p_2, p_3 / и вычисляем по формулам /3/ и /4/ значения искомых величин. Применимость /3/ и /4/ следует, например, из принципа соответствия с классической механикой. Осталось указать предписание для совместного измерения p_1, p_2, p_3. При этом для решения принципиального вопроса о совместимости измеряемых величин необязательно указывать на технические детали измерительной установки, обеспечивающие ту или иную точность измерения. Достаточно указать такое измерительное предписание, которое в принципе осуществимо, т.е. не противоречит теории.

В принципе, предписания для измерения квазиимпульса подобны измерениям импульса квантовомеханической частицы в вакууме, только теперь измерения делаются внутри кристалла. Три проекции p_1, p_2, p_3 квантовомеханического импульса, как известно, считаются совместно измеримыми величинами. Для этого, например, можно измерять среднее расстояние, проходимое частицей за некоторое время /см., например, обсуждение в[9], гл. 5 §1/, т.е. пользоваться формулой:

$$d\bar{x}_i / dt = \bar{p}_i / m_i \quad , \; i = 1, 2, 3, \qquad /9/$$

где $\bar{x}_i$, $i = 1, 2, 3$ - средние значения координат частицы /формула 9/ в силу /5/ заменят соответствующие соотношения - см.[2], /17,6/ - для $m_1^* = m_2^* = m_3^*$. При достаточно длинных расстояниях, проходимых частицей /для больших образцов идеального кристалла/, ошибки при измерениях можно сделать достаточно малыми /см.[9] /. /Другое измерительное предписание состоит в использовании законов сохранения импульса при упругом столкновении с пробной частицей с известным импульсом. При этом, в силу конечности кристалла, нужно либо учитывать его отдачу, либо пренебрегать ею, считая ее величину меньшей - для достаточно больших кристаллических образцов,- чем другие экспериментальные ошибки/.

Нужно заметить, что предписания для измерения энергии и квадрата квазиимпульса не зависят от геометрической формы поверхности. Таким образом получается, что энергия и квадрат квазиимпульса частицы с точки зрения измерительных процедур являются совместимыми величинами, тогда как им отвечают в случае специально выбранной формы Σ некоммутирующие самосопряженные операторы. Конечно, настоящее рассмотрение как целое не означает несогласованности с математическим формализмом квантовой механики. Обсуждение указывает только на то, что описанный частный способ сопоставления физическим величинам самосопряженных расширений операторов может не соответствовать физическому пониманию о совместимости этих величин в терминах измерительных предписаний.

Отметим, что полученное заключение базируется на физически естественном предположении о том, что в области определения $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$ входит множество $C^\infty(M)$, а также о том, что на $C^\infty(M)$ расширения $\hat{E}_N$ и $\hat{p}_N^2$ задаются дифференциальными выражениями /5/, /6/. Априори не исключено и другое /“необычное“/ операторное представление[x] величин E и $\vec{p}^{\,2}$, для которого указанное заключение может не иметь места.

Отметим также, что обсуждение п.3, строго говоря, выходит за рамки неймановской /математической/ аксиоматики квантовой механики, т.к. использует /неформализованное на ее языке/ понятие об измерительном предписании.

Автор обязан Р.Денчеву и Д.Пушкарову за некоторые обсуждения и замечания.

Литература

1. *Й. фон Нейман. Математические основы квантовой механики. М., “Наука“, 1964.*
2. *А.Давыдов. Квантовая механика, М., Физматгиз, 1963.*
3. *С.М.Б., Функциональный анализ /под ред. С.Крейна/, М., “Наука“, 1972.*
4. *Т.Като. Теория возмущений линейных операторов, М., “Мир“, 1972.*
5. *А.Вайтман. Проблемы в релятивистской динамике квантованных полей, М., “Наука“, 1969.*

---

[x] Например, в пространстве, различном от $L_2(M)$, или в $L_2(M)$, но другими операторами; квантовую механику можно рассматривать как конкретное операторное представление абстрактных символов /“наблюдаемых“/, подчиняющихся определенным перестановочным соотношениям.

6. *Н.Данфорд, Дж.Шварц. Линейные операторы. часть* II *, М., "Мир", 1966.*
7. *Е.Нельсон. Сб. переводов "Математика", 6:3, 89 /1962/.*
8. *Р.Денчев. Математический сборник, т.84, /126/, №3, 369 /1971/.*
9. *Р.Фейнман, Хиббс. Квантовая механика и интегралы по траекториям, М., "Мир", 1968.*

Рукопись поступила в издательский отдел 23 декабря 1975 года.