

Как понимать квантовую механику

(версия $\beta 003$)

М. Г. Иванов¹

21 июля 2011 г.

¹e-mail: mg@mi.ras.ru

Аннотация

Данное пособие призвано дать студентам, начинающим изучать стандартный курс квантовой механики представление о математическом аппарате квантовой теории и о физическом смысле вводимых понятий. Цель пособия — не просто дать сводку основных формул, но и научить читателя понимать, что эти формулы означают.

Особое внимание уделено обсуждению места квантовой механики в современной научной картине мира, её смыслу (физическому, математическому, философскому) и интерпретациям.

— **Не может быть!** — воскликнула Алиса. — Я этому поверить не могу!

— Не можешь? — повторила Королева с жалостью. — Попробуй еще раз: вздохни глубже и закрой глаза.

Алиса рассмеялась.

— Это не поможет! — сказала она. — Нельзя **поверить** в невозможное!

— Просто у тебя мало опыта, — заметила Королева. — В твоём возрасте я уделяла этому полчаса каждый день! В иные дни я успевала поверить в десяток невозможностей до завтрака!

Льюис Кэрролл, «Сквозь зеркало и что там увидела Алиса, или Алиса в Зазеркалье» (Пер. Н. М. Демуровой)^a

^aИнтересны выходные данные книги: Льюис Кэрролл. «Приключения Алисы в стране чудес. Сквозь зеркало и что там увидела Алиса, или Алиса в зазеркалье», М., «Наука», Главная редакция физико-математической литературы, 1991.

Оглавление

Как читать эту книгу и откуда она взялась	12
0.1 Благодарности	13
0.2 О распространении данной книги	14
1 Место квантовой теории в картине мира (фф)	15
1.1 Вглубь вещества	15
1.1.1 Частицы и поля	16
1.1.2 Как устроены взаимодействия	17
1.1.3 Статистическая физика и квантовая теория	18
1.1.4 Фундаментальные фермионы	19
1.1.5 Фундаментальные взаимодействия	20
Гравитационное взаимодействие	20
Электромагнитное взаимодействие	21
Слабое взаимодействие	22
Сильное взаимодействие	23
1.1.6 Адроны	24
1.1.7 Лептоны	25
1.1.8 Поле Хиггса и бозон Хиггса (*)	26
Бозон Хиггса и пресса	27
1.1.9 Вакуум (*)	28
1.2 Откуда пошла квантовая теория	30
1.3 Квантовая механика и сложные системы	30
1.3.1 Феноменология и квантовая теория	31
1.3.2 Макроскопические квантовые явления	31
Сверхтекучесть и сверхпроводимость	32
1.3.3 Вымораживание степеней свободы	33
2 От классики к квантовой физике	35
2.1 «Здравый смысл» и квантовая механика	35
2.2 Квантовая механика — теория превращений	36
2.3 Две ипостаси квантовой теории	37
2.3.1 Когда наблюдатель отвернулся...	38
2.3.2 На наших глазах...	38
2.4 Принцип соответствия (ф)	39
2.5 Несколько слов о классической механике (ф)	41
2.5.1 Вероятностная природа классической механики (ф)	41
2.5.2 Ересь аналитического детерминизма и теория возмущений (ф)	42
2.6 Теоретическая механика классическая и квантовая (ф)	43

2.7	Несколько слов об оптике (Φ)	44
2.7.1	Механика и оптика геометрическая и волновая (Φ)	44
2.7.2	Комплексная амплитуда в оптике и число фотонов (Φ^*)	46
2.7.3	Преобразование Фурье и соотношения неопределённостей	47
2.7.4	Микроскоп Гайзенберга и соотношение неопределённостей	49
3	Понятийные основы квантовой теории	50
3.1	Вероятности и амплитуды вероятности	50
3.1.1	Сложение вероятностей и амплитуд	51
3.1.2	Умножение вероятностей и амплитуд	53
3.1.3	Объединение независимых подсистем	53
3.1.4	Распределения вероятностей и волновые функции	53
	Классический случай	54
	Квантовый случай	55
	Измерение и проектор	55
3.1.5	Амплитуда при измерении и скалярное произведение	56
3.2	Возможно всё, что может произойти (Φ^*)	58
3.2.1	Большое в малом (Φ^*)	61
4	Математические понятия квантовой теории	63
4.1	Пространство волновых функций	63
4.1.1	Функцией каких переменных является волновая функция?	63
4.1.2	Волновая функция как вектор состояния	66
4.2	Матрицы (λ)	67
4.3	Дираковские обозначения	71
4.3.1	Основные «строительные блоки» дираковских обозначений	71
4.3.2	Комбинации основных блоков и их значение	72
4.3.3	Эрмитово сопряжение	73
4.4	Умножение справа, слева, ... сверху, снизу и наискосок**	74
4.4.1	Диаграммные обозначения*	75
4.4.2	Тензорные обозначения в квантовой механике*	76
4.4.3	Дираковские обозначения для сложных систем*	76
4.4.4	Сравнение разных обозначений*	77
4.5	Смысл скалярного произведения	79
4.5.1	Нормировка волновых функций на единицу	79
4.5.2	Физический смысл скалярного квадрата. Нормировка на вероятность	80
4.5.3	Физический смысл скалярного произведения	81
4.6	Базисы в пространстве состояний	82
4.6.1	Разложение по базису в пространстве состояний, нормировка базисных векторов	82
4.6.2	Природа состояний непрерывного спектра*	83
4.6.3	Замена базиса	85
	Замена базиса и унитарные операторы*	85
	Преобразование Фурье	86
	Другое преобразование Фурье*	87
4.7	Операторы	88
4.7.1	Ядро оператора*	89
4.7.2	Матричный элемент оператора	89

4.7.3	Базис собственных состояний	90
4.7.4	Векторы и их компоненты**	90
4.7.5	Среднее от оператора	91
4.7.6	Разложение оператора по базису	91
4.7.7	Области определения операторов в бесконечномерии*	92
4.7.8	След оператора*	93
	Частичный след оператора*	95
4.8	Матрица плотности*	96
4.8.1	Роль и смысл матрицы плотности*	97
4.8.2	Матрица плотности для подсистемы*	98
4.9	Наблюдаемые*	99
4.9.1	Квантовые наблюдаемые*	100
4.9.2	Классические наблюдаемые**	101
4.9.3	Вещественность наблюдаемых***	102
4.10	Операторы координаты и импульса	104
	Задача о неправильном коммутаторе	105
4.11	Вариационный принцип	105
4.11.1	Вариационный принцип и уравнения Шрёдингера**	105
4.11.2	Вариационный принцип и основное состояние	107
4.11.3	Вариационный принцип и возбуждённые состояния*	107
5	Принципы квантовой механики	108
5.1	Квантовая механика замкнутой системы	108
5.1.1	Унитарная эволюция и сохранение вероятности	108
5.1.2	Унитарная эволюция матрицы плотности*	110
5.1.3	(Не)унитарная эволюция*****	111
5.1.4	Уравнение Шрёдингера и гамильтониан	111
5.1.5	Уравнения Шрёдингера, временные и стационарные	113
5.2	Разные представления временной эволюции	114
5.2.1	Унитарная эволюция: активная, или пассивная*	114
5.2.2	Пространство состояний в разные моменты времени*	115
5.2.3	Представления Шрёдингера, Гайзенберга и взаимодействия	115
5.2.4	Функции от операторов в разных представлениях	117
5.2.5	Гамильтониан в представлении Гайзенберга	117
5.2.6	Уравнение Гайзенберга	117
	Полные и частные производные от операторов по времени	118
	Интегралы движения	118
	Правило Лейбница и коммутатор*	119
	Пример: Эволюция волнового пакета для свободной частицы	119
5.2.7	Скобка Пуассона и коммутатор*	120
5.2.8	Чистые и смешанные состояния в теоретической механике*	121
5.2.9	Представления Гамильтона и Лиувилля в теоретической механике**	122
5.2.10	Уравнения в представлении взаимодействия*	124
5.3	Измерение	124
5.3.1	Проекционный постулат	125
	Невырожденный дискретный спектр	126
	Вырожденный дискретный спектр	127
	Непрерывный спектр	127

Проекторнозначная мера**	128
5.3.2 Селективное и неселективное измерение*	130
5.3.3 Приготовление состояния	131
6 Одномерные квантовые системы	132
6.1 Структура спектра	132
6.1.1 Откуда берётся спектр?	132
6.1.2 Вещественность собственных функций	133
6.1.3 Структура спектра и асимптотика потенциала	133
6.1.4 Прямоугольная яма	135
Число уровней	138
Глубокие уровни*	138
Предел мелкой ямы*	138
δ -яма как мелкая яма*	139
6.1.5 δ -яма	139
Задача: Об условии сшивки в точке δ -ямы**	140
6.1.6 Существование уровня в мелкой яме	140
6.2 Осцилляторная теорема	141
6.2.1 Об области применимости теоремы*	142
6.2.2 Нули основного состояния*	143
Случай периодических граничных условий**	143
6.2.3 Вронскиан ($\mathcal{L}^*$)	144
6.2.4 Рост числа нулей с номером уровня*	144
6.2.5 Сокращение числа нулей*	145
6.2.6 Завершение доказательства*	146
6.3 Одномерная задача рассеяния	147
6.3.1 Постановка задачи	147
6.3.2 Пример: рассеяние на ступеньке	148
6.3.3 Пример: рассеяние на δ -яме	149
6.3.4 Общие свойства одномерного рассеяния	150
Разрешимость задачи	150
Сохранение вероятности*	150
6.3.5 Рассеяние слева направо и справа налево**	151
6.3.6 Волновые пакеты	152
Свободный волновой пакет	153
Рассеяние волнового пакета*	154
Пример: задержка волновых пакетов рассеянных ступенькой*	156
Пример: задержка волновых пакетов рассеянных δ -ямой*	157
6.3.7 Резонансное рассеяние*	157
7 Эффекты теории измерений	159
7.1 Классическая (колмогоровская) вероятность ($\mathcal{L}^*$)	159
7.1.1 Определение вероятностного пространства**	160
7.1.2 Смысл вероятностного пространства*	160
7.1.3 Усреднение (интегрирование) по мере*	160
7.1.4 Вероятностные пространства в квантовой механике ($\mathcal{F}^*$)	161
7.2 Соотношения неопределённостей	162
7.2.1 Соотношения неопределённостей и (анти)коммутаторы	162
7.2.2 Так что же мы посчитали? ($\mathcal{F}$)	163

7.2.3	Когерентные состояния	163
	Наводящие соображения*	163
	Уравнение когерентных состояний	164
7.2.4	Соотношения неопределённости время-энергия	165
	Так что же мы посчитали? (ф)	166
	Если система не является часами (ф)	167
	Время жизни и ширина уровня (ф)	167
	Длительность измерения и точность определения энергии (ф)	168
7.3	Измерение без взаимодействия*	169
7.3.1	Эксперимент Пенроуза с бомбами (ф*)	170
7.4	Квантовый эффект Зенона (Парадокс незакипающего чайника)**	172
7.4.1	При чём здесь Зенон?	172
7.4.2	Теорема Халфина	175
7.5	Квантовая (не)локальность	176
7.5.1	Запутанные состояния (ф*)	176
7.5.2	Зацепленные состояния при селективном измерении (ф*)	177
7.5.3	Зацепленные состояния при неселективном измерении (ф*)	179
7.5.4	Классические измерения (ф*)	179
7.5.5	Относительные состояния (ф*)	180
7.5.6	Неравенство Белла и его нарушение (ф**)	183
	История неравенства Белла	183
	Вывод неравенства Белла	183
	Смысл неравенства Белла	184
	Неравенство Белла и скрытые параметры	184
	Корреляции для спинов*	185
	Нарушение неравенства Белла в квантовой механике	186
	Нарушение неравенства Белла на эксперименте	187
7.6	Теорема о невозможности клонирования**	187
7.6.1	Смысл невозможности клонирования (ф*)	189
	Неизмеримость волновой функции (ф*)	189
	Невозможность квантовой телепатии (ф*)	190
	Другое доказательство невозможности клонирования (ф*)	191
7.7	Квантовая телепортация**	191
8	Место теории измерений	195
8.1	Моделирование измерительного прибора*	195
8.1.1	Измерительный прибор по фон Нейману**	196
8.2	Возможна ли иная теория измерений? (фф)	199
8.2.1	Эвереттовский «вывод» теории измерений (фф*)	199
8.2.2	«Жёсткость» формулы для вероятностей (фф)	201
8.2.3	Теорема о квантовой телепатии (фф*)	202
8.2.4	«Мягкость» проекционного постулата (фф)	203
8.3	Декогеренция (фф)	204
9	На грани физики и философии (фф*)	205
9.1	Загадки и парадоксы квантовой механики (ф*)	205
9.1.1	Мышь Эйнштейна (ф*)	206
9.1.2	Кот Шрёдингера (ф*)	206
9.1.3	Друг Вигнера (ф*)	209

9.2	Как неправильно понимать квантовую механику? (фф)	211
9.2.1	Частица как волновой пакет (фф)	211
9.2.2	«Теория» квантового заговора (фф)	212
	Квантовый заговор и эксперимент с отложенным выбором (фф)	212
	Квантовый заговор и «социология материи» (фф)	213
9.2.3	«Смерть реальности» и парадокс ЭПР(фф)	214
9.3	Интерпретации квантовой механики (ф)	216
9.3.1	Статистические интерпретации (ф)	216
9.3.2	Копенгагенская интерпретация. Разумное самоограничение (ф)	217
	«Старая копенгагенская» интерпретация (ф)	217
	«Новая копенгагенская» интерпретация (ф)	218
9.3.3	Квантовые теории со скрытыми параметрами (фф)	219
9.3.4	Принцип дополнительности Бора (фф)	220
9.3.5	За гранью копенгагенской интерпретации (фф)	222
9.3.6	«Абстрактное Я» фон Неймана (фф)	223
9.3.7	Многомировая интерпретация Эверетта (фф)	224
	Чем (не)удобна многомировая интерпретация (фф)	225
	Многомировая интерпретация и антропный принцип (фф)	226
9.3.8	Сознание и квантовая теория (фф)	227
9.3.9	Активное сознание (фф*)	230
10	Квантовая информатика**	231
10.1	Квантовая криптография**	231
10.1.1	Зачем нужен ключ в классической криптографии (пример)	231
10.1.2	Квантовая генерация ключей	232
10.1.3	Квантовая линия связи	233
10.2	Квантовые компьютеры как аналоговые (ф)	233
10.3	Квантовые компьютеры как цифровые (ф)	234
10.4	Понятие универсального квантового компьютера	234
10.5	Квантовый параллелизм	235
10.6	Логика и вычисления	236
10.6.1	Логика классическая	236
10.6.2	Вычисления и необратимость	237
10.6.3	Обратимые классические вычисления	237
10.6.4	Обратимые вычисления	237
10.6.5	Вентили сугубо квантовые	238
10.6.6	Обратимость и уборка «мусора»	238
11	Симметрии-1 (теорема Нётер)	240
11.1	Что такое симметрия в квантовой механике	240
11.2	Преобразования операторов «вместе» и «вместо»	241
11.2.1	Непрерывные преобразования операторов и коммутаторы	242
11.3	Непрерывные симметрии и законы сохранения	242
11.3.1	Сохранение единичного оператора	243
11.3.2	Обобщённый импульс	244
11.3.3	Обобщённая координата*	246
	Свёртка и её физический смысл для потенциала и состояния	247
11.4	Законы сохранения для ранее дискретных симметрий	247
11.4.1	Зеркальная симметрия и не только	248

11.4.2 Чётность*	250
11.4.3 Квазиимпульс*	250
12 Гармонический осциллятор	253
12.0.4 Обезразмеривание	253
12.1 Представление чисел заполнения	255
12.1.1 Лестничные операторы	255
12.1.2 Базис собственных функций	258
12.2 Переход к координатному представлению	259
12.3 Пример расчётов в представлении чисел заполнения*	263
12.4 Симметрии гармонического осциллятора	264
12.4.1 Зеркальная симметрия	264
12.4.2 Фурье-симметрия и переход от координатного представления к импульсному и обратно**	264
12.4.3 Вращение фазовой плоскости	266
12.5 Представление Гайзенберга для осциллятора	267
12.5.1 Интегрирование уравнения Гайзенберга	267
12.5.2 Роль эквидистантности уровней*	268
12.6 Когерентные состояния гармонического осциллятора*	268
12.6.1 Временная эволюция когерентного состояния*	269
12.6.2 Когерентные состояния в представлении чисел заполнения**	270
12.7 Сжатые состояния**	271
12.8 Классический предел*	272
12.9 Квантованные поля (ϕ^*)	273
12.9.1 Классический предел ($\phi\phi^*$)	275
13 Переход от квантовой механики к классической	276
13.1 Волны де Бройля. Фазовая и групповая скорость	276
13.2 Что такое функция от операторов?	277
13.2.1 Степенные ряды и полиномы коммутирующих аргументов	278
13.2.2 Функции одновременно диагонализующих операторов	278
13.2.3 Функции некоммутирующих аргументов	279
13.2.4 Производная по операторному аргументу	280
13.3 Теорема Эренфеста	282
13.3.1 Отличие от классического случая*	283
13.4 Теорема Геллмана-Фейнмана	284
13.5 Квазиклассическое приближение	285
13.5.1 Как угадать квазиклассическую волновую функцию	285
13.5.2 Как вывести квазиклассическую волновую функцию	286
13.5.3 Квазиклассическая волновая функция у точки поворота	288
Фаза волновой функции у точки поворота*	289
13.5.4 Квазиклассическое квантование	290
13.5.5 Спектральная плотность квазиклассического спектра	291
13.5.6 Квазистационарные состояния в квазиклассике	292
13.5.7 Квазиклассическая вероятность туннелирования	294
13.5.8 Несколько слов об инстантонах**	295
13.6 Сохранение вероятности и уравнение непрерывности	296
13.6.1 Как угадать плотность потока вероятности	297
13.6.2 Многочастичный случай	298

13.6.3	Поток вероятности в присутствии электромагнитного поля*	298
13.6.4	Почему координатное представление?***	299
13.7	От матрицы плотности к плотности вероятности**	300
14	Симметрии-2* (группы и представления)	302
14.1	Группы и их представления (л)	302
14.2	Группы (л)	302
14.2.1	Определение и смысл (л)	302
14.2.2	Коммутативность и некоммутативность (л)	304
14.2.3	Подгруппы (л)	304
14.2.4	Конечные группы (л)	306
14.2.5	Стандартные матричные группы (л)	307
14.3	«Симметрии-1» и «Симметрии-2». В чём различие?*	308
14.3.1	Однопараметрические группы*	308
14.3.2	Группы и алгебры Ли*	309
14.4	Представления групп (л)	311
14.4.1	Существование*	311
14.4.2	Приводимость и инвариантные подпространства (л)	311
14.4.3	Разложение представления в сумму неприводимых (л)	312
14.4.4	Умножение представлений (лф*)	313
15	Вращения и моменты	315
15.1	Группа вращений	315
15.1.1	Что такое поворот (л)	315
	Вращения собственные и несобственные (л)	315
	Топология вращений (л)	316
	Генераторы вращений (л)	316
15.1.2	Квантовые вращения**	318
15.2	Представления вращений	319
15.2.1	Орбитальные моменты	320
	Сферические координаты	321
15.2.2	Спектр оператора $\hat{j}_z$	322
15.2.3	Операторы $\hat{j}_{\pm}$	323
15.2.4	Собственные векторы операторов $\hat{j}_z, \hat{j}^2$	323
15.2.5	Орбитальные и спиновые моменты	326
15.2.6	Коммутаторы моментов импульса	326
	Скаляры	327
	Векторы	327
15.2.7	Лестничные операторы для осциллятора $\hat{a}^{\pm}$ и момента импульса $\hat{j}_{\pm}$ **	328
15.3	Спин $\frac{1}{2}$	329
15.3.1	Матрицы Паули	330
15.3.2	Кватернионы**	332
15.3.3	Геометрия чистых состояний кубита**	333
15.3.4	Геометрия смешанных состояний кубита**	334
15.4	Спин 1	335
15.4.1	Вращения для спина 1 и для векторов	336
15.4.2	Спин и поляризация фотона	336
15.5	Сложение моментов*	337

15.5.1	Сложение спинов $\frac{1}{2} + \frac{1}{2}$	339
15.5.2	Чётность при сложении двух одинаковых спинов	340
	Тождественные частицы	342
15.5.3	Сложение моментов $j + \frac{1}{2}$	342
15.5.4	Сложение моментов $1 + 1$	343
16	Задача двух тел	345
16.1	Законы сохранения	345
16.2	Сведение к задаче одного тела	346
16.3	Сведение к задаче о радиальном движении	348
16.3.1	Асимптотика $r \rightarrow 0$	350
16.3.2	Асимптотика $r \rightarrow \infty$	351
	Случай неограниченного потенциала	352
16.4	Атом водорода	352
16.4.1	Кулоновские и атомные единицы	353
16.4.2	Решение безразмерного уравнения	354
16.4.3	Атом водорода в «старой квантовой механике»*	355
17	Квантовая и классическая история (ффф)	357
17.1	Предварительные извинения	357
17.2	Сослагательное наклонение в истории	357
17.2.1	Классическая неустойчивая динамика	357
17.2.2	Квантовая многомировая история	358
17.2.3	Квантовая история и сознание	360
17.3	Неопределённое ближайшее будущее	361
17.3.1	Приближение бифуркации	361
17.3.2	Перестройка спектра состояний	362
17.4	Пост-какое-то общество	362
17.4.1	Постсельское общество	362
17.4.2	Постиндустриальное общество	364
17.4.3	Структура перехода	365
17.5	Школоцентризм	366
17.6	Заключительные извинения	368
	Предметный указатель	369

Как читать эту книгу и откуда она взялась

На свете есть столь серьезные вещи, что говорить о них можно только шутя.

Нильс Бор W



Рис. 1: Сами создатели квантовой механики были людьми нескучными. Нильс Бор демонстрирует Вольфгангу Паули волчок «ТИП-ТОП». [Из книги Д.С. Данин, «Нильс Бор», М. «Молодая гвардия», 1978 (серия ЖЗЛ).]

Первоначально автор хотел просто собрать своё изложение возникающих в квантовой механике вопросов, которые можно понять, но понимание которых требует отказа от ряда классических (доквантовых) предрассудков, прочно ассоциируемых со *здравым смыслом*.

Многие задачи, разбираемые на семинарах по квантовой механике, являются на самом деле важными теоретическими вопросами, поэтому данная книга постепенно становится учебником по квантовой механике. Станет ли она когда-либо законченным учебником не знает никто, включая автора. На данный момент книга полностью покрывает программу первого семестра стандартного годового курса квантовой механики, читаемого студентам Московского физико-технического института (МФТИ), и некоторые темы второго семестра, а также содержит обсуждение ряда вопросов выходящих за пределы программы, но представляющих интерес для любознательного читателя.

Как любой учебник, претендующий на фундаментальность, этот текст содержит разделы, которые не нужны студенту, чья цель — сдать экзамен и забыть о квантовой механике как о страшном сне. Поэтому различные разделы книги имеют разный статус, который отражается в их заголовках:

- Разделы заголовки которых кончаются на «(Ф)» — «философические», в них мало формул и много слов, обсуждающих физический и/или философский смысл квантовой механики в целом, или отдельных её разделов. Эти разделы могут быть полезны с точки зрения понимания. Читатель, не знающий и не желающий знать, как в квантовой механике делаются конкретные вычисления, может ограничиться этими разделами. Наиболее «философические» разделы, т.е. те, где рассуждения наиболее шатки и наименее проверяемы опытом, помечены «(ФФ)». Философические разделы, в которых рассуждения подкрепляются формулами, пусть и не строгими, обозначаются как «(Ф*)»,

«(фф*)», «(ф**)» или «(фф**)» в зависимости от степени философичности и математичности. Все философические разделы можно пропускать при чтении, хотя такие пропуски (особенно для разделов с малым числом букв «ф») могут затруднить понимание материала.

- Разделы, помеченные звёздочкой «*», означают материал, который можно пропустить при первом чтении. Обычно в них содержится материал, уводящий в сторону от основного сюжета. Такой материал может также помещаться в сноски. На втором/третьем заходе с этими разделами лучше ознакомиться. Двумя звёздочками «**» помечены разделы, которые можно пропускать при любой степени проработки текста. Хотя, пропуская эти разделы, вы рискуете не узнать что-то такое, о чём большинство учебников умалчивает как об очевидных и/или бесполезных фактах. Звёздочкой в квадратных скобках [*] отмечаются некоторые необязательные при первом чтении формулы. Звёздочка также сопровождает ссылки на такие формулы.
- Разделы, заголовки которых кончаются на «(л)», — «ликбезовские». В них напоминает то, что вы, по идее должны бы знать. Даже если вы уверены, что и в самом деле это знаете, то возможно имеет смысл просмотреть такой раздел хотя бы по диагонали, чтобы вспомнить материал, понять в каком контексте его придётся применять далее, и какие обозначения будут использоваться.

Те же символы могут помечать не целые разделы, а отдельные абзацы.

Многие ссылки на оригинальные публикации автор не проверял лично, а списал из интернета (преимущественно из Википедии). Однако все (кроме особо оговоренных случаев) эпитафии списаны из тех самых книг, на которые идёт ссылка (иногда из электронных версий, а иногда из бумажных). Также все математические/физические выкладки и рассуждения автор проделал/проверил сам (с той или иной степенью строгости).

Фотографии и рисунки, взятые из Википедии (<http://ru.wikipedia.org/>) или Викисклада (<http://commons.wikimedia.org/>), помечены буквой «W» в конце подписи к рисунку, аналогично помечены эпитафии, проверенные по Википедии или Викицитатнику (<http://ru.wikiquote.org/>).

0.1 Благодарности

В написании книги автору помогали многие люди. Они указывали на ляпы и опечатки, давали советы и консультации по специальным вопросам, просто подтверждали нужность такой книги.

В первую очередь я хочу выразить глубокую благодарность за помощь и поддержку моим родителям: отцу Геннадию Васильевичу Иванову, благодаря которому я решил стать физиком (ещё до того, как понял, что это значит), и матери Валентине Михайловне Ивановой, которая первая заметила у меня страсть к преподаванию.

Из коллег в первую очередь я хочу выразить благодарность моему Учителю Игорю Васильевичу Воловичу, относящемуся к тем Учёным, кто видит в формулах не только математический и физический смыслы, но также философский смысл и педагогическое значение.

Хочу выразить благодарность всем сотрудникам Отдела математической физики Математического института им. В.А. Стеклова РАН, во главе с патриархом отдела и института Василием Сергеевичем Владимировым за плодотворную научную и человеческую атмосферу в которую я имел счастье погрузиться начиная с 5-го курса МФТИ.

Также хочу выразить благодарность всем сотрудникам кафедры теоретической физики МФТИ и особенно Н.Н. Пастушковой, за создание научно-педагогической и человеческой среды, которая вызвала появление этой книги.

Помощь советами, консультациями, дискуссиями и критикой мне оказали: И.В. Волович, Ю.М. Белоусов, В.И. Манько, Г.С. Ирошников, О.И. Толстихин, С.В. Козырев. Дали развёрнутые дружески-критические отзывы: Л.А. Моргун, С. Петренко, С. Шушкевич. Прочитали бета-версию и объяснили, что такая книга непременно нужна и должна быть издана *не смотря на* (или, наоборот, *по причине*) своего непривычного и личного стиля изложения В.Б. Гейшкенбейн, В.М. Вайнберг, Н.Г. Марчук. На ляпы и опечатки указали: М.А. Энтин, Г. Гимранов, А. Зыков, А. Зыкова, Волощук.

0.2 О распространении данной книги

Целью автора при написании данной книги является популяризация квантовой механики и обсуждение её основополагающих идей среди студентов, а также профессионалов и любителей науки.

Если человек читает книгу, чтобы разобраться в квантовой механике, то было бы странно брать с него за это деньги, наоборот, общество должно доплачивать за такие благородные побуждения. Такого рода доплата обычно называется «студенческая стипендия» или «зарплата» учёного/преподавателя. К сожалению, объём подобных выплат в современной России плохо соотносится с типичными ценами книг по квантовой механике (книга такого объёма обычно стоит от 500 руб.).

Автор обещает, что текущая стабильная версия книги на русском языке будет доступна для свободного скачивания (т.е. даром) с интернет-странички кафедры теоретической физики МФТИ (<http://theorphys.fizteh.ru/>), либо с другой интернет-странички. Автор не намерен брать на себя каких-либо обязательств (перед издателями, работодателями или кем-либо ещё), которые препятствовали бы этому.

В настоящее время достигнута договорённость об издании книги издательством «Регулярная и хаотическая динамика» (г. Ижевск), договор планируется подписать в августе 2011 г. В проекте договора специально оговорён свободный доступ к электронной версии книги на сайте кафедры теоретической физики МФТИ.

Обещания автора, касающиеся свободного доступа к электронному тексту книги, относятся только к русской версии.

М.Г. Иванов

P.S. Если вы получили книгу из какого-либо места, отличного от интернет-странички кафедры теоретической физики МФТИ (например с торрентов или на бумаге), проверьте, нет ли в разделе «библиотека» кафедральной интернет-странички более свежей версии (см. <http://theorphys.fizteh.ru/biblio/q-ivanov.html>).

Глава 1

Место квантовой теории в современной картине мира (фф)

Теоретическая физика достигла таких высот, что (мы) можем рассчитать даже то, что невозможно себе представить.

Л.Д. Ландау w

Квантовая теория возникла как фундаментальная теория микрообъектов. Однако, если эта теория действительно фундаментальна, то её область применимости должна быть шире. Насколько шире? Никто пока что не знает.

Но мы можем сказать, в каких разделах физики мы заведомо не можем обойтись без квантовой теории. Краткому популярному обзору этих заведомо квантовых разделов физики и их основных объектов мы и посвятим эту главу. О самой квантовой механике не будет сказано практически ничего.

Читать (или не читать) эту главу можно независимо от остальной книги, как научно-популярное введение, доступное для понимания любознательного школьника.

1.1 Вглубь вещества

Итак, большая часть вещества, с которым нам приходится иметь дело, состоит из *молекул и атомов*. Кроме молекул и атомов в повседневной жизни нам приходится сталкиваться только с *электромагнитным полем*.

Молекулы состоят из *атомов*.

Каждый отдельный *атом* состоит из *ядра* и некоторого количества *электронов* (e — электрический заряд равен -1 в единицах элементарного заряда).

Атомные ядра состоят из *протонов* (p — заряд $+1$) и *нейтронов* (n — заряд 0), которые «склеены» между собой с помощью *глюонов* (квантов сильного взаимодействия). Впрочем, пока мы не рассматриваем ядерные реакции, внутреннюю жизнь атомного ядра можно не учитывать.

Протоны и *нейтроны* состоят из u (заряд $\frac{2}{3}$) и d (заряд $-\frac{1}{3}$) *кварков* ($p= uud$, $n= udd$). Одиночных кварков не бывает. Они входят только в состав составных частиц с целым электрическим зарядом.

Кварки и электроны считаются истинно элементарными частицами: они ни из чего не состоят, но могут превращаться в другие частицы.¹

Этих частиц и кванта электромагнитного поля (*фотона*) достаточно для построения всего «обычного» вещества в земных условиях. Если нам нужны ещё и «обычные» ядерные реакции (чтобы зажечь Солнце), то понадобится ещё четвёртая частица ν_e — *электронное нейтрино*. Электронное нейтрино можно описать как электрон без электрического заряда (и это не просто шутка).

Перечисленные четыре частицы (u, d, ν_e , e) образуют *первое поколение* истинно элементарных фермионов, однако есть ещё второе и третье поколения, частицы которых аналогичны описанным частицам, но имеют большую массу (их можно рассматриваться как аналоги или возбуждённые состояния соответствующих частиц первого поколения). Каждому фундаментальному фермиону соответствует своя *античастица*.

1.1.1 Частицы и поля

В квантовой теории каждому полю соответствует частица–квант поля, а каждой частице соответствует поле.

Более того, даже если поле не является фундаментальным (например поле деформаций кристаллической решётки), ему тоже можно сопоставить квант — частицу или *квазичастицу* (например, квант деформации кристаллической решётки — *фонон*). Аналогично квазичастице или частице, которая не является фундаментальной, можно сопоставить поле.

Все кванты поля полностью лишены индивидуальности: мы в принципе не можем пронумеровать (квази)частицы одного сорта и отследить движение каждой из них. Состояния, отличающиеся друг от друга только перестановкой (квази)частиц одного сорта, необходимо считать одинаковыми.²

Частицы могут иметь внутренние степени свободы, которые не связаны с движением частицы как целого. Для составных частиц часть внутренних степеней свободы связана с их устройством из более фундаментальных компонент. Однако даже истинно элементарные частицы могут обладать внутренними степенями свободы. К внутренним степеням свободы можно отнести различные *заряды*,³ а также собственный момент импульса — *спин*. Состояние внутренних степеней свободы частицы может также называться *поляризацией*.

Момент импульса удобно измерять в постоянных Планка $\hbar$. Орбитальный момент импульса (связанный с движением частицы как целого) всегда равен целому числу (в единицах $\hbar$), но спин может быть как целым, так и полуцелым (т.е. кратен $\hbar/2$).

Частицы с полуцелым спином — *фермионы*. В каждом состоянии может быть не более одного фермиона (т.е. или один, или ноль).

¹Превращение одной частицы в несколько других могут называть распадом, но это не значит, что продукты распада присутствовали внутри исходной частицы. Правильнее считать, что продукты распада возникли в момент превращения.

²Эта обезличенность важна для физики. При обсуждении вычисления вероятностей в разделе 3.1 «Вероятности и амплитуды вероятности» тождественные и нетождественные состояния учитываются по-разному.

³Зарядами обычно называют сохраняющиеся величины, не зависящие от системы отсчёта, например, электрический заряд — это заряд. Энергия, импульс и момент импульса сохраняются но зависят от системы отсчёта и зарядами не считаются.

Истинно элементарные фермионы рассматриваются как «частицы вещества» и имеют спин $\frac{1}{2}$.

Частицы с целым спином — *бозоны*. Несколько бозонов могут одновременно находиться в одном состоянии. Более того, бозоны «любят» находиться в одном состоянии: если добавить к системе ещё один бозон, то при прочих равных условиях вероятность его появления выше в тех состояниях, где уже присутствует большее количество бозонов того же сорта.

Истинно элементарные бозоны рассматриваются как частицы–переносчики взаимодействий. Достоверно обнаруженные истинно элементарные бозоны имеют спин 1. Гипотетический гравитон должен иметь спин 2, а гипотетический бозон Хиггса — спин 0.



Рис. 1.1: Панорама ЦЕРНа (вид на запад). На снимке обозначено положение тоннелей ЛНС (длина 27 км.) и SPS (длина 7 км). Крестиками отмечена франко-швейцарская граница (снизу Швейцария). Предполагается, что на ЛНС удастся обнаружить бозон Хиггса.

[©CERN <http://cdsweb.cern.ch/record/39027>]

1.1.2 Как устроены взаимодействия

В квантовой теории каждому взаимодействию (*полю*) соответствует частица–переносчик взаимодействия (*квант поля*).

Все фундаментальные взаимодействия осуществляются локально посредством трёхчастичного взаимодействия⁴: некоторая частица испускает или поглощает квант поля (частицу–переносчик взаимодействия), при этом исходная частица может превратиться в другую частицу. Какая частица шла вперёд по времени, а какая назад здесь не очень важно: мы имеем либо одну частицу, превращающуюся в две, либо две превращающиеся в одну. Если частица «движется назад по времени», то её следует считать *античастицей*. Античастицы обычно обозначают теми же буквами, что и частицы с чертой, обозначающей комплексное сопряжение

⁴Могут также рассматриваться взаимодействия с иным число участников.

(например, $\bar{e}$ — антиэлектрон=позитрон). Впрочем, среди частиц бывают *истинно нейтральные*⁵, для них античастица совпадает с частицей.

Участвовать в том или ином взаимодействии (т.е. испускать вперёд или назад по времени квант соответствующего поля) может только частица, которая несёт соответствующий данному полю *источник* (в некоторых случаях в роли источника выступает *заряд*). Сами частицы–переносчики взаимодействия также могут нести некоторые источники (это свойственно нелинейным теориям).

В процессе взаимодействия частицы могут нарушать релятивистское соотношение между энергией E , импульсом $\mathbf{p}$ и массой m

$$(mc^2)^2 = E^2 - (c\mathbf{p})^2.$$

Такие «неправильные» частицы называются *виртуальными*. Они всегда являются промежуточными компонентами какого-то процесса, т.е. поймать их и зафиксировать экспериментально «противозаконное» поведение нельзя (если вы «поймаете» виртуальную частицу, то в процессе взаимодействия с прибором она превратится в обычную). Благодаря таким несообразностям две частицы могут обмениваться квантами поля и при этом притягиваться, хотя классическая интуиция говорит нам, что, перекидываясь мячиком, можно только отталкивать друг друга.

Привычное из классики понимание взаимодействия, как силы, действующей между частицами, связано именно с обменом виртуальными частицами.

Некоторые взаимодействия создают заметные силы только на столь малых расстояниях, что экспериментально измерить их *как силы* невозможно (таково *слабое взаимодействие*). Проявляются такие взаимодействия как законы превращения (рождения/поглощения) частиц. На *взаимодействия* правильнее смотреть не как на *силы*, а как на *превращения*. Это относится и к *фундаментальным взаимодействиям*, через которые могут быть выражены все остальные.

1.1.3 Статистическая физика и квантовая теория

К фундаментальной квантовой теории поля вплотную прилегает статистическая физика. И хотя одна из них имеет дело с фундаментальными полями, а другая с полями феноменологическими и/или эффективными, методы используются во многом одни и те же. Среда в равновесном состоянии рассматривается как некоторый аналог вакуума, на фоне которого бегают кванты возбуждений (кванты различных эффективных полей).

Даже при рассмотрении простейших статфизических систем, таких как излучение чёрного тела, квантовые эффекты играют принципиальную роль. В частности, квантовые ограничения точности определения физических величин позволили избавиться от ряда бесконечностей в статистической физике, связанных с бесконечным числом состояний и степеней свободы.

Сугубо квантовыми считаются более сложные и во многом чудесные явления, такие как сверхтекучесть, и сверхпроводимость. Однако любая попытка рассчитать «обыкновенные» свойства вещества исходя из первых принципов, не используя феноменологических подгоночных параметров, таких как длина свободного пробега или удельное сопротивление, неизбежно использует квантовую теорию.

⁵Всякая истинно нейтральная частица является электрически нейтральной, но обратное не верно. Например, нейтрон электрически нейтрален, но антинейтрон — другая частица.

1.1.4 Фундаментальные фермионы

Фундаментальные кирпичики, из которых строится вещество (истинно элементарные фермионы), не ограничиваются электронами и двумя кварками. Помимо привычного нам заряженного электрона надо добавить нейтрино — как электрон, только без заряда и почти без массы.⁶ Тогда мы получим четыре фундаментальных фермиона первого поколения.

Однако помимо первого поколения есть ещё два. Частицы второго и третьего поколения по всем свойствам аналогичны соответствующим частицам первого поколения, однако каждое следующее поколение тяжелее предыдущего. Частицы второго и третьего поколений (кроме, возможно, нейтрино) неустойчивы, как и всякие возбуждённые состояния, поскольку есть состояния с более низкой энергией (в первом поколении), в которые они могут «скатиться», излучив лишнюю энергию.

Каждому фундаментальному фермиону соответствует античастица с такой же массой. Все заряды антифермиона противоположны.

Приведём таблицу фундаментальных фермионов по зарядам и поколениям, а также таблицу их названий и масс:

		заряды			<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>
		электрический	барионный	лептонный			
кварки	верхние	+2/3	+1/3	0	<i>u</i>	<i>c</i>	<i>t</i>
	нижние	−1/3	+1/3	0	<i>d</i>	<i>s</i>	<i>b</i>
лептоны	нейтрино	0	0	+1	ν_e	ν_μ	ν_τ
	электроны	−1	0	+1	<i>e</i>	μ	τ

кварки				лептоны		
<i>u</i>	3МэВ	up	верхний	<i>e</i>	0,511МэВ	электрон
<i>d</i>	5МэВ	down	нижний	ν_e	< 2,2эВ	электронное нейтрино
<i>c</i>	1ГэВ	charm	очарованный	μ	105,7МэВ	мюон
<i>s</i>	0,1ГэВ	strange	странный	ν_μ	< 0,17МэВ	мюонное нейтрино
<i>t</i>	170ГэВ	top(true)	истинный	τ	1,777ГэВ	τ -лептон
<i>b</i>	4ГэВ	bottom(beauty)	красивый	ν_τ	< 15,5МэВ	τ -нейтрино

В качестве общей единицы для измерения массы, энергии и импульса в физике элементарных частиц, атомной и ядерной физике используют *электрон-вольт* (эВ): заряд электрона умноженный на 1В. Это, конечно, единица энергии, но если положить скорость света *c* равной 1, то единицы массы ($\frac{\text{эВ}}{c^2}$) и импульса ($\frac{\text{эВ}}{c}$) приобретают одинаковую размерность. Также мы используем производные единицы: 1кэВ=10³эВ, 1МэВ=10⁶эВ, 1ГэВ=10⁹эВ, 1ТэВ=10¹²эВ.

Типичные атомные уровни энергии составляют несколько эВ.

$$1\text{МэВ} = 10^6\text{эВ} \approx 2 \times (\text{масса электрона}),$$

$$1\text{ГэВ} = 1000\text{МэВ} \approx \frac{1\text{г}}{\text{число Авогадро}} \approx \text{масса протона} \approx \text{масса нейтрона} \approx$$

$$\approx \text{атомная единица массы} \approx \text{масса атома водорода} = 1,673 \times 10^{-24}\text{г}.$$

⁶ Долгое время считали, что нейтрино не имеет массы, однако экспериментальное обнаружение осцилляций нейтрино показало, что масса отлична от нуля, хотя и очень мала. Осцилляции нейтрино — превращение нейтрино разных поколений друг в друга при свободном движении. Такие превращения возможны только для массивных частиц, т.к. для безмассовых частиц (всегда летящих со скоростью света) собственное время стоит на месте.

1.1.5 Фундаментальные взаимодействия

Современная физика знает четыре фундаментальных взаимодействия, каждому из которых соответствуют свои частицы-переносчики:

- гравитационное — гравитон (спин 2),
- электромагнитное — фотон (спин 1),
- слабое — калибровочные W и Z бозоны (W^+ , W^- , Z , спин 1).
- сильное — глюон (спин 1).

Надо специально отметить, что фундаментальные взаимодействия в квантовой теории поля (КТП) не следует понимать, как нечто, вызывающее притягивание/отталкивание частиц на расстоянии. Такое притягивание/отталкивание — один из эффектов взаимодействия, не всегда важный (для слабого взаимодействия им обычно можно пренебречь). Взаимодействие в КТП — превращение одних частиц в другие (или такие же!) по определённым правилам (те самые трёхчастичные взаимодействия, которые упоминались выше). Такие превращения изображаются специальными графическими диаграммами, по которым можно рассчитать распад/превращение частиц, их притяжение/отталкивание и др. эффекты.

Гравитационное взаимодействие

В гравитационном взаимодействии участвуют все поля и частицы. Переносчик гравитационного поля гравитон не имеет массы и, как всякая безмассовая частица со спином, имеет две поляризации. Гравитон истинно нейтрален. В роли источника поля выступает энергия-импульс. Любая частица несёт энергию-импульс, и любая частица может испустить/поглотить гравитон (в том числе сам гравитон, что связано с нелинейностью теории).

Гравитон не имеет массы, благодаря чему он устойчив (его собственное время стоит на месте) и распространяется на большие расстояния. Виртуальные гравитоны обеспечивают медленно спадающее с расстоянием гравитационное притяжение (с медленно убывающим потенциалом $\sim -1/r$ и силой $\sim -1/r^2$). Реальные гравитоны образуют гравитационные волны.⁷

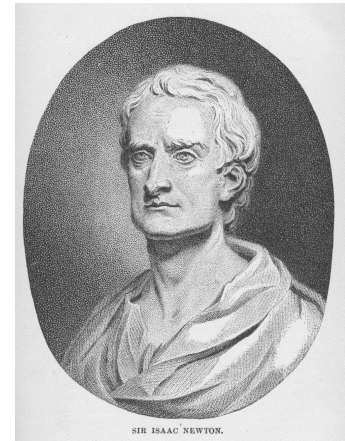


Рис. 1.2: Исаак Ньютон (1642–1727). [Сара Болтон. W]

⁷Гравитационные волны пока не удаётся детектировать, но их существование подтверждается астрономическими наблюдениями тесных двойных систем, в которых падение компонент друг на друга с большой точностью соответствует потере энергии на гравитационное излучение. Для детектирования гравитационных волн в настоящее время применяют интерферометры с большой (сотни метров или километры) длиной плеча и гравитационные антенны в виде массивной (несколько тонн) металлической болванки, охлаждённой до низкой температуры.



Рис. 1.3: Гравитационный телескоп (интерферометр Майкельсона, длина плеча=3км) VIRGO в Италии — вид на западную трубу от ворот комплекса. [Иван Сивцов. W]

Гравитационное взаимодействие является крайне слабым, однако, поскольку источники одного знака притягиваются друг к другу, возникают крупные гравитирующие объекты (галактики, звёзды, планеты), квазистатическое гравитационное поле которых легко обнаружимо (яблоки падают). Гравитационное взаимодействие сравнительно лёгких объектов детектировать намного сложнее. В частности, до сих пор законы гравитации (ньютоновской или эйнштейновской, в данном случае всё равно) плохо проверены на субмиллиметровом диапазоне расстояний.

Общепринятой классической (т.е. некантовой) теорией гравитационного поля является общая теория относительности («гравидинамика»), в пределе слабых полей и малых скоростей переходящая в ньютоновскую теорию всемирного тяготения («гравистатика»). На данный момент не существует общепринятого способа квантового описания гравитационного поля. Сложности с квантованием связаны с тем, что наилучшие классические теории гравитации описывают её через геометрию пространства-времени, тогда как большинство квантовых теорий рассматривает пространство-время как фиксированный фон, а не как динамическую систему. К счастью гравитационное взаимодействие — самое слабое, и во многих задачах им можно пренебречь или рассматривать его в качестве классического фона.

Остальные три взаимодействия весьма успешно описываются в рамках *стандартной модели* физики элементарных частиц.

Электромагнитное взаимодействие

В электромагнитном взаимодействии участвуют электрически заряженные частицы. Переносчик электромагнитного поля фотон не имеет массы, как всякая безмассовая частица со спином, имеет две поляризации. Фотон истинно нейтрален. Сами фотоны электрически не заряжены, но в очень сильных электромагнитных полях могут возникать нелинейные явления, когда фотоны рождают виртуальные электрон-позитронные пары, и уже виртуальный электрон испускает/поглощает новый фотон.

Фотон не имеет массы, благодаря чему он устойчив (его собственное время стоит на месте) и распространяется на большие расстояния. Виртуальные фотоны обеспечивают медленно спадающее с расстоянием электростатическое взаимодействие (с медленно убывающим потенциалом $\sim 1/r$ и силой $\sim 1/r^2$). Реальные фотоны образуют электромагнитные волны (радиоволны, тепловое (инфракрасное) излучение, видимый свет, ультрафиолет, рентгеновское излучение, гамма-излучение).



Рис. 1.4: Джеймс Клерк Максвелл (1831–1879). W

Хотя электромагнитное взаимодействие является более сильным, чем гравитационное электростатическое отталкивание зарядов одного знака и притяжение зарядов разных знаков приводит к тому, что заряды разных знаков перемешиваются и их суммарный заряд компенсируется (или почти компенсируется). Крупные тела всегда имеют электрический заряд близкий к нулевому (если сравнивать с суммарным зарядом всех частиц одного знака), и на больших расстояниях мы детектируем не электростатическое поле (плотность энергии падает $\sim 1/r^4$), а электромагнитное излучение (плотность энергии падает $\sim 1/r^2$).

Классическая теория электромагнитного поля — электродинамика Максвелла — была успешно проквантована, в результате была создана квантовая электродинамика (КЭД, QED) — самая разработанная и точно проверенная квантовая теория поля на сегодняшний день.

Поскольку окружающее нас вещество — связанные электромагнитным взаимодействием положительные и отрицательные электрические заряды, классическая и квантовая электродинамика составляет физическую основу химии и прочих наук о материалах.

Слабое взаимодействие

Слабое взаимодействие было открыто на примере β -распада ($n \rightarrow pW^- \rightarrow pe\bar{\nu}_e$). В слабом взаимодействии участвуют все фундаментальные фермионы. W и Z бозоны имеют массу и спин 1, соответственно каждый из них имеет по 3 поляризации. Z -бозон истинно нейтрален. W^+ и W^- являются античастицами по отношению к друг другу и несут заряд $+1$ и -1 соответственно. При испускании $W^\pm$ бозона фундаментальный фермион превращается в верхнего/нижнего партнёра стоящего в той же клеточке таблицы ($u \leftrightarrow d$, $e \leftrightarrow \nu_e$ и т.п.). Загадочность слабого взаимодействия в том, что оно единственное нарушает зеркальную CP симметрию (только из-за слабого взаимодействия античастицу можно отличить от зеркального отражения частицы).

W и Z бозоны имеют очень большую массу (80,4 ГэВ и 91,2 ГэВ, при том, что массы протона и нейтрона ~ 1 ГэВ). Без помощи ускорителей или космических частиц высокой энергии W и Z бозоны проявляются только как виртуальные частицы, существующие столь короткое время, что физики долго не замечали промежуточную стадию β -распада, и считали, что слабое взаимодействие является не трёхчастичным, а четырёхчастичным (первая модель слабого взаимодействия созданная Энрико Ферми в 1934 году). На больших (или даже ядерных) расстояниях слабое взаимодействие (за счёт обмена виртуальными W и Z бозонами) столь незначительно, что его невозможно детектировать, и взаимодействие проявляется только через превращения частиц. Характерное расстояние, на котором работает слабое взаимодействие, — 10^{-16} см (размер протона $\sim 10^{-13}$ см, размер атома $\sim 1 \text{ \AA} = 10^{-8}$ см).



Sheldon Glashow, Abdus Salam, and Steven Weinberg sharing the Nobel Prize, 1979

Рис. 1.5: Шелдон Глэшоу, Абдус Салам (1926–1996), Стивен Вайнберг

Слабое взаимодействие — единственное, которое позволяет детектировать нейтрино (нейтрино также участвует в гравитационном взаимодействии, но гравитационное взаимодействие для отдельного нейтрино слишком слабо).

Объединённая теория электромагнитного и слабого взаимодействий, описывающее их как проявления электрослабого взаимодействия, была создана около 1968 года Глэшоу, Саламом и Вайнбергом.

Сильное взаимодействие

В сильном взаимодействии участвуют только кварки и глюоны (сильное взаимодействие нелинейно), а также построенные из них составные частицы. Сильное взаимодействие удерживает кварки в адронах, а нуклоны (протоны и нейтроны) в атомных ядрах. Все истинно элементарные сильновзаимодействующие частицы несут специальный заряд — «цвет». В отличие от обычных зарядов, цвет трёхмерен. Все частицы, которые можно наблюдать в свободном состоянии, цвета не несут. Глюоны имеют спин 1 и не имеют массы, поэтому они имеют две спиновых поляризации, однако помимо спиновой поляризации они имеют ещё цветной заряд, из-за чего общее число поляризаций существенно больше. Сильное взаимодействие не имеет малого параметра, по которому можно было бы разлагать его в ряд (параметр есть, но он порядка 1), из-за чего что-либо аналитически посчитать в рамках квантовой хромодинамики (так называется теория сильного взаимодействия) очень сложно. Однако теоретические расчёты и численные вычисления убедительно подтверждают справедливость теории.

Хотя глюоны не имеют массы, нелинейные эффекты (то, что сами переносчики взаимодействия несут цветной заряд) приводит к тому, что глюоны, как и кварки, не могут вылетать из атомного ядра (*конфайнмент*). На сравнительно больших расстояниях (порядка размеров нуклона $\sim 10^{-13}$ см) глюоны образуют протяжённые конфигурации — *глюонные струны*, натяжение которых не зависит от длины. Таким образом, потенциальная энергия сильного взаимодействия для частиц соединённых глюонной струной растёт на «больших» ($\sim 10^{-13}$ см — размер нуклона) расстояниях линейно $\sim r$. Когда расстояние увеличивается настолько, что струне становится энергетически выгодным разорваться с образованием на новых концах пары кварк-антикварк, струна становится неустойчивой и рвётся. Каждая частица, образовавшаяся в результате такого распада, не несёт цветного заряда и имеет целый электрический заряд.

Адроны не несут цветного заряда, между ними не образуется глюонных струн, но действует остаточное сильное взаимодействие. Энергия остаточного сильного взаимодействия мала по сравнению с массами адронов, поэтому, например, масса ядра близка к сумме масс образующих его бесцветных нуклонов (протонов и нейтронов). Первая теория сильного межнуклонного взаимодействия созданная Хидэки Юкавой (1935 г.) описывала его через обмен массивными частицами промежуточной между электроном и протоном массы (пи-мезонами). Эффективный потенциал (потенциал Юкавы) для такой модели отличается от кулоновского потенциала экспоненциальным множителем $\sim \exp(-r/r_0)/r$ с характерным расстоянием порядка размера нуклона $r_0 \sim 10^{-13}$ см.

Внутри адронов (и, в частности, нуклонов) сильное взаимодействие намного



Рис. 1.6:
Хидэки Юкава
(1907–1981). W

сильнее: сумма масс всех входящих в адрон цветных кварков существенно меньше массы самой частицы. Недостающую массу можно рассматривать как массу глюонных струн скрепляющих кварки. На малых расстояниях кварки внутри адронов ведут себя практически как свободные частицы (*асимптотическая свобода*).

Квантовая теория сильного взаимодействия — *квантовая хромодинамика* (КХД, QCD) — постепенно сложилась, начиная с 1960-х годов, в процессе совместной работы и взаимодействия многих отечественных и иностранных физиков.

1.1.6 Адроны



Рис. 1.7: Джеймс Чедвик (1891–1974). W

Частицы, участвующие в сильном взаимодействии, называются *адронами*. Все адроны — составные частицы, поскольку свободных кварков на эксперименте не наблюдается.

Всем кваркам приписывается барионный заряд $+\frac{1}{3}$, а антикваркам — $-\frac{1}{3}$. Барионный и электрический заряды свободной частицы всегда целые.

Частицы с нулевым барионным зарядом — *мезоны*.

Частицы с положительным барионным зарядом — *барионы*, с отрицательным — *антибарионы*.

Суммарный барионный заряд сохраняется.

Пока не обнаружено какого-либо взаимодействия, источником для которого был бы барионный заряд. Не обнаружено и фундаментальных причин, по которым этот заряд был бы обязан сохраняться. Поэтому возможно его лучше называть просто *барионное число*.

Самые лёгкие барионы — это нуклоны (протон $p=uud$ — 938,2726 МэВ и нейтрон $n=udd$ — 939,565 МэВ).

Протон — ядро обычного (лёгкого) водорода. В химических реакциях часто появляется как положительный ион водорода H^+ . Нейтрон очень похож на протон, но не несёт электрического заряда. Нейтрон был открыт Дж. Чедвиком в 1932 году, после чего стало ясно, что атомное ядро состоит из протонов и нейтронов (до того думали, что ядро состоит из протонов и электронов).

Поскольку нейтрон тяжелее, чем протон и электрон вместе взятые, свободному (не входящему в атомное ядро) нейтрону энергетически выгодно развалиться на протон, электрон и электронное антинейтрино. При этом один из u -кварков превращается в d -кварк за счёт слабого взаимодействия. Процесс этот весьма медленный: время жизни свободного нейтрона 886 с (период полураспада — 614 с.).

Кварки скрепляются в адронах с помощью виртуальных глюонов. При этом взаимодействие столь сильно, что попытка вырвать из адрона отдельный кварк приводит к рождению пары кварк-антикварк, в результате чего снова получаются сложные частицы с целым барионным зарядом.

Известные на сегодняшний день мезоны состоят из пары кварк-антикварк, а барионы — из трёх кварков. Однако теория допускает существование и более сложных частиц, например, *пентакварк* должен состоять из четырёх кварков и одного антикварка, а *глюбол* вообще не должен содержать кварков, а только самодействующие глюоны.

1.1.7 Лептоны

Самый простой лептон — это электрон.⁸ Его заряд был измерен уже в 1911 году А.Ф. Иоффе (из-за задержки с публикацией раньше вышли результаты более поздней работы Р. Милликена 1912 года). Как свободно летящая элементарная частица на заре ядерной физики электрон также был известен как β -частица (поток бета-частиц — бета-лучи).

Заряженные лептоны — электрон (e), мюон (μ) и тау-лептон (τ) — можно считать тремя разновидностями электрона с различной массой (0,511МэВ, 105,658МэВ и 1777МэВ соответственно). Электрон стабилен (ему не во что распадаться, т.к. он самый лёгкий из заряженных частиц). Мюон и тау-лептон распадаются благодаря слабому взаимодействию (время жизни $2,19 \times 10^{-6}$ с и $2,9 \times 10^{-13}$ с).



Рис. 1.8: Абрам Фёдорович Иоффе (1880–1960). W

Благодаря тому, что мюон не очень тяжёл и распадается только посредством слабого взаимодействия, его время жизни сравнительно велико. За это время мюон может успеть притянуться к какому-либо атомному ядру и образовать мюонный атом. Поскольку мюон в двести раз тяжелее электрона, радиус его орбиты оказывается в 200 раз меньше орбиты электрона. Сидя на низкой орбите, мюон экранирует одну единицу заряда ядра, и для электронов ситуация выглядит так, будто атомное ядро временно (пока жив мюон) потеряло одну единицу заряда.

Образование мюонного атома (*мезоатома*) может использоваться в физике твёрдого тела для создания имитации внедрения в кристаллическую решётку атома с номером меньшим на 1.

Возможны не только мюонные атомы, но и мюонные молекулы (мезомолекулы), размеры которых также в 200 раз меньше размеров их электронных аналогов. В мезомолекулярном ионе состоящем из двух ядер водорода (дейтерия, трития⁹) и одного отрицательного мюона ядра водорода сближены на расстояние, которое в обычной плазме соответствовало бы температуре порядка 3×10^7 К. В результате за время много меньшее времени жизни мюона (порядка $10^{-9} - 10^{-12}$ с) в ионах тяжёлого водорода $DD\mu$, $TT\mu$, $DT\mu$ происходит слияние ядер (*термоядерная реакция*), после чего мюон может успеть образовать новую мезомолекулу и снова вызвать слияние ядер. Поскольку мюоны вызывая ядерную реакцию сами практически не расходуются, этот процесс называется *мюонным катализом*. Процесс длится до тех пор, пока мюон не распадётся, или не будет связан ядром гелия.¹⁰ Идея мюонного катализа была высказана А.Д. Сахаровым в 1940-х годах.

Мюон иногда называют мю-мезоном, однако мезоном, в соответствии с современной классификацией, он не является.

Три разновидности нейтрино называются по именам соответствующих заряженных лептонов — электронным, мюонным и тау-нейтрино.

Электрону, мюону, тау-лептону и соответствующим нейтрино приписывается

⁸ Нейтрино ещё проще, но его ловить трудно.

⁹ Дейтерий и тритий — тяжёлые изотопы водорода. Ядро дейтерия — дейтрон состоит из протона и нейтрона $D = pn$, ядро трития — тритон состоит из протона и двух нейтронов $T = pnn$.

¹⁰ См. обзор Герштейн С.С., Петров Ю.В., Пономарёв Л.И. «Мюонный катализ и ядерный бридинг», УФН **160**(8) 3–46, 1990.

лептонное число (лептонный заряд) $+1$, соответствующим античастицам приписывается лептонное число -1 . Суммарное лептонное число сохраняется.

Какого-либо взаимодействия, источником для которого был бы лептонный заряд, также не обнаружено. Не обнаружено и фундаментальных причин, по которым этот заряд был бы обязан сохраняться. Поэтому и его лучше пока называть просто *лептонное число*.

Все нейтрино участвуют только в гравитационном и слабом взаимодействиях. По этой причине они очень слабо взаимодействуют с веществом. Нейтрино может (с вероятностью близкой к единице) пролететь насквозь звезду типа Солнца.

Как показали опыты по наблюдению осцилляций нейтрино, они имеют ненулевую массу, причём нейтрино «на лету» периодически меняет свой сорт превращаясь из электронного в мюонное и обратно. Из-за этого поток электронных нейтрино, идущий от Солнца, вдвое ниже теоретически предсказанного без учёта осцилляций нейтрино.¹¹

Очень важной проблемой для астрофизики является оценка плотности энергии, содержащейся в нейтрино низких энергий. Такие нейтрино несут слишком низкую энергию, чтобы их можно было зарегистрировать по вызываемым ими ядерным реакциям, поэтому они могут незаметно для астрономов обладать энергией сравнимой с энергией всего «обычного» вещества во Вселенной. Нейтрино должны давать вклад в *тёмную материю* — неизвестное вещество, обнаруживаемое астрономами только по гравитационным эффектам, составляющее большую часть (порядка $\frac{3}{4}$) массы галактик и свободно проходящее сквозь галактики при их столкновении.

1.1.8 Поле Хиггса и бозон Хиггса (*)

В квантовой теории поля безмассовые частицы описываются проще, чем массивные. В частности наличие массы у истинно элементарных частиц (лептонов, кварков, калибровочных W и Z бозонов) нарушает некоторые симметрии, естественные для стандартной модели физики элементарных частиц.

По этой причине большой популярностью среди современных физиков пользуется *механизм Хиггса* образования масс фундаментальных элементарных частиц.

Масса частицы связана с её энергией покоя знаменитым соотношением

$$\mathcal{E} = mc^2.$$

Можно сказать, что масса — это и есть энергия покоя, только пересчитанная в единицы массы (делённая на c^2).

Гипотеза Хиггса предполагает, что все истинно элементарные частицы «на самом деле» безмассовы, а их энергия покоя (наблюдаемая масса) — это потенциальная энергия в *поле Хиггса*.

Поле Хиггса — это гипотетическое поле, потенциал которого как правило постоянен и отличен от нуля во всём пространстве. (Почему потенциал Хиггса оказался отличен от нуля мы обсудим в следующем разделе 1.1.9 «Вакуум».) Потенциальная энергия взаимодействия частицы с полем Хиггса определяется произведением

¹¹Отталкиваясь от факта недостачи солнечных нейтрино Артур Кларк написал в 1986 году научно-фантастический роман «Песни далёкой Земли» («The Songs of Distant Earth»; не путать с одноимённым рассказом!), в котором предполагается, что недостаток нейтрино связан с предстоящей вспышкой Солнца как новой звезды.

потенциала Хиггса на некоторую константу взаимодействия, характерную для данного сорта частиц (эта константа пропорциональна наблюдаемой массе частицы).¹²

Следует специально отметить, что данный механизм относится только к истинно элементарным частицам. Для протонов и нейтронов, которые образуют большую часть массы обычного вещества, подавляющую часть массы составляют не массы образующих их кварков, а энергия соединяющих кварки глюонных струн.¹³

Как и всякое физическое поле, поле Хиггса должно быть квантовым. На фоне упомянутого выше постоянного (фонового) потенциала Хиггса возможны возбуждения (волны). Квант этих возбуждений представляют собой ещё один сорт элементарных частиц — *бозон Хиггса* (или *частица Хиггса*, или просто *хиггс*).

Механизм Хиггса пока что является гипотезой, не подкреплённой достаточными экспериментальными доказательствами, однако популярность этой гипотезы столь велика, что её опровержение вызовет в сообществе физиков намного большее удивление, чем её подтверждение. (Впрочем, и на этот случай физики уже подготовили несколько альтернативных гипотез.)

Бозон Хиггса и пресса

Ещё не будучи открытым бозон Хиггса приобрёл бешеную популярность (с элементами истерии) в прессе, где его величают «частицей Бога» и связывают его получение с возможным концом света. Разумеется, подобная популярность связана не столько с физикой, сколько с эффектами общественного сознания.

Вероятно первопричиной популярности частицы Хиггса является то, что её обнаружение объявлено одной из главных целей Большого адронного коллайдера (БАК) — самого сложного технического устройства, созданного когда-либо человеком. Первоначальный толчок раздуваемым прессой сенсациям дали сами физики, пытаясь популярно объяснить прессе зачем нужен БАК.

Такая популяризация современной физики для широкой неподготовленной аудитории неизбежно содержит в себе черты вульгаризации, а в условиях, когда новости (и, в особенности, сенсации), являются скоропортящимся товаром, который надо быстро продать жёлтая пресса¹⁴ начала соревнование по наиболее сенсационной подаче публике Большого адронного коллайдера и бозона Хиггса.

Дополнительным источником сенсаций («газетных уток») про бозон Хиггса явилась «интерференция» новостей о нём с сообщениями о возлагаемых на БАК надеждах на открытие эффектов квантовой гравитации, таких как рождение микроскопических *чёрных дыр* и их разновидностей (*кротовых нор, машин времени*).

На протяжении многих десятилетий эффекты квантовой гравитации предсказывались для энергий сравнимых с энергией Планка ($1,2 \times 10^{28}$ эВ). Такие прогнозы убивали надежды на экспериментальное исследование квантовой гравитации в исторически обозримом будущем (энергия, достигаемая на БАК — $1,4 \times 10^{13}$ эВ, она

¹²В лагранжиане фермиона массе соответствует член вида $\frac{1}{2}\bar{\psi}m\psi$, который по форме похож на взаимодействие поля ψ , описывающего частицу, с некоторым полем m . Мы представляем $m = m_0\Phi$, где Φ — поле Хиггса, а m_0 — константа взаимодействия, и получаем стандартный по форме трёхчастичный член $\frac{1}{2}m_0\bar{\psi}\Phi\psi$.

¹³Напоминаем, что суммарная масса кварков для протона — 11 МэВ, а его полная масса — 938 МэВ; суммарная масса кварков для нейтрона — 13 МэВ, а его полная масса — 939,5 МэВ.

¹⁴К сожалению, в вопросах фундаментальной науки к «жёлтой прессе» следует относить *все* средства массовой информации (СМИ), за исключением специальных научных изданий и очень небольшого числа лучших научно-популярных изданий. В качестве первого приближения вы смело можете считать «жёлтым» любое СМИ, в котором может быть опубликован астрологический гороскоп.

меньше энергии Планка в 10^{15} раз). В последние полтора десятка лет (примерно с 1998 г.) физики научились придумывать модели, в которых квантовая гравитация проявляет себя уже на следующем поколении ускорителей, а также научились объяснять себе, почему эти модели можно считать естественными (действительно, столь громадное различие в характерной энергии между гравитацией и всеми остальными фундаментальными взаимодействиями выглядит странно).

Для прессы бозон Хиггса, который связан с полем Хиггса, которое ответственно за появление у частиц массы, и эффекты квантовой гравитации, которые также, очевидно, связаны с массой, практически неразличимы, поэтому страшилки на обе темы друг друга взаимно подпитывали и усиливали.

Разумеется, как бозон Хиггса, так и чёрные микродыры быстро распадаются и вполне безопасны для человека, не подставляющегося под пучёк ускорителя.

1.1.9 Вакуум (*)

«Как все знают», вакуум (*классический вакуум*) — это пустота, в которой все поля обращаются в нуль. Однако, в квантовой теории на разные компоненты физических полей мы можем написать такие же соотношения неопределённостей как для координаты и импульса. Таким образом, классический вакуум не может существовать. В реальном пространстве всегда есть некоторые неустранимые неопределённости физических полей, которые не могут обратиться в нуль. С этими неопределённостями связана ненулевая средняя энергия, которую можно приписать постоянно рождающимся из ничего и исчезающим в никуда *виртуальным частицам*, которые рождаются и аннигилируют в вакууме на временах позволяемых соотношением неопределённости энергия-время $\tau \sim \frac{\hbar}{mc^2}$.

Для многих квантовых теорий поля рассчитываемая плотность энергии вакуума оказывается бесконечной. В такие теории приходится вводить специальные процедуры устранения бесконечностей.

Внесение в вакуум частицы приводит к его *поляризации*, подобной поляризации диэлектрической среды, в которую внесён электрический заряд. Эта поляризация создаётся отклонениями в движении *виртуальных частиц*. В результате заряд (электрический или другой) частично экранируется (или наоборот усиливается) и эффективный заряд частицы (сила её взаимодействия с каким-либо полем) оказывается зависящим от масштаба расстояний или волновых чисел (импульсов). Аналогичным изменениям подвергаются массы (за счёт вовлечения в движение виртуальных частиц). В большинстве теорий наблюдаемые на бесконечности массы и заряды частиц отличаются от параметров «голой» (без учёта поляризации вакуума) частицы в бесконечное число раз. Для устранения этих бесконечностей также приходится вводить специальные процедуры (*перенормировки*).

Таким образом, в пустоте, «в которой ничего нет» на самом деле что-то происходит, это «что-то» имеет ненулевую энергию, и что такое вакуум становится вообще непонятно.

Вакуум можно определять по-разному. Причём эти определения не всегда сходятся между собой.

Из общей теории относительности приходят такие эквивалентные определения:

- Вакуум-1 — это среда, движение относительно которой невозможно обнаружить.

- Вакуум-1 — это среда, натяжение которой (давление с обратным знаком) равна объёмной плотности энергии.

Физики могли бы назвать вакуум «эфиром», в духе электродинамики XIX века, но так не делают, чтобы избежать чрезмерно механистических аналогий, связанных со старыми теориями эфира. Можно было бы сохранить в физике понятие эфира, если бы физики своевременно догадались придумать среду, движение относительно которой в принципе невозможно обнаружить.

Из квантовой теории поля приходят такие **неэквивалентные** определения:

- Вакуум-2 — это состояние квантованного поля в котором отсутствуют возбуждения (частицы или квазичастицы).
- Вакуум-3 — это состояние квантованного поля с минимальной энергией.

Таким образом, мы располагаем по крайней мере тремя неэквивалентными определениями вакуума.

Если вакуум-2 или вакуум-3 не соответствует вакууму-1, то он явно противоречит теории относительности. Такой вакуум не годится на роль вакуума фундаментальной теории, но он может появляться в теориях конденсированного состояния как некоторое фоновое состояние среды, по которому распространяются различные возбуждения (частицы или квазичастицы).

Если вакуум-2 не является вакуумом-3, то это означает, что мы выбрали неправильный вакуум (неправильный фон), случайные возбуждения делают это состояние неустойчивым, и оно самопроизвольно свалится в другое состояние с более низкой энергией. Выбор такого неправильного вакуума означает не только неправильное определение фона, по которому бегают возбуждения, но и неправильное определение самих этих возбуждений, раз они отсчитываются от неправильного фона. Выбирая неправильный вакуум мы неправильно считаем сколько частиц присутствует в интересующем нас состоянии поля. Часто неправильный выбор вакуума связан с тем, что настоящий вакуум-3 менее симметричен, чем вакуум-2, и поэтому его сложнее найти. Такую ситуацию называют *спонтанным нарушением симметрии*.

Модели поля Хиггса строят как раз таким образом, чтобы минимальная энергия соответствовала однородному ненулевому потенциалу. Для этого в плотность энергии поля вводится член, вида потенциал «мексиканская шляпа»

$$U(\Phi) = a|\Phi|^4 - b|\Phi|^2.$$

Если вакуум-1 не является вакуумом-3, то его называют псевдовакуумом. Он может существовать какое-то время, воспринимаясь как настоящий вакуум, после чего спонтанно разрушится, высвободив избыток энергии в виде частиц, которые будут возбуждениями уже на фоне другого вакуума, с более низкой энергией. В современной теории Большого взрыва распад псевдовакуума связывают с завершением стадии *инфляции* (экспоненциального раздувания ранней Вселенной) и рождением во Вселенной вещества.

Для того, чтобы существовало состояние вакуум-3 необходимо, чтобы спектр возможных значений энергии квантованного поля был ограничен снизу. Для многих теорий эта ограниченность очевидна, но для гравитационного поля это не так. Гравитация описывает притяжение частиц, из-за чего гравитационная энергия как

правило отрицательна. Достигает ли она минимума, или может неограниченно уходить в область отрицательных значений? Поскольку у нас пока нет квантовой теории гравитации, ответа на этот вопрос мы пока не знаем. Если энергия гравитационного поля не ограничена снизу, то вакуум-3 вообще не существует. В этом случае может оказаться, что каждый очередной вакуум-1 — это на самом деле псевдовакуум, распад которого может порождать всё новые и новые частицы (или даже Вселенные).

1.2 Откуда пошла квантовая теория

В начале 20-го века, когда создавалась квантовая механика, физики не знали большую часть того зоопарка частиц, которые рождаются на ускорителях сегодня. Из четырёх известных сегодня взаимодействий было известно только два «школьных»: гравитационное и электромагнитное.

Постепенно становилось понятно, что должно быть ещё какое-то «ядерное взаимодействие», связанное с взаимодействием частиц внутри атомных ядер. По мере развития физики, различие в скоростях ядерных реакций подсказало, что ядерных взаимодействий на самом деле два — сильное («склеивающее» частицы в ядрах) и слабое (ответающее за β -распад).

Первоначально квантовая механика была теорией фотонов и нерелятивистских заряженных частиц (электронов и атомных ядер). Более того, тяжёлые (по сравнению с электронами) атомные ядра в большинстве первоначальных задач можно было рассматривать как классические объекты.

Так что первоначальные объекты квантовой механики — фотоны и нерелятивистские электроны во внешних полях. Этот сравнительно узкий раздел физики охватывает львиную часть всех задач, которые нужны человечеству в повседневной жизни, потому что всё окружающее нас обычное вещество состоит именно из этих ингредиентов. Квантовая механика стала физической основой химии, отобрав у химии некоторые разделы, такие как спектроскопия и теория химической связи. Получил объяснения открытый Менделеевым в 1869 году периодический закон. Те «воздушные шарики» — *орбитали*, которыми морочат нам голову химики, — всего лишь попытка дать представление о квантовомеханических эффектах, не прибегая к квантовой механике.

Однако полностью свести химию к физике так и не удалось, по причине очень быстрого роста (существенно более быстрого, чем в классической физике) вычислительной сложности квантовомеханических расчётов с ростом числа частиц.

1.3 Квантовая механика и сложные системы

Мы уже упоминали, что с ростом числа частиц сложность квантовых вычислений растёт существенно быстрее, чем сложность классических вычислений. Тем не менее, квантовая механика успешно применяется в статистической физике и, в частности, в физике конденсированного состояния.

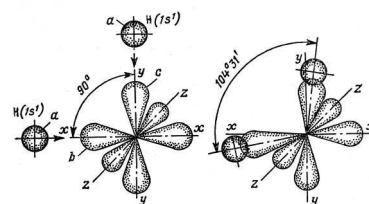


Рис. 1.9: Электронные орбитали для молекулы воды — попытка изобразить волновую функцию валентных электронов.

При этом оказывается, что очень многие (почти все) макроскопические явления могут быть объяснены только с привлечением квантовой теории.

1.3.1 Феноменология и квантовая теория

Мы можем в рамках классической теории описывать, например, намагниченность, но только на феноменологическом уровне: кто-то должен экспериментально промерить эмпирические зависимости намагниченности от поля, температуры и т.д., после чего из экспериментальных данных будут извлечены несколько подгоночных параметров, которые будут вставлены в теорию. Если такая феноменологическая теория построена с учётом общих законов термодинамики, то на макроуровне она будет замечательно работать, но ответить на вопрос о том, почему подгоночные параметры теории оказались именно такими, классический (т.е. неквантовый) теоретик не может.

Квантовая теория позволяет вывести из первых принципов (хотя бы в принципе, но часто и на практике) те параметры феноменологической теории, которые классические физики могли получать только из эксперимента как подгоночные. Зная, например, что в атоме углерода содержится по 6 штук протонов, нейтронов и электронов, мы можем попробовать определить спектр углерода, его кристаллическую решётку, теплоёмкость, проводимость, точки и параметры фазовых переходов и т.д. Конечно, будут получаться громоздкие уравнения, но квантовая механика по крайней мере говорит нам как эти уравнения записать. А дальше нам надо упростить получившиеся уравнения так, чтобы их можно было решить, и при этом они продолжали адекватно описывать интересующие нас явления. Возможно, нам это не удастся, но даже в этом случае у нас есть веские основания утверждать, что квантовая теория должна описывать эти явления, хотя мы пока не можем это показать.

1.3.2 Макроскопические квантовые явления

Все макроявления можно считать квантовыми, но некоторые из них более квантовые, чем другие. Это явления, которые с макроскопической точки зрения выглядят слишком необычно.

К макроскопическим квантовым явлениям обычно относят:

- индуцированное излучение и связанные с ним явления (лазеры)
- сверхпроводимость
 - квантование магнитного потока через сверхпроводник
 - суперпозиция токовых состояний (ток течёт по кольцу сразу в обе стороны)
- сверхтекучесть
 - вихревые нити
 - течение сверхтекучей и нормальной фазы в одном объёме в разные стороны

Список, разумеется, неполон, в том числе и потому, что раз уж вся физика в основе своей квантовая, то относить ли то или иное макроскопическое явление к квантовым во многом зависит от произвола конкретного автора.

Особенно много неясностей с макроскопическими квантовыми явлениями возникает тогда, когда к физике примешивается философия (интерпретации квантовой теории), а возможность проверить слова экспериментом в настоящее время отсутствует. Например, ряд авторов (в том числе Роджер Пенроуз) полагает, что макроскопическим квантовым явлением является сознание человека.

Сверхтекучесть и сверхпроводимость

На всякий случай напомним читателю, что из себя представляют явления сверхтекучести и сверхпроводимости.

Сверхтекучесть жидкого гелия была открыта в 1937 году П.Л. Капицей.

В сверхтекучем состоянии жидкость ведёт себя так, как будто один и тот же объём занимают две разные жидкости, одна из которых имеет нулевую вязкость, а другая — нормальная (вязкая) жидкость. Нормальная и сверхтекучая компоненты беспрепятственно текут друг сквозь друга.

При различных способах измерения сверхтекучая жидкость демонстрирует нулевую, либо отличную от нуля вязкость, поскольку к подобной двухкомпонентной жидкости понятие вязкости в классическом смысле не применимо. При движении тела в среде нормальная компонента создаёт силу сопротивления, и мы видим ненулевую вязкость. При течении жидкости через капилляры поток определяется почти исключительно сверхтекучей компонентой, и мы видим нулевую вязкость. Сверхтекучая жидкость при прохождении через капилляр охлаждается, т.к. сверхтекучей компоненте можно приписать нулевую температуру, а через капилляр проходит главным образом она.

Сверхтекучую жидкость нельзя рассматривать как механическую смесь двух фаз, мы не можем сказать, что одни частицы относятся к сверхтекучей компоненте, а другие к нормальной. При описании сверхтекучей жидкости степени свободы относящиеся к обоим компонентам нельзя связать с отдельными частицами — это коллективные степени свободы, описывающие коллективные возбуждения (квазичастицы), параметры которых (масса, спин, заряд) отличны от параметров отдельных частиц жидкости.

Сверхпроводимость — сверхтекучесть электронной жидкости в сверхпроводнике. Квазичастицы сверхпроводящей компоненты отчасти ведут себя как связанные состояния двух электронов (*куперовские пары*). Притяжение электронов в паре обеспечивается за счёт взаимодействия с колебаниями кристаллической решётки (за счёт обмена фононами).

Переход в сверхпроводящее состояние открыл в 1911 году Камерлинг-Оннес для ртути (температура перехода 4,1K). В настоящее время (согласно Википедии) наиболее высокая подтверждённая температура перехода получена для $\text{Hg}_{12}\text{Tl}_3\text{Ba}_{30}\text{Ca}_{30}\text{Cu}_{45}\text{O}_{127}$ — 138K при нормальном давлении и 164K при давлении $3,5 \cdot 10^5$ атм.



Рис. 1.10: Пётр Леонидович Капица (1894–1984).



Рис. 1.11: Хейке
Камерлинг-Оннес в 1878 г.
(1853–1926). W

Переходы в сверхпроводящее (сверхтекучее) состояние в отсутствие внешних полей являются *фазовыми переходами второго рода*, т.е. в точке перехода нормальное и сверхтекучее (сверхпроводящее) состояния не различаются: концентрация сверхтекучей компоненты в точке перехода равна нулю, и становится отлична от нуля при более глубоком охлаждении.

Сверхтекучая (сверхпроводящая) компонента рассматривается как бозе-конденсат квазичастиц (коллективных возбуждений) среды. Все квазичастицы конденсата описываются общей волновой функцией, квадрат которой задаёт концентрацию квазичастиц. Именно эту волновую функцию обычно выбирают в качестве параметра порядка при рассмотрении фазового перехода. Поскольку бозе-конденсации могут подвергаться только

бозоны, квазичастицы конденсата всегда имеют целый спин, даже если жидкость состоит из фермионов, как электронная жидкость (квазичастицы конденсата — куперовские пары) или жидкий He^3 .

Поскольку состояние большого количества частиц описывается одной волновой функцией, то многие квантовые явления, которые обычно относятся к микросистемам, здесь оказываются макроскопическими.

1.3.3 Вымораживание степеней свободы

Из трёх перечисленных выше макроскопических квантовых явлений два связаны с физикой низких температур. Это не случайно. Дискретность уровней энергии в связанной квантовой системе приводит к тому, что очень высокие уровни энергии ($E \gg T$, точнее $e^{-\frac{\Delta E}{T}} \ll 1$) практически не играют роли, и связанные с этими уровнями энергии степени свободы можно не рассматривать. Таким образом, по мере уменьшения температуры «выключаются» сильновозбуждённые состояния и поведение системы становится всё проще и проще с квантовой точки зрения, т.е. квантовые явления проявляются всё более и более отчётливо.

Какие температуры считать низкими зависит от того, какие свойства для какой системы мы рассматриваем. Если нас интересует вырождение электронного газа в металле (распределение электронов по энергиям в виде ступеньки), то комнатная температура (300K) может считаться низкой, а если нас интересует явление сверхпроводимости, то тот же металл, как правило, придётся охладить до температур в несколько кельвинов.

В более плотно упакованных средах уровни энергии выше, соответственно вымораживание происходит при более высоких температурах. Это можно понять из соотношения неопределённостей

$$\delta x \cdot \delta p \geq c\hbar, \quad c \sim 1.$$

В плотной среде частица «зажата» соседями и δx для характерных состояний мало. Соответственно велико δp и велики характерные энергии.

Следуя А.Ф. Андрееву¹⁵ (с небольшими модификациями), перечислим некото-

¹⁵ А.Ф. Андреев «Последние достижения и актуальные проблемы в физике низких температур», обзорная лекция для студентов МФТИ, прочитанная 25 марта 2009 г. на Межпредметном семинаре. См. <http://theorphys.fizteh.ru/subscription/RassylMejPred/mejprs25mar2009.html>

рые этапы «вымораживания» степеней свободы по мере снижения температуры системы.

- $10^{10} K$ — отдельные протоны и нейтроны объединяются в атомные ядра — вымораживается независимое движение протонов и нейтронов
- $10^4 K$ — отдельные атомные ядра и электроны (плазма) объединяются в атомы — вымораживается (частично) независимое движение электронов и ядер
- отдельные атомы объединяются в молекулы — вымораживается независимое движение атомов, остаётся движение молекулы как целого и колебания атомов вдоль химических связей (химические связи как пружинки; на языке теоретической механики — это *собственные колебания*)
- прекращаются колебания атомов внутри молекулы
- газ конденсируется в жидкость или твёрдое тело — вымораживается независимое движение молекул, остаются коллективные колебания (например, звук), при которых каждая степень свободы описывает общее колебание всего образца (снова *собственные колебания*), т.е. стоячую или бегущую волну с частотой ω (такая волна описывается как совокупность квазичастиц с энергией $\hbar\omega$, для звука — это *фононы*)
- при дальнейшем понижении температуры вымораживаются коллективные колебания с более высокими частотами

Детали того, какие именно коллективные возбуждения и как вымораживаются при низких температурах, зависят от того, какое вещество мы исследуем. Это могут быть, например, волны намагниченности, или волны де Бройля для частиц сверхтекучей фазы и др. Часто остающиеся после вымораживания коллективные степени свободы могут интерпретироваться в терминах движения сложных частиц (составных элементарных частиц, атомных ядер, атомов, молекул, твёрдых тел) или квазичастиц (фононов, куперовских пар, надконденсатных электронов и т.д.).

Глава 2

От классики к квантовой физике

Если я видел дальше других, то потому,
что стоял на плечах гигантов.

Исаак Ньютон w

Квантовая механика существенно отличается от классической (доквантовой) физики: идейно квантовая механика устроена по-другому. При этом многие классические идеи находят своё применение, но в другом, часто неожиданном контексте. Многие «мелочи» (*точные* определения «очевидных» понятий, «чисто технические» оговорки и т.п.) при этом оказываются ключевыми.

В этой главе почти популярно обсуждаются принципиальные сходства и различия классической и квантовой физики, для понимания которых не требуется знания квантовой механики.

Как и глава 1 «Место квантовой теории в современной картине мира (фф)» большая часть этой главы может (не)читаться отдельно от остальной книги.

Обязательным для понимания последующих глав является только описание структуры квантовой механики в разделе 2.3 «Две ипостаси квантовой теории».

2.1 «Здравый смысл» и квантовая механика

В действительности всё не так, как на самом деле.

Станислав Ежи Лец, «Непричесанные мысли»

Многое из того, что кажется школьнику обязательными свойствами любой физической теории, неприменимо в квантовой физике. Вот несколько таких общих положений, которые великолепно работали столетиями, казались настолько естественными для любой научной теории, что даже не оговаривались явно, но *перестали работать в квантовой физике*:

- Точечная частица находится в некоторой единственной точке пространства в любой момент времени, иначе это не точечная частица.
- Если провести над системой измерение, то мы станем лучше знать её состояние, если мерить достаточно аккуратно.

- Измерение всегда можно провести сколь угодно аккуратно, по крайней мере *в принципе можно*.
- Наука объективна в том смысле, что при изучении любого объекта мы можем исключить из рассмотрения субъекта, который этот объект изучает и измеряет.
- Если измерение говорит нам «ДА» (система определённо обладает некоторым свойством), то такое же измерение над другой такой же системой в таком же состоянии тоже обязательно даст «ДА» (*детерминизм*).
- Для того, чтобы состояние системы изменилось, надо, чтобы что-то провзаимодействовало именно с этой системой.
- Состояния всех подсистем однозначно определяют состояние системы в целом.

Все эти утверждения не работают в квантовой механике!!!

«Не работают» не значит, что это «вообще» неверные утверждения. В своей области применимости (в классической физике) они работают великолепно, но не в квантовой механике. Эти утверждения оказались не фундаментальными свойствами природы или проявлениями «здорового смысла», а феноменологическими обобщениями с очень широкой, но ограниченной областью применимости.

Эти сложности связаны со структурой квантовой теории, в которой, как и в других неклассических теориях, *анализ процесса измерения* играет принципиальную роль и позволяет/заставляет отказаться от некоторых привычных, но принципиально ненаблюдаемых понятий.

2.2 Квантовая механика — теория превращений

Большинство перечисленных выше сбоев классической физической интуиции связаны с тем, что процесс изменения состояния квантовой системы невозможно детально проследить. Впервые физики столкнулись с этим при попытках описания постулированных Бором (1913) *квантовых скачков*, при которых состояние атома изменяется скачком с испусканием или поглощением фотона.

Прорыв был достигнут, когда Гейзенберг (1925) отказался от рассмотрения деталей процесса и ввёл матрицы, связывающие между собой начальные и конечные состояния системы, которые *превращаются* друг в друга по некоторым правилам.

Одна из основных идей квантовой механики состоит в том, что

Квантовая механика — теория превращений.

Причём *проследить процесс превращения нельзя*. Мы уже сталкивались превращениями в предыдущей главе, при обзоре физики элементарных частиц.

Перечислим некоторые важные случаи *превращений*:

- Любой процесс — *превращение* начального состояния в конечное.
- Движение=изменение=*превращение*.

- «Распад» элементарной частицы, или радиоактивного ядра — это *превращение*. Исходная частица может не содержать внутри чего-либо похожего на продукты «распада», в которые она *превращается* в некоторый момент времени (момент точно не определённый, не определимый и вообще «размазанный» по времени).
- Фундаментальные *превращения* — это элементарные *превращения*, на которые могут быть разложены все другие, более сложные превращения.
- Стандартные «4 фундаментальных взаимодействия» — это те фундаментальные *превращения*, которые меняют число частиц, есть и другие фундаментальные *превращения*, которые число частиц не меняют (пример см. следующий пункт).
- Осцилляции нейтрино (аналогично осцилляции кварков) — процесс *взаимопревращений* разных сортов нейтрино друг в друга.
- Важное фундаментальное превращение — *превращение* элементарной частицы *в себя* с изменением координат или без изменения импульса (не забываем, что координата и импульс одновременно не определены).
- Если процесс (*превращение*) может происходить разными способами (например, процесс может быть разными способами разложен на фундаментальные взаимодействия), и мы не можем эти способы различить между собой, то реализуются *все способы одновременно*, т.е. все способы дают вклад в процесс.
- Если с системой ничего не произошло, то она всё равно *превратилась* из начального состояния обратно в начальное. В процессе этого превращения она могла подвергнуться каким-то нетривиальным превращениям, возможно *одновременно* разным превращениям (см. предыдущий пункт).

2.3 Две ипостаси квантовой теории

Квантовая механика — вероятностная теория. Однако это верно только наполовину. На самом деле квантовая механика состоит из двух частей со своими областями применимости (но обе части описывают *превращения*):

- Полностью детерминистическая *теория замкнутой квантовой системы* — теория того, что никто не может видеть, — того, что происходит, когда замкнутая система ни с кем не взаимодействует, — *унитарная эволюция* (описывается уравнением Шрёдингера),
- Вероятностная *теория измерений*, описывающая результат измерения (т.е. взаимодействия системы с измерительным прибором), но не описывающая сам процесс измерения, может быть в свою очередь разбита на две части:
 - вычисление вероятностей различных исходов измерения (*правило Борна*),
 - вычисление состояния системы после измерения:
 - * если результат измерения известен (*селективное измерение*),
 - * если результат измерения неизвестен (*неселективное измерение*).

2.3.1 Когда наблюдатель отвернулся...

А дальше идет коридор. Если распахнуть дверь в нашей гостиной пошире, можно увидеть **кусочек** коридора в том доме, он совсем такой же, как у нас. Но, кто знает, вдруг там, где его не видно, он совсем другой?

Льюис Кэрролл, «Алиса в Зазеркалье»

Уравнение Шрёдингера не содержит ничего вероятностного. Оно полностью описывает, как меняется со временем волновая функция, а волновая функция полностью описывает состояние системы. Более полное описание невозможно, поэтому волновую функцию часто называют просто *состояние* (или *чистое состояние*, см. ниже сноску 2). Кто-то может возразить, что как раз волновая функция описывает вероятности, но уравнение Шрёдингера об этом «не знает», в этом разделе теории ничто не побуждает нас к использованию вероятностей, вероятности появятся, когда мы займёмся теорией измерений.

Волновая функция — максимально полное описание системы в квантовой механике. Причём уравнение Шрёдингера позволяет по волновой функции, заданной в один момент времени, предсказывать её поведение как вперёд, так и назад по времени, если система не подвергалась внешним возмущениям/измерениям (в данном случае это практически одно и то же).

Пока квантовая система эволюционирует сама по себе, квантовая механика даже более детерминистична, чем классическая, поскольку уравнение Шрёдингера устойчиво по начальным данным: если в начальный момент времени волновая функция задана с некоторой ошибкой, то величина этой ошибки¹ не меняется со временем. Только для этого система должна быть замкнутой, т.е. наблюдателю мало «отвернуться», ему надо ещё и «выключить свет», изолировав систему от окружения.



Рис. 2.1: Эрвин Рудольф Йозеф Александр Шрёдингер (1887–1961). W

2.3.2 На наших глазах...

Совсем по-другому ведёт себя система, когда мы её наблюдаем, т.е. подвергаем некоторому *неконтролируемому* внешнему воздействию. Именно в процессе измерения волновая функция проявляет свою вероятностную природу, и проявляется *необратимость*, свойственная квантовой механике. Состояние системы меняется скачком, и после измерения мы с некоторыми вероятностями имеем разные волновые функции² и различные результаты измерения.

Для того, чтобы измерение произошло, не важно, смотрит ли наблюдатель на стрелку прибора, и есть ли у прибора вообще стрелка. То, что наблюдатель от-

¹Заданная как норма в пространстве L_2 . Необходимые для квантовой механики свойства и определения для пространства L_2 будут даны ниже.

²Состояние, когда система с некоторыми вероятностями описывается разными волновыми функциями, называются *смешанными состояниями*. Смешанные состояния удобно описывать с помощью матриц плотности, о которых ещё будет идти речь далее.

вернулся, не отменяет наблюдения.³ Если вы наблюдаете процесс невооружённым глазом, то для прекращения измерения мало закрыть глаза, надо ещё и выключить свет. Важно, что *исследуемая квантовая система подверглась неконтролируемому взаимодействию с внешней макроскопической средой*. Неконтролируемость взаимодействия делает его *необратимым*, и обеспечивается эта неконтролируемость тем, что среда содержит макроскопически большое количество частиц. При этом, непосредственно в контакт с исследуемым объектом может вступать одна частица, но в процессе дальнейшей передачи сигнала и его усиления (если такое усиление нужно) в процесс вовлекается всё больше и больше частиц. Если у прибора есть стрелка, то в результате макроскопический наблюдатель сможет поставить единичку в одну или другую колонку лабораторного журнала.

В некоторых случаях результат измерения можно предсказывать однозначно. Однако для этого волновая функция и измеряемая величина должны быть связаны определённым соотношением, тогда говорят, что *данная величина определена в данном состоянии*. Для того же состояния системы (той же волновой функции) можно подобрать другую величину, измерение которой уже не будет однозначно предсказуемо. (Например из соотношения неопределённости следует, что чем точнее определён импульс, тем сильнее частица «размазана» по координате.)

Вероятность того или иного исхода измерения физической величины описывается правилом Борна, связывающим квадрат модуля волновой функции (амплитуды вероятности) $|\psi(x)|^2$ с вероятностью результата измерения. Это правило, которое мы (в простейшем случае) «угадаем» при анализе смысла комплексной амплитуды электромагнитной волны (2.7.2 «Комплексная амплитуда в оптике и число фотонов (Φ^*)»), является универсальным.

Таким образом, состояние системы (заданное, например, волновой функцией) может меняться со временем двумя принципиально различными способами: предсказуемо без взаимодействия с окружением и непредсказуемо при измерении.



Рис. 2.2: Макс Борн (1882–1970). W

2.4 Принцип соответствия (ф)

Для того, чтобы состыковать квантовую теорию с надёжно установленными и многократно подтверждёнными экспериментом и практикой законами классической физики и определить пределы применимости классической физической интуиции, Нильс Бор ввёл в 1923 году *принцип соответствия*:

Если при описании явления применимы две разные теории, то предсказания результатов эксперимента должны соответствовать друг другу.

Однако язык, на котором теории описывают одно и то же явление, может быть совершенно различен, и установление соответствия между различными описаниями может само по себе быть нетривиальной задачей. Также нетривиальной задачей

³Знание наблюдателем результата измерения различает селективное измерение от неселективного, но такое различие, основанное на незнании, уже полностью описывается на языке классической теории вероятностей.

является выяснение того, в каких именно пределах предсказания теорий совпадают. Установление этих пределов важно для определения области применимости каждой теории.

Принцип соответствия — не физический, а общеполитический принцип. Применительно к квантовой механике его обычно формулируют так:

Поведение квантовой системы в пределе больших квантовых чисел соответствует поведению аналогичной классической системы.



Рис. 2.3: Нильс Хенрик Давид Бор (1885–1962). W

Иногда общий принцип формулируют так:

Новая теория должна в некотором пределе воспроизводить предсказания старой, проверенной теории.

Однако такую формулировку следует считать слишком узкой, т.к. новая теория не всегда перекрывает область применимости старой теории полностью. На сегодняшний день у нас нет одной «самой современной» фундаментальной физической теории, а есть несколько хороших фундаментальных физических теорий, каждая из которых хорошо работает в своей области применимости и согласуется с другими теориями там, где их области применимости пересекаются. Вот некоторые примеры теорий и применения к ним принципа соответствия:

- *Ньютоновская механика (НМ)* — общий предел для всех современных физических теорий для расстояний, времён, масс не слишком больших и не слишком малых, и скоростей много меньше скорости света.
- *Специальная теория относительности (СТО)* полностью воспроизводит ньютоновскую механику в пределе малых скоростей.
- *Общая теория относительности (ОТО)* полностью воспроизводит СТО в пределе малых масс, времён и расстояний (в малой области пространства-времени).
- *Нерелятивистская квантовая механика (КМ)* полностью воспроизводит НМ в пределе больших расстояний, времён, действий (действие должно быть большое в единицах $\hbar$, расстояние — в волнах де Бройля и т.д.).
- *Квантовая теория поля (КТП)* (в виде *стандартной модели*) полностью воспроизводит КМ в пределе малых скоростей и энергий, полностью воспроизводит СТО в пределе больших расстояний, времён, действий (как КМ воспроизводит НМ). КТП согласуется с ОТО в пределе слабых гравитационных полей, но для сильных гравитационных полей современная КТП не работает.

Мы видим, что среди перечисленных теорий две «самые современные»: ОТО и КТП. Они согласуются между собой, но ни одна не покрывает другую полностью. Конечно, физики мечтают открыть теорию, которая бы воспроизводила в соответствующих пределах и ОТО, и КТП. Есть разные претенденты на роль такой теории, но среди них пока нет общепризнанного.

2.5 Несколько слов о классической механике (ф)

Счастливец Ньютон, ибо картину мира можно установить лишь однажды.

Жозеф Луи Лагранж^а

^аЦитата не проверена.

Классическая ньютоновская механика столетиями считалась абсолютно точной и окончательной физической теорией. С начала двадцатого века оказалось, что на самом деле она описывает предельный случай не слишком больших и не слишком малых расстояний, времён, масс, скоростей. В своей области применимости, где классическая механика великолепна, она используется до сих пор и будет использоваться всегда. И согласно принципу соответствия, любая физическая теория должна быть проверена на соответствие с ньютоновской механикой.

2.5.1 Вероятностная природа классической механики (ф)

Очень трудно сделать точный прогноз, особенно о будущем.

Нильс Бор W

Уравнение Шрёдингера всегда устойчиво по начальным данным. В классической механике большинство интересных систем неустойчиво, т.е. первоначальная малая ошибка в начальных данных экспоненциально нарастает со временем. Например, по оценке для тороидальной Земли характерное время, за которое малые возмущения состояния двумерной атмосферы увеличиваются в e раз, составляет порядка одной недели: «Например, для вычисления погоды на два месяца вперёд нужно иметь в запасе пять знаков точности. Практически это означает, что вычислять погоду на такой срок невозможно.»⁴

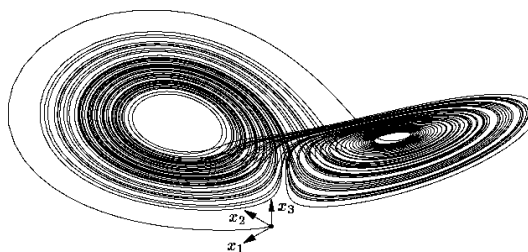


Рис. 2.4: Аттрактор («бабочка») Лоренца — классический пример того, как детерминистическая динамика порождает хаос. Витки кривой проходят сколь угодно близко друг к другу, в результате чего сколь угодно малая ошибка приводит к тому, что со временем мы ошибёмся «лепестком». Первоначально аттрактор Лоренца возник при численном исследовании простейшей модели погоды.

В реальности устойчивая механическая система, тем более разрешимая аналитически — редкая удача. Практически каждая такая система является хорошим нулевым приближением для некоторого класса задач, отталкиваясь от которого можно строить теорию возмущений, внося малые поправки в уравнения и их решения.

⁴В.И. Арнольд, «Математические методы классической механики», Добавление 2: «Геометрические левоинвариантные метрики»

Неустойчивость уравнений классической механики работает как своеобразный микроскоп, который вытягивает на макро-уровень всё более и более мелкие возмущения первоначальной системы. Это приводит к тому, что классическая механика позволяет делать предсказания на сколь угодно длинные сроки только тому, кто знает начальные данные с бесконечной точностью, т.е. может оперировать с бесконечным объёмом информации.⁵ (Этот «кто-то» носит гордое имя *Демона Лапласа*.)

На достаточно больших временах (по сравнению с характерным временем нарастания возмущений) классическая механическая система «забывает» начальные данные (за исключением «хороших» = аддитивных сохраняющихся величин, таких как энергия), и мы можем делать для неё лишь вероятностные предсказания.

2.5.2 Ересь аналитического детерминизма и теория возмущений (ф)

... в пространстве ничего не пропадает; если ты оставишь в нём портсигар, так достаточно рассчитать элементы его траектории, прибыть на то же место в надлежащее время, и портсигар, следуя по своей орбите с астрономической точностью попадёт к тебе в руки в заранее рассчитанную секунду.

С. Лем, рассказ «Патруль», серия «Приключения звёздного навигатора Пиркса»



Рис. 2.5: Демон Лапласа (Laplace No Ma) по версии японских мультипликаторов.

[©P-G/R]

Простейшие классические механические системы, такие как гармонический осциллятор, часто бывают и устойчивы, и аналитически решаемы, и тем самым, вдвойне не типичны. Это одна из причин того, за что их любят в школе и на младший курс. Конечно, приятно, когда уравнения решаются аналитически. Именно точные аналитические решения производят впечатление наиболее «настоящих». Кому-то возможно кажется, что все уравнения должны так решаться. Такую точку зрения в комбинации с лапласовским детерминизмом можно было бы назвать «аналитическим детерминизмом». Сам Лаплас «аналитического детерминизма», скорее всего, не придерживался, и своего демона придумал исключительно как мысленный эксперимент, ведь в своих астрономических вычислениях ему приходилось вместо точных аналитических решений пользоваться последовательными приближениями теории возмущений.

Теория возмущений сегодня строится в рамках различных физических теорий, но исторически первой была как раз небесная механика. Основную идею теории возмущений можно описать так: мы упрощаем изучаемую систему настолько, чтобы появились простые решения (так называемые «невозмущённые решения», очень приятно, когда это точные аналитические решения), после чего ищем решения исходной системы в виде «невозмущённые решения» + «поправки».

Например, рассматривая движение планет, лун, комет и других тел солнечной системы, мы сперва учитываем только притяжение планет к Солнцу, и лун к

⁵Чтобы задать произвольное вещественное число, необходимо знать бесконечное количество цифр после запятой. В теории случайных процессов вещественное число является одной из стандартных моделей случайного процесса, поскольку с помощью вещественных чисел из отрезка $[0, 1]$ можно пронумеровать все бесконечные последовательности цифр.

соответствующим планетам, считая при этом Солнце, планеты и луны материальными точками и пренебрегая ускорениями планет при расчёте движения лун. В этом приближении планеты и луны движутся по замкнутым эллиптическим орбитам, в соответствии с законами Кеплера. После этого мы начинаем вводить разные поправки: учитываем те силы гравитационного притяжения и силы инерции, которыми первоначально пренебрегли, учитываем, что небесные тела не точки, а стало быть действуют ещё и приливные силы, что приливные силы могут вызывать в веществе трение и переводить механическую энергию в тепловую, что кометы при движении вблизи Солнца теряют вещество и т.д. и т.п.

Первым крупным успехом классической теории возмущений следует, вероятно, считать открытие в 1846 году планеты Нептун, ранее предсказанной на основе анализа возмущений других планет.

На сегодня понятно, что в большинстве теорий (как классических, так и квантовых) точное аналитическое решение — скорее счастливое исключение, чем правило. Тем не менее, кажется что бессознательный аналитический детерминизм продолжает оставаться мировоззрением многих людей, которые далеки от науки, но «верят в науку». Во всяком случае, в художественной литературе подобные настроения частенько проскальзывают.

2.6 Теоретическая механика классическая и квантовая (Ф)

После того, как Ньютон сформулировал законы Ньютона и создал на их основе классическую механику, считавшуюся незыблемой вплоть до создания специальной теории относительности (СТО), развитие механики не прекратилось.

Выдающимися математиками и механиками был разработан принцип экстремального действия (2.7.1 «Механика и оптика геометрическая и волновая (Ф)»), на основе которого был дан ряд исключительно изящных формулировок классической механики, в которых характер механической системы полностью описывался заданием некоторой функции (лагранжиан и гамильтониан⁶), а конкретное состояние системы описывалось как точка некоторого абстрактного фазового пространства (или как распределение в этом пространстве).

По существу был разработан специальный математический язык для описания механических теорий (моделей) с конечным числом степеней свободы. Этот язык оказался настолько удачным, что появившаяся в начале 20-го века специальная теория относительности также была описана на этом языке.

Модификации теоретической механики для систем с бесконечным числом степеней свободы столь же изящно описывают механику сплошной среды и классические теории поля (первой из которых была электродинамика Максвелла).

Мощный математический аппарат классической теоретической механики не пригоден для описания квантовой механики. Однако он может быть модифицирован для квантового случая.

Существенная часть данной книги — изложение теоретической квантовой механики для систем с конечным числом степеней свободы. Подобно классической теоретической механике, это специальный язык для описания физических теорий,

⁶ Лагранжиан (функция Лагранжа) — разность кинетической и потенциальной энергий, выраженная как функция от обобщённых координат и скоростей. Гамильтониан (функция Гамильтона) — суммарная энергия выраженная как функция обобщённых координат и импульсов.

который содержит квантовый гамильтониан (описывает характер физической системы) и квантовые состояния. Между гамильтонианами соответствующих систем в классической и квантовой механике будет установлено соответствие, хотя и не однозначное.⁷

Как и в классическом случае, обобщение квантовой механики на бесконечное число степеней свободы даст квантовую теорию поля (КТП). Переход к релятивистскому случаю потребует не только замены гамильтонианов, но и одновременно перехода к квантовой теории поля, поскольку при больших энергиях становятся существенными процессы рождения частиц, а значит число степеней свободы оказывается переменным (потенциально бесконечным).

2.7 Несколько слов об оптике (ф)

В классической оптике можно выделить три эпохи:

- *Геометрическая оптика*,
- *Волновая оптика*,
- Волновая оптика как *раздел классической электродинамики*.

Геометрическая оптика похожа на классическую механику, а волновая оптика обладает многими существенными чертами квантовой теории. Благодаря этому мы сможем многое понять в квантовой механике просто по-новому взглянув на оптику и её историю в сравнении с механикой классической и квантовой.

Позднее, в разделе 12.9 «Квантованные поля» мы обсудим связь между классической и квантованной теорией поля на более детальном (хотя и не исчерпывающем) уровне.

2.7.1 Механика и оптика геометрическая и волновая (ф)

Как известно, классическая механика была создана Ньютоном («Philosophiae Naturalis Principia Mathematica», 1687) по образу и подобию геометрии. В своих «Математических началах натуральной философии» Ньютон не писал формул, а в подражание «Началам» Евклида (1-е печатное издание: «Elementa geometriae», 1482) описывал все законы на геометрическом языке.

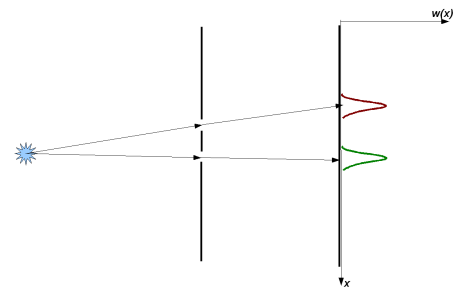


Рис. 2.6: Прохождение света через 2 щели в геометрической оптике.

⁷ Квантовая (теоретическая) механика систем с конечным числом степеней свободы оказывается похожа на классическую теорию поля (классическую механику с бесконечным числом степеней свободы). В частности это позволит вывести уравнение Шрёдингера из вариационного принципа, как классические уравнения поля (4.11 «Вариационный принцип»).

Мопертюи («Essay de Cosmologie», 1750), Эйлер («Reflexions sur quelques loix generales de la nature», 1748), Лагранж («Mécanique analytique», Париж, 1788) и Гамильтон («On a general method in Dynamics», **Philosophical Transactions**, 1834, 1835) переформулировали классическую ньютоновскую (*геометрическую*) механику по образу и подобию *геометрической* оптики. Согласно *принципу Ферма* (ок. 1660), свет распространяется по траекториям с экстремальным (часто минимальным) временем прохождения. Аналогично, согласно *принципу экстремального действия*, движение механической системы происходит таким образом, чтобы функционал действия $S[\mathbf{x}(t)]$ вдоль траектории $\mathbf{x}_0(t)$ был экстремален. Но если в геометрической оптике траектория луча света была кривой в трёхмерном физическом пространстве, то в теоретической механике траектория системы — кривая в конфигурационном пространстве, точки в котором задаются совокупностью обобщённых координат всех частей системы.

Однако вскоре выяснилось, что распространение света более правильно описывается волновой оптикой. Вместо отдельных лучей в том же физическом пространстве следует рассматривать волну. Согласно *принципу Гюйгенса-Френеля* (1816 г.), каждая точка фронта световой волны может рассматриваться как источник вторичных волн, интерференция которых, с учётом фазы, задаёт дальнейшее распространение света. При этом фаза волны определяется как $e^{i\omega t}$, где t — время распространения. То самое время, которое входило в принцип Ферма.

Если многократно повторять построение вторичных волн, каждый раз разбивая волновые фронты на много мелких участков, то нам придётся вычислять время распространения вдоль всевозможных траекторий луча света, после чего суммировать фазы тех траекторий, которые встречаются в нужной точке. Т.е. в волновой оптике свет распространяется по всем траекториям одновременно, постоянно интерферируя сам с собой (см. раздел 3.2).

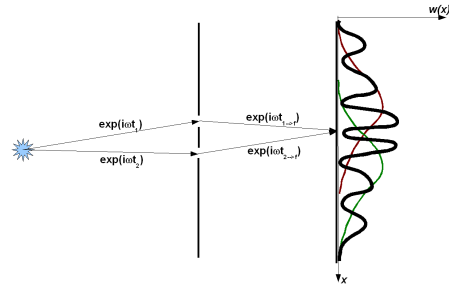


Рис. 2.7: Интерференция на 2-х щелях.

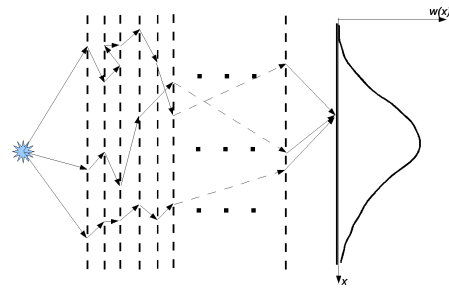


Рис. 2.8: Интерференция на бесконечном числе щелей в бесконечном числе ширм. Экраны «состоят из щелей», т.е. в действительности никаких ширм нет, зато есть интерференция света, идущего по всем возможным путям из источника в данную точку на экране.

Волновая (квантовая) механика в той части, в которой она описывает свободную эволюцию замкнутой системы, относится к теоретической механике так же, как волновая оптика относится к геометрической. В квантовой механике вместо отдельных траекторий в том же конфигурационном пространстве следует рассматривать волну (волновую функцию). И тот же функционал действия $S[\mathbf{x}(t)]$, экстремальное значение которого определяло разрешённые траектории $\mathbf{x}_0(t)$ в классической механике, в квантовой определяет фазу $e^{\frac{i}{\hbar}S[\mathbf{x}(t)]}$ волновой функции.

Поскольку действие — размерная величина в показателе экспоненты она делится на постоянную $\hbar$ с размерностью действия — *постоянную Планка*. Постоянную Планка можно положить равной 1 и рассматривать как *естественную единицу действия*.

«Размерность действия» = «расстояние» × «импульс» = «время» × «энергия».

Положив постоянную Планка единицей, мы тем самым выбираем в качестве единицы импульса обратную единицу длины, а в качестве единицы энергии — обратную единицу времени. Таким образом, размерность импульса совпадает с размерностью волнового вектора, а размерность энергии — с размерностью частоты. Из специальной теории относительности мы знаем, что круговая частота ω вместе с волновым вектором $\mathbf{k}$ образуют четырёхмерный волновой вектор $k^i = (\omega, \mathbf{k})$. Аналогично энергия E и импульс $\mathbf{p}$ образуют четырёхмерный импульс $p^i = (E, \mathbf{p})$. Как было показано Планком, на примере излучения чёрного тела, и Эйнштейном, на примере фотоэффекта, четырёхмерный импульс кванта электромагнитного излучения (*фотона*) и волновой вектор соответствующей волны являются одним и тем же объектом, выраженным в разных единицах:

$$p^i = \hbar k^i \quad \Leftrightarrow \quad E = \hbar \omega, \quad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}. \quad (2.1)$$

Де Бройль догадался, что любой частице с определённым 4-импульсом соответствует некоторая волна, чей волновой 4-вектор выражается той же формулой.

2.7.2 Комплексная амплитуда в оптике и число фотонов (Φ^*)

Рассмотрим плоскую монохроматическую электромагнитную волну. Электрическое поле в какой-то точке пространства быть задано как

$$\mathbf{E} = \text{Re}(\mathbf{A} \exp(-i\omega t)) = \text{Re}(\mathbf{A}) \cos(\omega t) + \text{Im}(\mathbf{A}) \sin(\omega t).$$

Здесь $\mathbf{A}$ — комплексная амплитуда электромагнитной волны. Векторы $\mathbf{E}$ и $\mathbf{A}$ перпендикулярны волновому вектору электромагнитной волны, т.е. мы можем рассматривать $\mathbf{A}$ как двумерный комплексный вектор, например, в плоскости (x, y) , если волна бежит по z . На этой плоскости мы можем вводить различные ортонормальные базисные векторы, которым соответствуют разные взаимоисключающие



Рис. 2.9: Луи Виктор Пьер Раймон, 7-й герцог Брולי (Луи де Бройль), 1929 г. (1892–1987). W

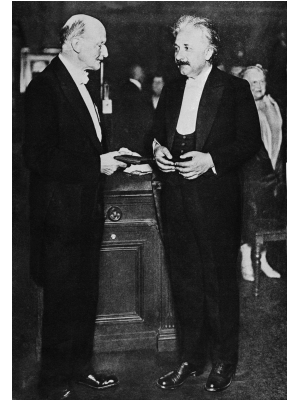


Рис. 2.10: Макс Планк (1858–1947) вручает Альберту Эйнштейну (1879–1955) медаль Макса Планка, 1929 г. W

поляризации, например, базис $(1, 0)$, $(0, 1)$ соответствует линейным поляризациям по x и по y , а базис $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, i)$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i)$ — круговым поляризациям по и против часовой стрелки.

Средняя по периоду плотность энергии в электромагнитной волне пропорциональна

$$|\mathbf{A}|^2 = (\mathbf{A}, \mathbf{A}^*) = (\operatorname{Re} \mathbf{A})^2 + (\operatorname{Im} \mathbf{A})^2.$$

Здесь и далее звёздочка $*$ обозначает комплексное сопряжение: $z^* = (\operatorname{Re} z + i \operatorname{Im} z)^* = \operatorname{Re} z - i \operatorname{Im} z$.

Однако в квантовой теории электромагнитная волна состоит из отдельных частиц-фотонов, энергией по $\hbar\omega$ каждый. Таким образом, средняя плотность энергии в электромагнитной волне теперь соответствует средней плотности фотонов или, если фотонов мало, *вероятности* обнаружить фотон в единице объёма.

Электродинамика — теория линейная по электромагнитному полю, а значит линейная и по амплитуде электромагнитной волны. Это означает, что мы можем умножать амплитуды на комплексные числа, складывать их между собой и снова получать амплитуды (т.е. в линейной теории допустима линейная суперпозиция решений). Как в любой линейной теории, полезным инструментом исследования электромагнитных волн является разложение их по базису.

Комплексные амплитуды (но уже в пространстве разных размерностей) сохраняются и в квантовой теории, причём их линейность (принцип суперпозиции) оказывается основополагающим принципом.

Если мы разложим $\mathbf{A}$ по какому-то ортонормированному базису, то каждому базисному вектору $\mathbf{e}_i$ соответствует своя поляризация

$$\mathbf{A} = A_1 \mathbf{e}_1 + A_2 \mathbf{e}_2, \quad |\mathbf{A}|^2 = |A_1|^2 + |A_2|^2.$$

При этом $|A|^2$ — суммарная плотность фотонов, а $|A_i|^2$ — плотность фотонов с поляризацией i . Например, если у нас есть всего один фотон с поляризацией по часовой стрелке (далее мы нормируем амплитуды на 1 фотон), т.е. $\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, i)$, то мы с вероятностью $\frac{1}{2}$ обнаружим фотон поляризованный по x (прошедший через ориентированный по x поляризатор), т.е. обнаружим $\mathbf{A} = (1, 0)$; с вероятностью $\frac{1}{2}$ обнаружим фотон поляризованный по y , т.е. обнаружим $\mathbf{A} = (0, 1)$, но с вероятностью 0 обнаружим фотон поляризованный против часовой стрелки, т.е. $\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i)$.

В общем случае, фотон с поляризацией A обнаруживается в состоянии B с вероятностью $|(A, B^*)|^2 = |A_1 B_1^* + A_2 B_2^*|^2$. Эта формула может быть легко проверена для плотности энергии произвольно (эллиптически) поляризованного света, проходящего через поляризатор.

Если в одной области пространства накладываются две электромагнитные волны, то можно выделить два случая. Если частоты волн совпадают, а их фазы достаточно устойчивы, то происходит когерентная интерференция, т.е. складываются не плотности энергии (плотности вероятности найти фотон), а комплексные амплитуды. Если же волны некогерентные, т.е. если частоты различаются, или фазы скачут, то интерференционная картина усредняется по случайному сдвигу фазы, и складывать следует плотности энергии (плотности вероятности найти фотон).

2.7.3 Преобразование Фурье и соотношения неопределённостей

Волновой вектор точно определён только для монохроматической волны, заполняющей всё пространство. Аналогично, частота точно определена только для

бесконечнодлительного гармонического колебания. Преобразование Фурье позволяет раскладывать любые функции на плоские волны:

$$f(t, \mathbf{r}) = f(r^i) = \int d\omega d\mathbf{k} a(\omega, \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}.$$

Для функции одной переменной:

$$f(t) = \int d\omega a(\omega) e^{-i\omega t}.$$

Поскольку для линейных (подчиняющихся принципу суперпозиции) волн энергия квадратична по амплитуде, естественно выбирать квадратичный вес $|a|^2$, при усреднении по частоте (волновому вектору), а также $|f|^2$ при усреднении по координате (четырёхмерному радиус-вектору $r^i = (t, \mathbf{r})$).

Средние координаты для волнового пакета $f(t, \mathbf{r})$:

$$r_0^i = \frac{1}{C} \int dt d\mathbf{r} r^i |f(r^i)|^2, \quad C = \int dt d\mathbf{r} |f(r^i)|^2.$$

Средний 4-волновой вектор для волнового пакета $f(t, \mathbf{r})$:

$$k_0^i = \frac{1}{C'} \int d\omega d\mathbf{k} k^i |a(k^i)|^2, \quad C' = \int d\omega d\mathbf{k} |a(k^i)|^2 = \frac{C}{(2\pi)^4}.$$

Если $a(\omega, \mathbf{k})$ достаточно быстро спадает при выходе из достаточно малой области, то волновой вектор и волновое число «почти определены».

В качестве меры ширины волнового пакета удобно взять среднеквадратичные отклонения,⁸ например, для ширины пакета по времени и частоте мы имеем (далее рассуждения для одной координаты)

$$(\delta t)^2 = \frac{1}{C} \int dt d\mathbf{r} (t - t_0)^2 |f(r^i)|^2,$$

$$(\delta \omega)^2 = \frac{1}{C'} \int d\omega d\mathbf{k} (\omega - \omega_0)^2 |a(k^i)|^2.$$

Если взять «почти монохроматическую волну» $f(t)$ в виде волнового пакета со средним положением t_0 и шириной δt «вырезанного» из волны с частотой ω_0 , то обрезание волнового пакета приводит к уширению спектральной линии. Обрезание описывается одним параметром δt с размерностью времени. После преобразования Фурье мы обнаружим волновой пакет $a(\omega)$ со (средней) частотой ω_0 и шириной $\delta \omega$. При $\delta t \rightarrow \infty$ $\delta \omega \rightarrow 0$. Таким образом, из соображений размерности $\delta \omega \sim \frac{1}{\delta t}$. Коэффициент пропорциональности зависит от способа вырезания волнового пакета, однако он не может быть сколь угодно мал, поскольку $\delta \omega = 0$ только для монохроматической волны неограниченной длины. Таким образом,

$$\delta t \cdot \delta \omega \geq \text{const} \sim 1.$$

Как мы выясним ниже, в разделе 7.2 константа в данном неравенстве равна $\frac{1}{2}$.

⁸На самом деле, возможны разные определения неопределённостей координат и импульсов, которым соответствуют разные, не сводимые друг к другу, точные формулировки соотношения неопределённостей Гейзенберга.

С учётом того, что в квантовой механике круговая частота и волновой вектор представляют собой энергию и импульс выраженные в других единицах (2.1), мы получаем для времени и частоты (энергии) соотношение неопределённостей

$$\delta t \cdot \delta \omega \geq \frac{1}{2} \quad \Leftrightarrow \quad \delta t \cdot \delta E \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.2)$$

Аналогичное соотношение неопределённостей для координаты и соответствующей компоненты волнового вектора (импульса):

$$\delta x \cdot \delta k_x \geq \frac{1}{2} \quad \Leftrightarrow \quad \delta x \cdot \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Представленные в таком виде соотношения неопределённостей не содержат в себе ничего специфически квантового, а лишь демонстрируют некоторые свойства преобразований Фурье. В точности такие же *соотношения между длиной волнового пакета и шириной спектральной линии* мы можем использовать, например, в акустике или электродинамике. «Неопределённость» здесь не связана с какой-либо процедурой измерения, а является свойством самой системы.

2.7.4 Микроскоп Гайзенберга и соотношение неопределённостей

Мысленный эксперимент «микроскоп Гайзенберга» позволит нам вывести соотношение неопределённостей. Это соотношение будет очень похоже на рассмотренные выше в разделе 2.7.3 «Преобразование Фурье и соотношения неопределённостей», но будет иметь другой физический смысл: будет оценен *разброс при последовательном измерении координаты и импульса для одной и той же системы*.

При измерении координаты частицы с помощью света длины волны $\lambda \sim \frac{1}{k}$ наилучшая точность измерения координаты (наилучшая разрешающая способность микроскопа) $\delta x \sim \frac{1}{k} \sim \lambda$.

При этом на частице должен рассеяться по крайней мере один фотон, который передаст импульс порядка $\delta p_x \sim \hbar k$. Рассеяние на точечной частице даст сферическую волну, т.е. фотон может рассеяться в произвольном направлении. Если рассеянный фотон попадёт в объектив микроскопа, то, в какую бы сторону он не летел, микроскоп направит его на датчик. *Определить конкретную траекторию фотона в микроскопе принципиально невозможно.*⁹ В предельном случае для попадания в объектив микроскопа фотону достаточно отлететь в нужное полупространство. Поскольку направление рассеяния фотона неизвестно, переданный частице импульс не может быть определён, т.е. измерение координаты размывает значение импульса не менее чем на δp_x .

Таким образом, для произведения неточностей получаем:

$$\delta x \cdot \delta p_x \geq c \hbar, \quad c = \text{const} \sim 1.$$



Рис. 2.11: Вернер Гайзенберг (примерно 1926-1927 год) (1901–1976) W

⁹Условие интерференции, см. ниже раздел 3.1 «Вероятности и амплитуды вероятности».

Глава 3

Понятийные основы квантовой теории

За что ставятся оценки:

5 — знает и *понимает*,

4 — знает, но *не* понимает,

3 — *не* знает и *не* понимает,

2 — *не* знает, *не* понимает, да ещё и *раздражает*.

Преподавательский фольклор

Нетерпеливый читатель может пропустить и эту главу, как и предыдущие главы. Здесь всё ещё нет последовательного изложения квантовой механики. Будут лишь даны некоторые ключевые *идеи*, следствиями которых можно пользоваться по-обезьяньи без понимания. Однако, если квантовая теория и в самом деле нужна читателю, то лучше запоминать не столько формулы, сколько *идеи*. Если же вы хотите не просто считать, а ещё и понимать, то лучше с этими идеями не только ознакомиться, но и обдумать их ещё раз, уже познакомившись с аппаратом квантовой теории.

3.1 Вероятности и амплитуды вероятности

Квантовая механика принципиально отличается от классической. Это различие состоит вовсе не в наличии в квантовой механике вероятностей, поскольку и классическая механика может быть переформулирована так, что вероятности там появятся. Мы можем описывать поведение классической системы как эволюцию облака вероятностей в фазовом пространстве (в пространстве координат и импульсов), причём для неустойчивых систем на больших временах на более подробное описание мы рассчитывать не можем.

На взгляд автора, главным отличием квантовой теории является то, что помимо вероятностей p в ней появляются *амплитуды вероятности* A — комплексные числа, квадрат модуля которых задаёт вероятность (или плотность вероятности).

$$p = |A|^2 = (\operatorname{Re} A)^2 + (\operatorname{Im} A)^2 = A^* A. \quad (3.1)$$

Таким образом, вероятность взаимнооднозначно определяется *модулем амплитуды вероятности*, тогда как **фаза амплитуды вероятности** оказывается тем существенным элементом квантовой теории, который полностью теряется в классике.

Волновая функция даёт максимально полное описание квантовой системы, но она задаёт только лишь амплитуды вероятностей для всевозможных результатов измерений. Мы можем считать, что аргументами волновой функции являются всевозможные результаты измерений некоторого набора величин (*полного набора независимых наблюдаемых*), а значения функции задают соответствующие амплитуды. Причём нет необходимости помещать в аргументы функции все возможные величины, надо ограничиться лишь теми, которые *одновременно измеримы*, т.е. такими, что измерение одной величины из набора не влияет на все остальные, но набор таких величин должен быть *полным*, т.е. таким, чтобы любая физическая величина, измеримая одновременно с аргументами волновой функции, выражалась через них.¹ Таким образом, понятие волновой функции сводится к понятию амплитуды вероятности.

Вероятности в классической механике обусловлены нашим незнанием точного состояния системы. В квантовой механике невозможно знать о системе больше, чем её волновая функция. Тем не менее, многое в поведении амплитуд вероятности можно понять по аналогии с поведением вероятностей.

В ряде случаев, когда в классике мы складывали или умножали вероятности, в квантовой механике надо аналогично складывать или умножать амплитуды вероятности.

Волновая функция аналогична распределению вероятностей, и подобно ему задаёт вероятность всех возможных исходов измерения некоторого набора величин, полностью задающего состояние системы. Т.е. если все эти величины *определены*, то состояние системы определяется однозначно. В классической механике других состояний систем и не бывает. В квантовой механике такие состояния образуют лишь базис в линейном пространстве состояний.

3.1.1 Сложение вероятностей и амплитуд

Если какое-то событие может произойти двумя различными способами, и мы знаем вероятность каждого из этих способов, то классическая вероятность события вычисляется как сумма вероятностей этих способов.

Если из начального состояния 1 классическая система попадает в конечное состояние 3 через промежуточное состояние 2 или 2', то мы можем записать:

$$P(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \text{ или } 1 \rightarrow 2' \rightarrow 3) = P(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3) + P(1 \rightarrow 2' \rightarrow 3). \quad (3.2)$$

Если конечный результат чуть-чуть различается и классическая система в одном случае в итоге попадает в состояние 3, а в другом в чуть-чуть отличное состояние 3', то вероятности по-прежнему складываются:

$$P(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \text{ или } 1 \rightarrow 2' \rightarrow 3') = P(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3) + P(1 \rightarrow 2' \rightarrow 3'). \quad (3.3)$$

¹Мы ещё вернёмся далее к обсуждению волновой функции.

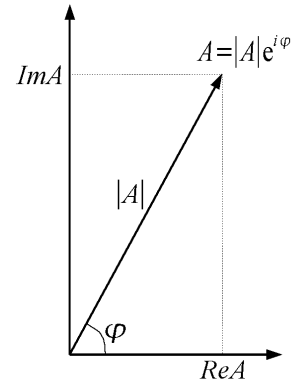


Рис. 3.1: $|A|^2$ — то, что было в классике, φ — квантовые эффекты.

Таким образом, в классике мы можем не различать похожие результаты 3 и 3' и произвольным образом огрублять конечный результат т.к. на вычислении вероятностей это не скажется.

В квантовой механике формулу (3.2), для случая *когда конечный результат в точности совпадает*, необходимо заменить аналогичной формулой для амплитуд

$$A_{(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \text{ или } 1 \rightarrow 2' \rightarrow 3)} = A_{(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3)} + A_{(1 \rightarrow 2' \rightarrow 3)}, \quad (3.4)$$

а формулу (3.3), для случая *когда конечный результат хотя бы чуть-чуть отличается*, следует оставить без изменений.

Возводя формулу (3.4) в квадрат получаем (для упрощения записи здесь $(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3)$ обозначается как a , а $(1 \rightarrow 2' \rightarrow 3)$ — как b)

$$\begin{aligned} p_{(a \text{ или } b)} &= |A_{(a \text{ или } b)}|^2 = \\ &= |A_a|^2 + |A_b|^2 + (A_a^* A_b + A_a A_b^*) = \\ &= |A_a|^2 + |A_b|^2 + 2|A_a||A_b| \cos(\varphi_a - \varphi_b) = \\ &= p_a + p_b + 2\sqrt{p_a p_b} \cos(\varphi_a - \varphi_b). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Здесь $\varphi_a = \arg A_a$, $\varphi_b = \arg A_b$ — фазы амплитуд вероятности. В третьей строчке формулы мы воспользовались теоремой косинусов.

Формула (3.5) отличается от (3.2) лишним членом, который называется *интерференционным членом*:

$$(A_a^* A_b + A_a A_b^*) = 2|A_a||A_b| \cos(\varphi_a - \varphi_b) = 2\sqrt{p_a p_b} \cos(\varphi_a - \varphi_b). \quad (3.6)$$

Интерференционный член, как правило, не является малой поправкой, он сравним по величине с классическими слагаемыми. В зависимости от *разности фаз* между амплитудами интерференционный член может быть положительным, отрицательным или нулём. Так если $|A_a| = |A_b|$, то квантовая вероятность $p_{(a \text{ или } b)} = 2|A_a|^2(1 + \cos(\varphi_a - \varphi_b))$ может меняться от нуля до удвоенной классической вероятности $4|A_a|^2$.

Почему мы не видим интерференционного члена в классических опытах? Это может происходить по одной из двух причин.

1. В *классических опытах* мы не можем зафиксировать фазы амплитуд вероятности, которые случайно меняются от опыта к опыту. В результате происходит усреднение по фазе, и интерференционный член исчезает. Если мы плохо различаем похожие, но не совпадающие состояния системы (как в классике), то мы вместо реальной интерференционной картины наблюдаем усреднённую (сглаженную), а поскольку интерференционный член оказывается быстро осциллирующим, при усреднении по нескольким похожим результатам он может исчезнуть.

2. Другая причина исчезновения интерференционного члена — наблюдение (неконтролируемое взаимодействие системы с окружением, возможно произвольное), которое в принципе позволяет определить как именно система прошла из начального состояния в конечное. Таким образом, попадание системы в одну точку разными путями будет различимым, поскольку информация о пути либо известна, либо «записана» в окружении. А для различимых событий мы должны складывать не амплитуды, а вероятности, т.е. интерференционный член исчезает.

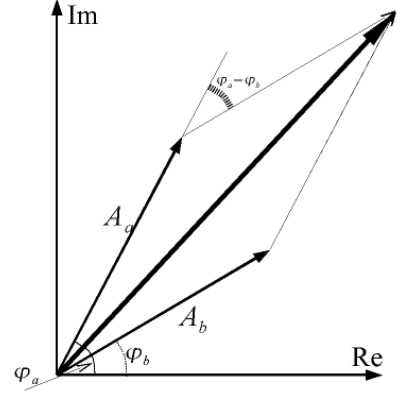


Рис. 3.2: Сложение амплитуд вероятности.

3.1.2 Умножение вероятностей и амплитуд

Если событие происходит «в два приёма», т.е. если нас интересует вероятность того, что система из состояния 1 перейдёт сначала в состояние 2, а потом в состояние 3, то в классической теории вероятности нам надо умножить вероятность перехода $1 \rightarrow 2$ на вероятность перехода $2 \rightarrow 3$.

$$P_{(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3)} = P_{(1 \rightarrow 2)} P_{(2 \rightarrow 3)}. \quad (3.7)$$

В квантовой теории данная формула переносится на амплитуды вероятности

$$A_{(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3)} = A_{(1 \rightarrow 2)} A_{(2 \rightarrow 3)}. \quad (3.8)$$

Подобно тому, как вероятность $p_{(1 \rightarrow 2)}$ того, что после 1 произойдёт 2, называют *условной вероятностью*, амплитуду $A_{(1 \rightarrow 2)}$ естественно назвать *условной амплитудой вероятности*.

Взяв абсолютные величины от левой и правой частей формулы (3.8) и возведя их в квадрат мы получим в точности формулу (3.7). Поэтому может возникнуть вопрос о том, получили ли мы что-нибудь новое при замене формулы для вероятности на формулу для амплитуд. Однако вероятности не содержат информации о фазах, поэтому разница между умножением вероятностей и амплитуд станет важной, если амплитуду, полученную как произведение, нам придётся складывать с какой-то другой амплитудой.

3.1.3 Объединение независимых подсистем

Ещё один случай умножения вероятностей — объединение независимых подсистем. Пусть одна подсистема описывается распределением $\varrho_1(x)$, а вторая — $\varrho_2(y)$, тогда совместное распределение задаётся их произведением. Такое произведение называется *тензорным произведением*

$$\varrho(x, y) = \varrho_1(x) \cdot \varrho_2(y), \quad \Leftrightarrow \quad \varrho = \varrho_1 \otimes \varrho_2$$

Аналогично если одна подсистема описывается волновой функцией $\psi_1(x)$, а вторая — $\psi_2(y)$, то совместная волновая функция задаётся их тензорным произведением:

$$\psi(x, y) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \quad \Leftrightarrow \quad \psi = \psi_1 \otimes \psi_2.$$

Ниже мы ещё вернёмся к обсуждению описания состояния сложной системы и её подсистем.

3.1.4 Распределения вероятностей и волновые функции при измерении

Сейчас мы приведём правила изменения распределения вероятностей при классическом измерении и волновой функции при квантовом.

В обоих случаях в результате измерения из плотности вероятности (как функции измеряемых величин) или волновой функции (амплитуды вероятности, как функции измеряемых величин) вырезается кусок, который соответствует результату измерения.

Описания обоих процедур ведётся почти одинаковыми словами. Различия в описаниях выделяются жирным шрифтом.

Классический случай

Пусть **классическая** система находится **в одном из** состояний, нумеруемых параметром x , и нам задано **распределение** вероятностей, т.е. если x дискретно, то мы знаем вероятность p_x каждого значения x , а если x непрерывно, то мы знаем плотность вероятности $\varrho(x)$, как функцию от x . При этом суммарная вероятность, получаемая суммированием (интегрированием) вероятности (плотности вероятности) по всем значениям x равняется 1:²

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(x) dx = 1.$$

И пусть мы провели над этой **классической** системой измерение, которое установило, что x принадлежит определённому отрезку $x \in [a, b]$. Вероятность, что измерение даст такой результат, составляет

$$p_{[a,b]} = \int_a^b \varrho(x) dx.$$

²В этом разделе мы будем считать, что переменная x непрерывна, т.е. для любого конкретного значения x его вероятность равна нулю, хотя плотность вероятности может от нуля отличаться. Если есть некоторый дискретный набор W значений x , для которых вероятности конечны, то к соответствующим интегралам придётся добавлять суммы. Теперь суммарная вероятность будет задаваться так:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(x) dx + \sum_{x \in W} p_x = 1.$$

Мы можем упростить формулы для *классических* вероятностей избавившись от сумм, если воспользуемся δ -функцией Дирака. $\delta(x)$ — бесконечно узкий и бесконечно высокий пик, сидящий в нуле, такой, что интеграл от него равен 1. δ -функция — не настоящая функция, а *обобщённая*. Значение какой-либо обобщённой функции $f(x)$ в точке x_0 может быть не определено, но зато для всякой «достаточно хорошей» функции $\varphi(x)$ определён интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \varphi(x) dx.$$

Определением δ -функции является соотношение:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) \varphi(x) dx = \varphi(0).$$

Мы можем модифицировать распределение вероятностей так, чтобы оно также описывало вероятности дискретных событий:

$$\varrho_M(x) = \varrho(x) + \sum_{x_0 \in W} p_{x_0} \cdot \delta(x - x_0).$$

Теперь мы можем написать суммарную вероятность так:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varrho_M(x) dx = 1.$$

Следует заметить, что **данный** способ избавления от сумм не сработает для амплитуд вероятностей, т.к. для этого пришлось бы извлекать из δ -функций квадратный корень, а извлечение корня из обобщённых функций не определено.

Сразу после такого измерения **вероятность** (**плотность вероятности**) любого значения x вне заданного отрезка обратилась в нуль. Для точек внутри отрезка *отношения вероятностей* не изменились. Таким образом, из первоначального **распределения вероятностей** «вырезается» отрезок $[a, b]$, все **вероятности** вне его обнуляются, а все **вероятности** на этом отрезке делятся на $p_{[a,b]}$, чтобы суммарная вероятность нового распределения снова оказалась единицей.

Квантовый случай

Пусть квантовая система находится в *суперпозиции* состояний, нумеруемых параметром x , и нам заданы **амплитуды вероятностей**, т.е. если x дискретно, то **возведение амплитуды по модулю в квадрат** даёт вероятность каждого значения x , а если x непрерывно, то **возведение амплитуды по модулю в квадрат** даёт плотность вероятности как функцию от x . При этом суммарная вероятность, получаемая суммированием (интегрированием) вероятности (плотности вероятности) по всем значениям x , равняется 1.

И пусть мы провели над этой **квантовой** системой измерение, которое установило, что x принадлежит определённому отрезку $x \in [a, b]$. Вероятность, что измерение даст такой результат, составляет

$$p_{[a,b]} = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx.$$

Сразу после такого измерения **амплитуда вероятности** любого значения x вне заданного отрезка обратилась в нуль. Для точек внутри отрезка отношения **амплитуд вероятностей** не изменились. Таким образом, из первоначальной **волновой функции** «вырезается» отрезок $[a, b]$, все **амплитуды** вне его обнуляются, а все **амплитуды** на этом отрезке делятся на $\sqrt{p_{[a,b]}}$, чтобы суммарная вероятность нового распределения снова оказалась единицей.

Измерение и проектор

Операцию вырезания отрезка $[a, b]$ из волновой функции мы можем описать с помощью линейного оператора $\hat{P}_{[a,b]}$:

$$\hat{P}_{[a,b]}\psi(x) = I_{[a,b]}(x)\psi(x), \quad (3.9)$$

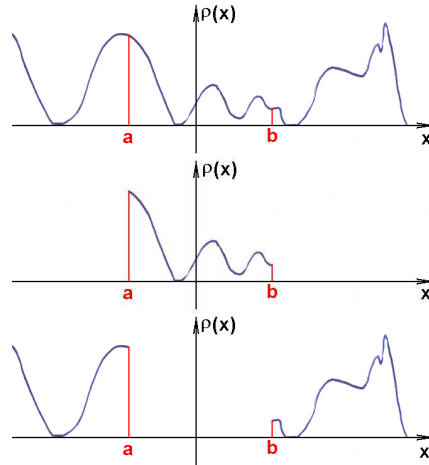


Рис. 3.3: Изменение распределения вероятностей при положительном и отрицательном результатах измерения.

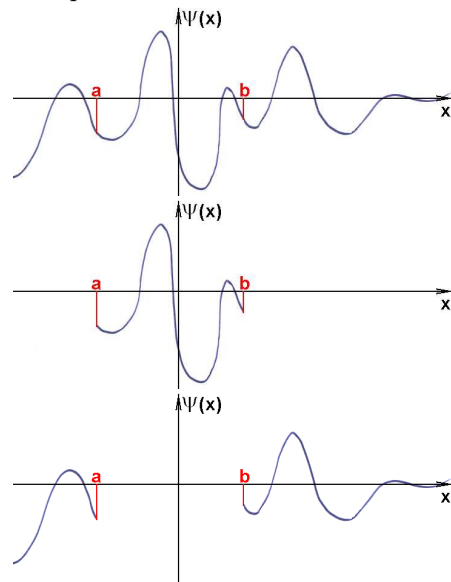


Рис. 3.4: Изменение волновой функции при положительном и отрицательном результатах измерения.

где I_W — характеристическая функция множества W

$$I_W(x) = \begin{cases} 1, & x \in W \\ 0, & x \notin W \end{cases}. \quad (3.10)$$

Оператор $\hat{P}_{[a,b]}$ является *проектором* (т.е. он проецирует все волновые функции на некоторое линейное подпространство волновых функций), что означает, что двукратное действие этого оператора даёт тот же результат, что и однократное

$$\hat{P}_{[a,b]}\hat{P}_{[a,b]}\psi(x) = I_{[a,b]}^2(x)\psi(x) = I_{[a,b]}(x)\psi(x) = \hat{P}_{[a,b]}\psi(x). \quad (3.11)$$

Определяя произведение операторов как оператор, действие которого на произвольную волновую функцию даёт тот же результат, что и последовательное действие (справа налево) всех сомножителей, мы можем записать определение проектора следующим образом:

$$\hat{P}^2 = \hat{P}. \quad (3.12)$$

В дальнейшем мы будем иметь дело и с другими линейными операторами, действующими на волновые функции, при этом очень многие физически осмысленные операторы окажутся связаны с проекторами.

3.1.5 Амплитуда при измерении и скалярное произведение

Пусть волновая функция $\Psi(n)$ задаёт амплитуду вероятности обнаружить систему во взаимоисключающих состояниях ϕ_n , нумеруемых дискретным параметром n . Состояния ϕ_n образуют *максимальный набор взаимоисключающих состояний*, т.е. если система находится в состоянии ϕ_n , то она не может быть найдена в состоянии ϕ_k ($k \neq n$), причём набор не может быть расширен.

Поскольку суммарная вероятность единица, следует положить условие нормировки на единицу:

$$\|\Psi\|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_n |\Psi(n)|^2 = 1.$$

Таким образом, у нас есть естественная операция взятия скалярного квадрата волновой функции. Имея операцию взятия скалярного квадрата мы можем ввести операцию взятия скалярного произведения:

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_n \Phi^*(n) \Psi(n).$$

Компонента волновой функции $\Psi(n)$ может быть записана как скалярное произведение функции Ψ на базисную функцию ϕ_n ($\phi_n(k) = \delta_{nk}$), которая также нормирована на единицу:

$$\Psi(n) = \langle \phi_n | \Psi \rangle = \langle \Psi | \phi_n \rangle^*, \quad \langle \phi_n | \phi_k \rangle = \delta_{nk} = \begin{cases} 1, & n = k \\ 0, & n \neq k \end{cases}.$$

Мы уже знаем физический смысл компоненты $\Psi(n)$ волновой функции, как амплитуды вероятности того, что система, находящаяся в состоянии Ψ , будет обнаружена в состоянии ϕ_n , и это позволяет нам установить физический смысл скалярного произведения двух нормированных на единицу волновых функций. Аргументы скалярного произведения равноправны (с точностью до комплексного сопряжения), так что $\Psi^*(n) = \langle \Psi | \phi_n \rangle$ — амплитуда вероятности обратного процесса,

т.е. амплитуда того, что система, находившаяся в состоянии ϕ_n будет найдена в состоянии Ψ .

Мы можем физически интерпретировать формулу для скалярного умножения волновых функций в терминах умножения и сложения амплитуд вероятности.

Пусть Ψ определяет начальное состояние системы, а Φ — конечное ($\|\Psi\|^2 = \|\Phi\|^2 = 1$). Мы рассматриваем измерение, которое должно ответить на вопрос «Находится ли система в состоянии Φ ?» Прыжок в состояние Φ мы будем рассматривать как «благоприятный» результат измерения.

Можно считать, что переход из состояния Ψ в состояние Φ осуществляется через любое промежуточное состояние ϕ_n , причём определить через какое именно из состояний ϕ_n прошла система в принципе невозможно.

Амплитуда перехода из Ψ в Φ через ϕ_n задаётся как произведение амплитуд перехода из Ψ в ϕ_n и из ϕ_n в Φ :

$$A_{\Phi \leftarrow \phi_n \leftarrow \Psi} = \underbrace{\Phi^*(n)}_{\Phi \leftarrow \phi_n} \underbrace{\Psi(n)}_{\phi_n \leftarrow \Psi}.$$

Суммарная амплитуда перехода задаётся суммой (интегралом, в случае непрерывного спектра по n) по всем промежуточным состояниям ϕ_n :

$$A_{\Phi \leftarrow \Psi} = \sum_n \underbrace{\Phi^*(n) \Psi(n)}_{\Phi \leftarrow \phi_n \leftarrow \Psi}. \quad (3.13)$$

Вычисление амплитуды перехода может быть представлено рисунком 3.5, который по существу является другой записью формулы (3.13).

Таким образом, оказывается, что для волновых функций имеется физически осмысленное скалярное произведение, дающее для нормированных на единицу волновых функций амплитуду вероятности перехода из одного состояния в другое при измерении. Сама структура формулы скалярного произведения имеет физический смысл, показывая, что переход осуществляется через все возможные взаимоисключающие промежуточные состояния.

Наборы амплитуд $\Psi(n)$ и $\Phi(n)$ можно рассматривать как компоненты комплексных векторов. Тогда замена базиса будет соответствовать замене набора взаимоисключающих состояний ϕ_k (базиса) новым набором состояний (базисом) ϕ'_k , который состоит из *суперпозиций* (линейных комбинаций) состояний базиса. Разложение по новому базису будет ничуть не хуже, чем разложение по старому, если новый базис также будет *ортонормированным*, т.е. если скалярное произведение (3.13) будет в нём задаваться прежней формулой.

Оказывается естественным смотреть на волновые функции, как на комплексные векторы (возможно бесконечномерные). Аргументы волновых функций при этом нумеруют компоненты вектора в конкретном базисе, а значение волновой функции в точке выступает как компонента вектора.

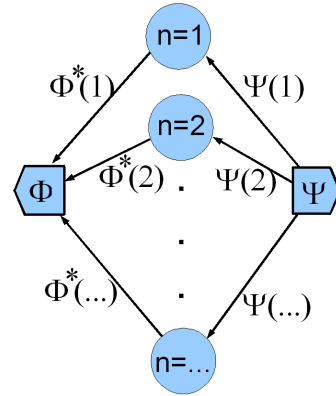


Рис. 3.5: Переход от Ψ в Φ совершается через все возможные взаимоисключающие состояния n по стрелкам с соответствующими амплитудами согласно (3.13).

3.2 Возможно всё, что может произойти (ф*)

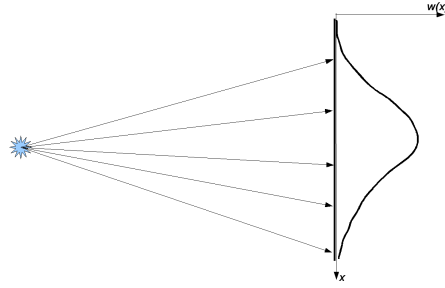


Рис. 3.6: Частицы беспрепятственно падают на экран.

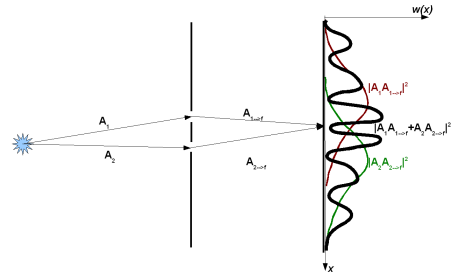


Рис. 3.7: Интерференция на 2-х щелях.

Представим себе следующий эксперимент, в котором частицы вылетают из источника и попадают на фотопластинку, на которой возникает интерференционная картина. Пусть вначале между источником и фотопластинкой нет никаких препятствий (Рис.3.6). Теперь поместим между фотопластинкой и источником экран с двумя щелями (Рис.3.7). Чтобы получить амплитуду вероятности попадания частицы в некоторую точку пластинки, мы должны сложить амплитуды попадания частицы в заданную точку двумя различными способами: через первую щель и через вторую. Каждая из этих амплитуд вычисляется как произведение амплитуды попадания в соответствующую щель и условной амплитуды попадания из этой щели в заданную точку пластинки

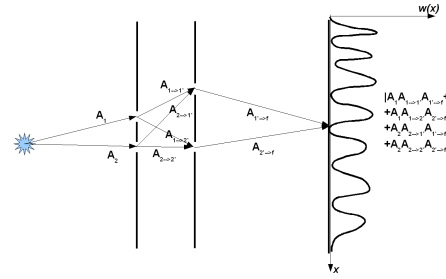


Рис. 3.8: Интерференция на 2-х ширмах с 2-мя щелях каждая.

$$A_f = A_1 A_{1 \rightarrow f} + A_2 A_{2 \rightarrow f}. \quad (3.14)$$

Поставим перед экраном с двумя щелями ещё один экран с двумя щелями (Рис.3.8). Теперь амплитуда попадания частицы в щели 1 и 2 определяется по аналогичным формулам

$$A_1 = A_{1'} A_{1' \rightarrow 1} + A_{2'} A_{2' \rightarrow 1}, \quad A_2 = A_{1'} A_{1' \rightarrow 2} + A_{2'} A_{2' \rightarrow 2}. \quad (3.15)$$

Если подставить эти формулы в (3.14), то получится сумма по всем комбинациям щелей, через которые может пройти частица по пути к фотопластинке

$$A_f = A_{1'} A_{1' \rightarrow 1} A_{1 \rightarrow f} + A_{2'} A_{2' \rightarrow 1} A_{1 \rightarrow f} + A_{1'} A_{1' \rightarrow 2} A_{2 \rightarrow f} + A_{2'} A_{2' \rightarrow 2} A_{2 \rightarrow f}. \quad (3.16)$$

Будем и далее добавлять между источником и фотопластинкой всё новые и новые экраны, а в экранах будем делать всё новые и новые щели. Амплитуда вероятности попадания частицы в заданную точку фотопластинки даётся всё более и более громоздкими суммами по всем возможным комбинациям щелей, через которые может пройти частица, а каждый член суммы задаётся длинным произведением условных амплитуд вероятности попадания частицы из одной точки в другую.

В пределе мы можем поставить экраны всюду между источником и фотопластинкой, а в каждом экране сделать щели тоже всюду (Рис.3.9). Это соответствует тому, что никаких экранов между источником и пластинкой больше нет, и мы вернулись к первоначальной ситуации. Зато теперь мы понимаем, что амплитуда попадания частицы из одной точки в другую может быть вычислена суммированием (интегрированием) амплитуд по всем возможным траекториям, по которым частица могла бы пройти. При формализации этих качественных рассуждений мы получим метод фейнмановских интегралов по траекториям, широко применяемый в современной квантовой теории.

Амплитуда вероятности задаётся как экспонента от действия вдоль траектории

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} L(x, \dot{x}) dt\right). \quad (3.17)$$

Амплитуда быстро колеблется при переходе от траектории к траектории, поэтому вклад большинства траекторий взаимно уничтожается. Основной вклад, как правило, дают те траектории, около которых эти колебания замедляются, т.е. те траектории, для которых действие $S[x(t)]$ при малой вариации траектории $\delta x(t)$ меняется мало, т.е. для траекторий, удовлетворяющих условию

$$\delta S[x(t)] = S[x(t) + \delta x(t)] - S[x(t)] + o(\delta x) = \left. \frac{\partial}{\partial \varepsilon} S[x(t) + \varepsilon \cdot \delta x(t)] \right|_{\varepsilon=0} = 0, \quad \forall \delta x(t). \quad (3.18)$$

В этом случае вклады соседних траекторий складываются с одинаковой фазой и усиливают друг друга. Условие (3.18) совпадает с принципом экстремального действия в теоретической механике, который, таким образом, в некотором смысле «выводится» из квантовой механики.

При суммировании амплитуд свой вклад вносят и траектории, невозможные с классической точки зрения, например в рассматриваемом выше примере мы учитывали траектории, на которых частица сама собой разворачивается в пустом пространстве, нарушая тем самым закон сохранения импульса. Следует учитывать и траектории, для прохождения которых у системы не хватает энергии. С этим связан *туннельный эффект*, позволяющий частице с некоторой вероятностью проходить через потенциальный барьер, для преодоления которого у неё недостаточно энергии.

Метод интегралов по путям естественно обобщается на процессы, в ходе которых частицы могут рождаться, уничтожаться и превращаться друг в друга. В

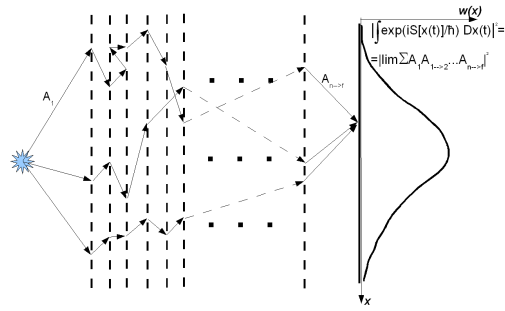


Рис. 3.9: Снова, как в оптике мы можем считать, что частица распространяется по всем траекториям одновременно, а амплитуда вероятности задаётся как сумма (точнее интеграл) по всем возможным траекториям.

этом случае надо дополнительно просуммировать по всем возможным процессам взаимопревращений частиц. Так, например, для описания рассеяния электрона на электроне надо суммировать амплитуды процессов на рис.3.10.

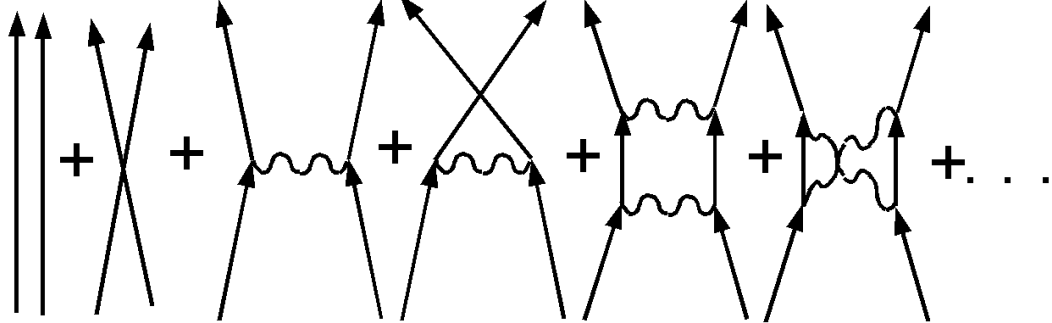


Рис. 3.10: Рассеяние электрона на электроне определяется как суперпозиция следующих процессов: электроны свободно движутся; электроны свободно движутся, но мы их перепутали (поскольку электроны принципиально неразличимы надо суммировать амплитуды, а не вероятности), электроны обменялись одним виртуальным фотоном (для которого энергия и импульс связаны «неправильным образом»), электроны обменялись одним виртуальным фотоном и перепутались, электроны обменялись сперва одним фотоном, а потом вторым, электроны испустили по фотону, и каждый поглотил «чужой» фотон, и т.д.

(**) Диаграммы на рис.3.10 являются на самом деле формулами. Каждая линия изображает распространение частицы между начальным и конечным состоянием всеми возможными способами. Интеграл по траекториям, соответствующий одной такой линии (*пропагатор*) мы можем вычислить один раз, а далее использовать готовое выражение. После этого вычисление амплитуды процесса будет сводиться к суммированию всех возможных диаграмм, в которых имеются два начальных электрона, два конечных, а все вершины имеют вид как на рис.3.11.³

Такие рисунки и соответствующие им амплитуды называются диаграммами Фейнмана. Здесь ровные линии со стрелками обозначают электроны и позитроны, а волнистые — фотоны. Всевозможных промежуточных процессов бесконечно много, но, как правило (в хороших теориях), хорошее приближение получается суммированием первых самых простых диаграмм Фейнмана. Подобный набор картинок, изображающих протекание процесса всеми возможными способами задаёт для этого процесса ряд теории возмущений, причём степень малости вклада каждой диаграммы определяется числом вершин (каждая вершина — множитель).

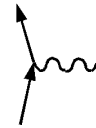


Рис. 3.11: Вершина для взаимодействия электрона с электромагнитным полем.



Рис. 3.12: Ричард Филлипс Фейнман (1918–1988)

³Поскольку здесь важна идея вычисления амплитуды, как суммы амплитуд всех возможных процессов, мы не останавливаемся на деталях диаграммной техники.

3.2.1 Большое в малом (Ф*)

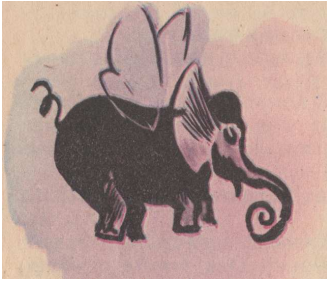


Рис. 3.13: Зазеркальный слон.

Конечно, это были совсем не пчелы; по правде говоря, это были слоны, в чем Алиса очень скоро убедилась.

Льюис Кэрролл, «Алиса в Зазеркалье»^a

^aРисунки слона и бегемотки художника И.И. Казаковой воспроизведены по изданию Льюис Кэрролл «Приключения Алисы в стране чудес; Алиса в Зазеркалье», Петрозаводск: Карелия, 1979.

Мы можем придти к следующему общепризнанному философскому заключению. В квантовой системе, как правило, может произойти всё, что не запрещено законами сохранения, хотя и с различными амплитудами вероятности. Так, если мы столкнём на ускорителе две частицы с энергией, достаточной для рождения зелёного слоника, то с некоторой ненулевой вероятностью зелёный слоник возникнет (хотя эта вероятность будет заметно меньше, чем вероятность самопроизвольной сборки слоника из отдельных атомов в результате броуновского движения, а среднее время ожидания такого события на много порядков превысит возраст Вселенной). Но даже если энергия нашего ускорителя недостаточна для рождения зелёных слонов, то в процессе столкновения двух частиц зелёный слоник может возникнуть в промежуточном состоянии, чтобы потом распасться (аналогично прохождению частицы при туннельном эффекте через потенциальный барьер, высота которого превышает энергию частицы). Правда существовать такой виртуальный слоник сможет очень короткое время, определяемое соотношением неопределённости

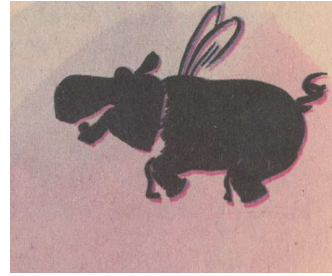


Рис. 3.14:

— Взгляни-ка на то облачко, ... — Это вьются *Бегемотки*. ...
— А что они едят? — снова спросила Алиса.
— Мелкую рыбёшку и лягушек! ...
— А если рыбок не будет? ...
— Тогда они, конечно, умрут, ...
— И часто так бывает?
— Всегда, ...

Льюис Кэрролл, «Алиса в зазеркалье»
Как и бегемоткам, виртуальным частицам не хватает энергии, чтобы существовать, и они всегда распадаются.

$$\delta E \cdot \delta t \sim \hbar, \quad (3.19)$$

где δE — энергия, которой нам не хватает, чтобы создать слоника, δt — время его существования, а $\hbar$ — постоянная Планка. Хотя вклад процессов с участием виртуальных слоников в рассеяние элементарных частиц исчезающе мал, но другие, не столь тяжёлые, объекты действительно начинают заметно (измеримо) влиять на жизнь элементарных частиц на энергиях много меньших, чем энергия, необходимая для их рождения.

Так, например, при β -распаде свободного нейтрона (см. рис.3.15⁴), он испускает виртуальный калибровочный W^- бозон, который тяжелее нейтрона в 80 раз,

⁴ Сплошная стрелка — фермион (длинная — барион, короткая — лептон), прозрачная стрелка — заряд. Для античастицы сплошная стрелка рисуется на заднем конце. Для заряженной частицы прозрачная стрелка рисуется на переднем конце для положительного заряда, и на заднем — для отрицательного. Непрерывность стрелок каждого типа позволяют проследить сохранение электрического заряда, барионного и лептонного квантовых чисел.

и энергии на образование которого у нейтрона «по-честному» нет. В процессе испускания W^- нейтрон n превращается в протон p (который лишь чуть-чуть легче нейтрона), а W^- очень быстро распадается на электрон e^- и электронное антинейтрино $\bar{\nu}_e$. Поскольку для настоящего рождения W^- бозона не хватает очень большого количества энергии, время существования W^- крайне мало, а время жизни свободного нейтрона очень велико — почти 15 минут.⁵

Принцип «возможно всё, что разрешено законами сохранения» «объясняет» нестабильность всех частиц, которым есть куда распадаться. Нейтрону энергетически выгодно распасться на протон, электрон и электронное антинейтрино, никакие законы сохранения ему этого не запрещают, вот он это и делает.

Протон, конечно, тоже может испустить виртуальный W^+ и превратиться в нейтрон, с дальнейшим распадом $W^+ \rightarrow \bar{e}\nu_e$ вот только для того, чтобы нейтрон, позитрон и нейтрино стали реальными частицами им не хватает энергии, а потому им надо быстро-быстро (за время, отводимое соотношением неопределённости) собраться обратно в протон и сделать вид, что всё так и было. (Как показывает квантовая теория поля, подобные процессы действительно влияют на свойства элементарных частиц.)

Аналогично все фермионы второго и третьего поколения могут (через слабое взаимодействие) превратиться в фермионы первого поколения (которым дальше распадаться некуда), и поэтому они так делают.

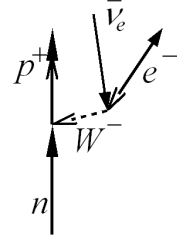


Рис. 3.15: Распад нейтрона. Изображена диаграмма, дающая главный вклад в амплитуду процесса. Виртуальный W^- выступает в роли бегомочки с Рис.3.14.

⁵Внутри стабильного атомного ядра условия иные, и нейтрон может жить неограниченно долго.

Глава 4

Математические понятия квантовой теории

... между математическими понятиями подчас возникают совершенно неожиданные связи и ... именно эти связи позволяют нам удивительно точно и адекватно описывать различные явления природы. ... в силу последнего обстоятельства (поскольку мы не понимаем причин, делающих математические понятия столь эффективными) мы не можем утверждать, является ли теория, сформулированная на языке этих понятий, единственно возможной.

Юджин Вигнер, «Непостижимая эффективность математики в естественных науках»

В этой главе вводятся основные математические понятия, на языке которых квантовую механику удобно излагать и понимать. Попутно вводимые понятия обсуждаются с разных точек зрения: различные обозначения, связь между понятиями, физический смысл, применение, аналогии с простейшими случаями (которые, вероятно, известны читателю), отличия от таких простейших случаев и природа этих отличий. . .

Математический аппарат вводится с запасом (хотя это и не единственная математическая глава в книге), так что при первом чтении настоятельно рекомендуется не пытаться изучить всё, а пропуская непонятные места (особенно помеченные звёздочками) побыстрее перейти в главе 5 «Принципы квантовой механики».

4.1 Пространство волновых функций

4.1.1 Функцией каких переменных является волновая функция?

Волновая функция может зависеть от времени, но эту зависимость мы пока не рассматриваем, а берём систему в фиксированный момент времени.

Распределение вероятностей для классической механической системы можно записать как функцию от координат и импульсов всех входящих в систему частиц $\varrho(x, p)$, т.е. если вспомнить терминологию теоретической механики, как функцию от точки *фазового пространства*¹.

¹Точка фазового пространства задаётся значениями всех обобщённых координат и импульсов

В квантовой механике мы не можем одновременно измерить координату и соответствующий этой координате импульс. Аргументом волновой функции должен быть *максимальный набор одновременно измеримых величин*, поэтому волновая функция не может зависеть одновременно от всех координат и импульсов.

Волновая функция может быть представлена как функция от всех координат всех частиц системы², т.е. если вспомнить терминологию теоретической механики, как функцию от точки *конфигурационного пространства*³.

Впрочем, задание волновой функции как функции на конфигурационном пространстве — *координатное представление* — это лишь одно из возможных представлений. Мы можем, например, задать волновую функцию как функцию на пространстве импульсов — *импульсное представление* (аргументы — все импульсы, всех частиц системы) получается из координатного представления преобразованием Фурье. Число всевозможных представлений волновой функции бесконечно, подобно тому, как бесконечно число базисов, по которым можно раскладывать векторы. Это сравнение не случайно. Далее мы будем рассматривать волновые функции как векторы.

Важно отметить, что *волновая функция описывает не отдельную частицу, а систему в целом*. Если мы имеем систему из 10 частиц, то она описывается не 10 волновыми функциями, от 3 переменных каждая, а одной волновой функцией, от 30 переменных (что гораздо сложнее для вычислений). Действительно, информация, необходимая для описания системы, растёт с числом частиц не как арифметическая прогрессия, как было в классической механике, а как геометрическая.

(*) Если мы описываем одну частицу в трёхмерном пространстве, то для приближённого задания её состояния в классической механике надо задать $6 \cdot K$ цифр (3 координаты и 3 импульса, на каждое число считаем по K десятичных знаков), а в квантовой механике — $L^3 \cdot 2K$ цифр (по K десятичных знаков для вещественной и мнимой части каждого из значений волновой функции в L^3 узлов решётки $L \times L \times L$). Если мы увеличиваем число частиц в классической задаче, то число необходимых для описания системы цифр растёт пропорционально числу частиц N , т.е. требуется $6N \cdot K$ цифр.

(*) Для квантовой системы число цифр оказывается $(L^3)^N \cdot K$. Даже для сравнительно небольшой решётки $100 \times 100 \times 100$, объём информации растёт в 10^6 раз при добавлении каждой новой частицы. По этой причине в квантовой механике систем многих частиц (таких как сколько-нибудь сложные атомы, молекулы, конденсированные среды и т.п.) для расчётов приходится использовать те или иные приближения, например, приближение среднего поля, когда рассматривается одностатичная задача, а влияние всех остальных частиц учитывается через эффективное поле, в котором движется частица⁴.

системы.

²Для бесспиновых частиц. Для частиц со спином полный набор одновременно измеримых переменных будет включать, например, проекции спинов всех частиц на какое-то направление, или какие-то другие спиновые переменные.

³Точка конфигурационного пространства задаётся заданием всех обобщённых координат системы.

⁴Само по себе уравнение Шрёдингера, описывающее эволюцию квантовой системы во времени, линейно, но в приближении среднего поля большое количество частиц описывается одной волновой функцией, которая описывает фон, на котором движется каждая из частиц. Из-за этого параметры уравнения начинают зависеть от волновой функции и уравнение становится нелинейным. Таким образом, если вы где-то встретили нелинейное уравнение Шрёдингера, то его написание,

Часто пишут, что для системы, состоящей из невзаимодействующих подсистем, можно определить отдельные волновые функции для этих подсистем. Понимать это надо следующим образом. Пусть полный набор одновременно измеримых переменных (x_1, x_2) состоит из переменных (x_1) , описывающих первую подсистему, и переменных (x_2) , описывающих вторую. Тогда волновую функцию всей системы можно записать как $\Psi_{12}(x_1, x_2)$. И если в некоторый момент времени

$$\Psi_{12}(x_1, x_2) = \psi_1(x_1) \cdot \psi_2(x_2), \quad (4.1)$$

то и в последующие моменты времени волновая функция системы записывается как произведение функций, описывающих подсистемы. Это аналогично поведению распределений вероятности в классической механике.

Запись (4.1) волновой функции системы через функции подсистемы называют *тензорным произведением* и записывают как

$$\Psi_{12} = \psi_1 \otimes \psi_2. \quad (4.2)$$

В общем случае (если $\psi_1 \neq \psi_2$) $\Psi_{12} \neq \Psi_{21} = \psi_2 \otimes \psi_1$, т.к. $\Psi_{21}(x_1, x_2) = \psi_2(x_1) \cdot \psi_1(x_2)$.

Однако в общем случае волновая функция Ψ_{12} уже не может быть записана в виде произведения, хотя она и представима в виде суммы (или интеграла) от нескольких таких произведений

$$\Psi_{12}(x_1, x_2) = \sum_i \psi_1^{(i)}(x_1) \cdot \psi_2^{(i)}(x_2) \quad \Leftrightarrow \quad \Psi_{12} = \sum_i \psi_1^{(i)} \otimes \psi_2^{(i)}. \quad (4.3)$$

На самом деле, в классической механике мы имеем похожий эффект, *если описываем систему не задавая координаты и импульсы всех частиц, а задавая распределение вероятностей* нахождения у системы того или иного набора координат и импульсов. Задание распределений вероятности для отдельных величин достаточно для предсказания вероятностей различных исходов любого процесса, только если эти величины независимы. Тогда

$$\rho_{12}(x_1, x_2) = \rho_1(x_1) \cdot \rho_2(x_2) \quad \Leftrightarrow \quad \rho_{12} = \rho_1 \otimes \rho_2. \quad (4.4)$$

Если между величинами есть вероятностные корреляции (т.е. знание одной величины изменяет распределение вероятностей другой), то распределение ρ_{12} уже не может быть записано в виде произведения, хотя оно и представимо в виде суммы (или интеграла) от нескольких таких произведений

$$\rho_{12}(x_1, x_2) = \sum_i \rho_1^{(i)}(x_1) \cdot \rho_2^{(i)}(x_2) \quad \Leftrightarrow \quad \rho_{12} = \sum_i \rho_1^{(i)} \otimes \rho_2^{(i)}. \quad (4.5)$$

Когда такое распределение вероятностей эволюционирует со временем, то независимые в начальный момент времени переменные, если они относятся к взаимодействующим друг с другом подсистемам, как правило становятся коррелированы, и распределение вероятностей (волновая функция), которое сначала записывалось в виде произведения (*факторизовалось*) уже не факторизуется. Это относится как к классическим, так и к квантовым системам.

Таким образом, описание составных систем в классической и квантовой механике производится аналогично, если мы используем в обоих случаях вероятности в большинстве случаев, вызвано не желанием обобщить одночастичное уравнение Шрёдингера, а желанием приближённо решить многочастичное уравнение.

(амплитуды вероятностей), однако в классической механике мы можем, хотя бы теоретически, обойтись без вероятностей, задавая точные значения координат и импульсов, а для квантовой механики задание волновой функции (т.е. амплитуд всевозможных взаимоисключающих исходов) является наиболее полным возможным описанием системы.

4.1.2 Волновая функция как вектор состояния

В разных разделах математики в слово «вектор» может вкладываться различный смысл, но обычно векторы — элементы некоторого линейного пространства, т.е. объекты для которых определено сложение ($\psi + \phi$, т.е. *суперпозиция* состояний) и умножение на число ($c\psi$). Очевидно, что для волновых функций, эти операции определены, причём поскольку сами волновые функции комплекснозначны, то естественно считать, что пространство волновых функций — комплексное векторное пространство.

Принято считать, что волновая функция определена с точностью до произвольного ненулевого комплексного множителя, т.е. волновые функции ψ и $c\psi$ (где $c \neq 0$ — произвольная комплексная константа) описывают одинаковые состояния квантовой системы.

Пространство волновых функций мы будем называть *пространством чистых состояний* системы, или просто *пространством состояний*. Сама волновая функция будет называться *вектором состояния*, или просто *состоянием* (точнее *чистым состоянием*, см. сноску 2).

Значения волновой функции при разных значениях аргументов при этом можно рассматривать как комплексные значения компонент вектора из пространства $\mathcal{H}$.

Если рассматривать вектор, как набор компонент, то можно сказать, что вектор определяет функцию, которая по номеру компоненты вектора возвращает значение этой компоненты. Для привычных нам конечномерных векторов компоненты нумеруются дискретным числом, которое пробегает конечный набор допустимых значений, а для волновых функций число компонент как правило бесконечно, причём переменная, нумерующая компоненты (аргумент волновой функции), может быть как дискретной, так и непрерывной (а также непрерывной на некоторых интервалах и дискретной на других).

На пространстве волновых функций нам нужно скалярное произведение, поскольку для единичных векторов оно имеет хороший физический смысл амплитуды вероятности (3.13) при измерении.

Для обычных векторов в комплексном n -мерном пространстве у математиков принято определять скалярное произведение следующим образом:

$$(\vec{a}, \vec{b}) = \sum_{k=1}^n a_k b_k^*. \quad (4.6)$$

Компоненты одного из сомножителей комплексно сопрягаются для того, чтобы скалярный квадрат любого ненулевого вектора был вещественным положительным



Рис. 4.1: Давид Гильберт 1886 г. (1862–1943). W

числом

$$(\vec{a}, \vec{a}) = \sum_{k=1}^n a_k a_k^* = \sum_{k=1}^n (\operatorname{Re}^2 a_k + \operatorname{Im}^2 a_k). \quad (4.7)$$

Эту формулу легко обобщить на случай, когда компоненты вектора нумеруются неограниченной дискретной переменной, а для непрерывной переменной мы заменяем сумму на интеграл

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int \phi^*(x) \psi(x) dx, \quad \text{или} \quad \langle \phi | \psi \rangle = \sum_k \phi^*(k) \psi(k). \quad (4.8)$$

Обратите внимание! У физиков принято комплексно сопрягать компоненты первого аргумента скалярного произведения, тогда как у математиков сопрягают компоненты второго аргумента. Но физики для скалярного произведения волновых функций используют угловые скобки вместо круглых и черту вместо запятой, что позволяет сразу различать, какой из традиций придерживается тот или иной автор.

В этих выражениях можно легко узнать скалярные произведения в пространствах L_2 (пространство квадратично интегрируемых функций) и l_2 (пространство квадратично суммируемых последовательностей). Эти пространства мы обычно и берём в качестве пространства волновых функций $\mathcal{H}$. В некоторых задачах могут возникать и конечномерные пространства состояний $\mathbb{C}^n$.

(*) Линейные полные пространства со скалярным произведением известны в математике как *гильбертовы пространства*. Причём все бесконечномерные *сепарабельные*⁵ *гильбертовы пространства* изоморфны, т.е. одинаковы с точностью до сохраняющей скалярное произведение (*унитарной*) замены координат. В частности бесконечномерные пространства L_2 и l_2 отличаются друг от друга только выбором базиса.

Если переменная пробегает непрерывные значения из области U и дискретные из множества W , то

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_U \phi^*(x) \psi(x) dx + \sum_{k \in W} \phi^*(k) \psi(k). \quad (4.9)$$

Через скалярный квадрат вектора определяется норма (длина вектора):

$$\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle.$$

4.2 Матрицы (л)

Несколько прискорбно, что теорию линейных алгебр снова и снова приходится излагать с самого начала, поскольку фундаментальные понятия этой ветви математики широко используются в математике и физике и их знание должно быть так же широко распространено, как знание элементов дифференциального исчисления.

Г. Вейль, «Теория групп и квантовая механика», «Введение»

⁵Сепарабельное пространство содержит всюду плотное счётное подмножество.

Коротко напомним некоторые понятия и факты из линейной алгебры, обобщение которых понадобится нам далее.

Матрица — прямоугольная таблица из чисел, элементы которой нумеруются двумя индексами как A_{ij} . Первый индекс нумерует строки, а второй — столбцы.

Столбец (матрица-столбец) — матрица, состоящая из одного столбца, элементы которой нумеруются одним индексом как $A_{i\bullet}$. Первый индекс нумерует строки, а отсутствующий второй индекс мы заменили точкой «•».

Строка (матрица-строка) — матрица, состоящая из одной строки, элементы которой нумеруются одним индексом как $A_{\bullet i}$. Отсутствующий первый индекс мы заменили точкой «•», а второй индекс нумерует столбцы.

Умножение строки на столбец той же длины даёт число:

$$ua = \sum_i u_{\bullet i} a_{i\bullet}.$$

Умножение столбца на строку даёт матрицу — таблицу умножения элементов строки на элементы столбца:

$$(au)_{ij} = a_{i\bullet} u_{\bullet j}.$$

Произведение матриц даёт матрицу — таблицу умножения строк первой матрицы на столбцы второй:

$$(AB)_{ik} = \sum_j A_{ij} B_{jk}.$$

Умножение определяется для такой пары матриц, что число столбцов первой совпадает с числом строк второй.

Умножение матриц *ассоциативно*, т.е. скобки в произведении можно ставить произвольным образом:

$$((AB)C)_{il} = \sum_k \left(\sum_j A_{ij} B_{jk} \right) C_{kl} = \sum_{jk} A_{ij} B_{jk} C_{kl} = \sum_j A_{ij} \sum_k (B_{jk} C_{kl}) = (A(BC))_{il}.$$

Однако, в общем случае, умножение матриц *некоммутативно*

$$\exists A, B : \quad AB \neq BA,$$

более того, произведение двух матриц в обратном порядке может быть вовсе не определено, так квадратную матрицу можно умножить на матрицу-столбец, но не наоборот.

След матрицы — сумма диагональных элементов, определяется только для квадратных матриц, у которых число строк и столбцов совпадает:

$$\text{tr} A = \sum_i A_{ii}.$$

Квадратная матрица (в квантовой механике — *оператор*) может действовать (умножением) слева на столбец и превращать его в другой столбец, той же высоты, линейно зависящий от исходного:

$$(Aa)_{i\bullet} = \sum_j A_{ij} a_{j\bullet},$$

$$A(\alpha a + \beta b) = \alpha(Aa) + \beta(Ab) \tag{4.10}$$

(здесь α и β — числа).

Квадратная матрица может действовать (умножением) справа на строку и превращать её в другую строку, той же высоты, линейно зависящую от исходной:

$$(uA)_{\bullet j} = \sum_i u_{\bullet i} A_{ij},$$

$$(\alpha u + \beta w)A = \alpha(uA) + \beta(wA). \quad (4.11)$$

Если заключить квадратную матрицу A между строкой u и столбцом a , то получится число, соответствующее произведению строки u на столбец Aa , или произведению строки uA на столбец a :

$$uAa = u(Aa) = (uA)a. \quad (4.12)$$

Если строка и столбец имеют следующие компоненты

$$u = (\underbrace{0, \dots, 0}_i, 1, 0, \dots, 0), \quad a = (\underbrace{0, \dots, 0}_j, 1, 0, \dots, 0)^T,$$

т.е. если мы взяли i -ю базисную строку и j -й базисный столбец, то произведение даёт соответствующий матричный элемент матрицы A :

$$uAa = A_{ij}. \quad (4.13)$$

Эрмитово сопряжение:⁶ $(A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*$.

Эрмитова матрица: $A^\dagger = A$.

Единичная матрица: $\hat{1}_{ij} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$.

Унитарная матрица: $U^\dagger U = \hat{1}$.

Умножение строки $a^\dagger$ на столбец b даёт число, в частности таким образом можно определить скалярное произведение столбца на столбец:

$$\langle a|b \rangle = a^\dagger b = \sum_i a_{i\bullet}^* b_{i\bullet}. \quad (4.14)$$

Умножение столбца b на строку $a^\dagger$ даёт матрицу:

$$(ba^\dagger)_{ij} = b_{i\bullet} a_{j\bullet}^*. \quad (4.15)$$

Собственный вектор: a матрицы (или оператора) A удовлетворяет условию

$$Aa = \alpha a,$$

где число $\alpha \in \mathbb{C}$ называется *собственным числом*.

Для эрмитовой матрицы (или эрмитового оператора) все собственные числа вещественны.

⁶Мы определили эрмитово сопряжение, но специально не стали определять *комплексное сопряжение матрицы* $(A^*)_{ij} = A_{ij}^*$ и *транспонирование* $(A^T)_{ij} = A_{ji}$. Дело в том, что по отдельности нам эти операции не понадобятся. Более того, операции транспонирования и комплексного сопряжения матриц зависят от выбора базиса при хороших (унитарных=сохраняющих скалярное произведение) преобразованиях координат. Такие операции нарушают независимость формул от базиса и они нам не нужны!

Для эрмитовой матрицы (или эрмитового оператора) можно построить базис, состоящий из собственных векторов данного оператора.

Если для двух эрмитовых (или двух унитарных, или одной эрмитовой и одной унитарной) матриц (операторов) A и B коммутатор равен нулю:

$$[A, B] = AB - BA = 0,$$

тогда и только тогда существует базис, элементы которого являются собственными векторами для матриц (операторов) A и B одновременно.

Для всякой матрицы (оператора) можно определить вещественную (эрмитову) часть и мнимую (антиэрмитову) часть:

$$\operatorname{Re} A = \frac{A + A^\dagger}{2}, \quad \operatorname{Im} A = \frac{A - A^\dagger}{2i},$$

$$(\operatorname{Re} A)^\dagger = \operatorname{Re} A, \quad (\operatorname{Im} A)^\dagger = \operatorname{Im} A.$$

$$A = \operatorname{Re} A + i \operatorname{Im} A.$$

Поскольку для эрмитовой матрицы (оператора) все собственные числа вещественны, для произвольной матрицы (оператора) собственный вектор A должен быть собственным одновременно для $\operatorname{Re} A$ и $\operatorname{Im} A$:

$$Aa = \alpha a \Leftrightarrow (\operatorname{Re} A)a = (\operatorname{Re} \alpha)a, \quad (\operatorname{Im} A)a = (\operatorname{Im} \alpha)a.$$

Матрицы (операторы) $\operatorname{Re} A$ и $\operatorname{Im} A$ эрмитовы, так что для произвольной матрицы (оператора) A базис собственных векторов существует тогда и только тогда, когда

$$[\operatorname{Re} A, \operatorname{Im} A] = 0 \Leftrightarrow [A, A^\dagger] = 0.$$

Матрицы (операторы), удовлетворяющие этому условию называются *нормальными*. В частности это условие выполняется для произвольной унитарной матрицы (оператора), поскольку из $U^\dagger = U^{-1}$ следует, что $[U, U^\dagger] = UU^{-1} - U^{-1}U = 0$.

Мы можем составить следующую классификацию матриц (операторов), которые могут быть диагонализированы при помощи унитарных преобразований базиса:

тип	собственные числа $\in$	связь с эрмитовыми
нормальные	$\mathbb{C}$	$\hat{A} + i\hat{B}$ при $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$
эрмитовые	$\mathbb{R}$	$\hat{A}$
антиэрмитовые	$i\mathbb{R}$	$i\hat{B}$
унитарные	$e^{i\mathbb{R}} = \{e^{i\varphi} \varphi \in \mathbb{R}\}$	$e^{i\hat{A}}$

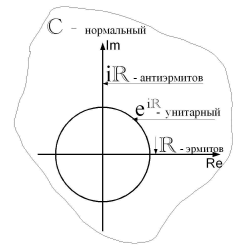


Рис. 4.2:

Эрмитовы операторы в квантовой механике соответствуют наблюдаемым величинам (или, попросту, *наблюдаемым*). Унитарные операторы соответствуют симметриям. В число симметрий попадает также сдвиг по времени — временная эволюция системы.

4.3 Дираковские обозначения

Дираковские обозначения в квантовой механике во многом аналогичны матричным обозначениям, поэтому читателю полезно внимательно сравнить этот раздел с разделом 4.2. Как и для матриц, для дираковских символов нет коммутативности (сомножители нельзя произвольно переставлять), но есть ассоциативность (т.е. при умножении можно свободно расставлять скобки).

В рассматриваемом формализме волновая функция с компонентами $\psi(x)$ рассматривается как аналог матрицы-столбца и называется кет-вектором, а комплексно-сопряжённая волновая функция с компонентами $\psi^*(x)$ — как аналог матрицы-строки и называется бра-вектором.



Рис. 4.3: Поль Адриен Морис Дирак (1902–1984). W

4.3.1 Основные «строительные блоки» дираковских обозначений

- *Комплексное число* (или просто — *число*). На числа можно множить все прочие, используемые нами объекты, причём комплексные числа можно свободно переставлять с множителями любого сорта, на результат такие перестановки не влияют;
- $|\psi\rangle$ — *кет-вектор* (может обозначаться просто как ψ), рассматривается как матрица-столбец, его компоненты — $\psi(x)$;
- $\langle\psi|$ — *бра-вектор* (может обозначаться просто как $\psi^\dagger$), получается из кет-вектора эрмитовым сопряжением $\langle\psi| = (|\psi\rangle)^\dagger$, рассматривается как матрица-строка, его компоненты — $\psi^*(x)$;
- $\hat{A}$ — *оператор* (аналог квадратной матрицы), обычно обозначается буквой в «шляпке».

Эти четыре типа объектов образуют различные линейные пространства:

- $\mathbb{C}$ — пространство комплексных чисел.
- $\mathcal{H}$ — пространство кет-векторов. С точки зрения математики *гильбертово пространство* (бесконечномерное комплексное пространство со скалярным произведением и определяемой с помощью этого произведения метрикой, в котором сходятся все фундаментальные последовательности). Кет-векторы можно складывать между собой (если они описывают состояния одинаковых физических систем) и умножать на комплексные числа, при этих операциях снова получаются кет-векторы. Элементы $\mathcal{H}$ превращаются в элементы сопряжённого пространства при помощи эрмитова сопряжения.
- $\mathcal{H}^*$ — пространство бра-векторов. Бра-векторы можно складывать между собой (если они описывают состояния одинаковых физических систем) и умножать на комплексные числа, при этих операциях снова получаются бра-векторы. Пространство $\mathcal{H}^*$ сопряжено к $\mathcal{H}$ — его элементы линейно отображают элементы $\mathcal{H}$ на $\mathbb{C}$ с помощью произведения строки на столбец.

- $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^*$ — пространство операторов из $\mathcal{H}$ в $\mathcal{H}$. Операторы можно складывать между собой (если они действуют на состояния одинаковых физических систем) и умножать на комплексные числа, при этих операциях снова получаются операторы.
- Нельзя складывать между собой объекты разных типов (кет-векторы с бра-векторами, и те и другие с операторами, а также волновые функции/операторы соответствующие различным физическим системам).

4.3.2 Комбинации основных блоков и их значение

- $\langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle = (|\phi\rangle)^\dagger |\psi\rangle$ — *брекет=бра-кет* — умножение строки на столбец — скалярное произведение ϕ на ψ (обе волновых функции должны описывать одинаковые физические системы) (см. (4.8), сравните с (4.14)) является числом и может свободно переставляться со всеми другими множителями;
- $\hat{A}|\psi\rangle$ — *действие оператора слева на кет-вектор* даёт снова кет-вектор (может обозначаться просто как $\hat{A}\psi$). Данная операция линейна: $\hat{A}(\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle) = \alpha\hat{A}|\psi\rangle + \beta\hat{A}|\phi\rangle$ (сравните с (4.10));
- $\langle \psi | \hat{A}$ — *действие оператора справа на бра-вектор* даёт снова бра-вектор (может обозначаться просто как $\psi^\dagger \hat{A}$). Данная операция линейна: $(\alpha\langle \psi | + \beta\langle \phi |) \hat{A} = \alpha\langle \psi | \hat{A} + \beta\langle \phi | \hat{A}$ (сравните с (4.11));
- $\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = A_{\phi\psi}$ — *матричный элемент* оператора представляет собой число (сравните с (4.13)). Матричный элемент можно рассматривать как:
 - произведение бра-вектора $\langle \phi | \hat{A}$ на кет-вектор $|\psi\rangle$,
 - произведение бра-вектора $\langle \phi |$ на кет-вектор $\hat{A}|\psi\rangle$
 - скалярное произведение ϕ на $\hat{A}\psi$;
- $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$, когда $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ (про эрмитово сопряжение в дираковских обозначениях см. ниже), $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ — среднее значение наблюдаемой A по состоянию ψ ;
- $|\psi\rangle\langle \phi|$ — *кет-бра произведение* представляет собой оператор (сравните с 4.15).

– Оператор $|\psi\rangle\langle \phi|$ может действовать слева-направо на кет-вектор $|\chi\rangle$:

$$(|\psi\rangle\langle \phi|)|\chi\rangle = |\psi\rangle \underbrace{\langle \phi | \chi \rangle}_{\text{число}} = \langle \phi | \chi \rangle |\psi\rangle. \quad (4.16)$$

– Оператор $|\psi\rangle\langle \phi|$ может действовать справа-налево на бра-вектор $\langle \lambda|$:

$$\langle \lambda | (|\psi\rangle\langle \phi|) = \underbrace{\langle \lambda | \psi \rangle}_{\text{число}} \langle \phi |; \quad (4.17)$$

- $|\psi\rangle|\phi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$ — *произведение кет-кет* соответствует тензорному произведению $\psi \otimes \phi$ и представляет собой кет-вектор, описывающий систему, состоящую из двух подсистем: 1-я находится в состоянии $|\psi\rangle$, а 2-я в состоянии $|\phi\rangle$ (см. (4.1), (4.2));

- $\langle\phi|\langle\psi| = \langle\phi|\otimes\langle\psi| = (|\psi\rangle|\phi\rangle)^\dagger$ — произведение бра-бра соответствует тензорному произведению сопряжённых волновых функций (бра векторов) и представляет собой бра-вектор, описывающий систему, состоящую из двух подсистем, при этом порядок сомножителей берётся обратным, по отношению к произведению кет-кет, описывающим ту же составную систему (см. ниже правило для эрмитового сопряжения).

4.3.3 Эрмитово сопряжение

Эрмитово сопряжение обозначается значком « $\dagger$ » и выполняется по следующим правилам (здесь a, b, c — комплексные числа, бра-векторы, кет-векторы, операторы и их всевозможные разрешённые комбинации)

- $(a^\dagger)^\dagger = a$,
- $\alpha^\dagger = \alpha^*$, $\alpha \in \mathbb{C}$ — эрмитово сопряжение числа совпадает с комплексным сопряжением,
- $(a + b)^\dagger = a^\dagger + b^\dagger$ — сумма сопрягается поэлементно,
- $(abc\dots)^\dagger = \dots c^\dagger b^\dagger a^\dagger$ — при сопряжении произведения надо сопрячь каждый множитель, и изменить их порядок на противоположный,
- $(|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|$,
- $(\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle$.

Приведём некоторые примеры:

- $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^\dagger = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* = A_{\phi\psi}^* = A_{\psi\phi}^\dagger = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle$ — это тождество выполняется для любых пар волновых функций ψ и ϕ , при этом верно обратное, если $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* = A_{\phi\psi}^* = B_{\psi\phi} = \langle\psi|\hat{B}|\phi\rangle$, для всех пар ψ, ϕ (достаточно проверить это для базисных волновых функций), то $B = A^\dagger$ (сравните с эрмитовым сопряжением из раздела 4.2),
- $(|\psi\rangle\langle\phi|)^\dagger = |\phi\rangle\langle\psi|$,
- $\underbrace{(\langle\phi|\psi\rangle)}_{\text{число}}^\dagger = (\langle\phi|\psi\rangle)^* = \langle\psi|\phi\rangle$,
- $(A|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|A^\dagger$,
- $(\langle\psi|A)^\dagger = A^\dagger|\psi\rangle$,
- $(|\psi\rangle|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|\langle\psi|$,
- $(\langle\phi|\langle\psi|)(|\chi\rangle|\kappa\rangle) = \langle\phi|\langle\psi|\chi\rangle|\kappa\rangle = \langle\phi|\underbrace{\langle\psi|\chi\rangle}_{\text{число}}|\kappa\rangle = \langle\psi|\chi\rangle\langle\phi|\kappa\rangle = \underbrace{\langle\psi|\chi\rangle}_{\text{число}}\underbrace{\langle\phi|\kappa\rangle}_{\text{число}}$.

4.4 Умножение справа, слева, . . . сверху, снизу и наискосок**

Мы привыкли записывать формулы в строчку. Точнее, если мы записываем член, строящийся с помощью привычного коммутативного умножения, мы «валим» все множители в кучу не обращая внимание на их порядок. Можно сказать, что для обычного коммутативного умножения множители пишутся не в строчку, а «в точку».

Для умножения некоммутативного множители пишутся уже именно в строчку: порядок множителей уже важен. Каждый сомножитель, если расписать его по-компонентно, имеет один или два индекса (дискретных или непрерывных) и мы аккуратно соединяем сомножители в цепочку попарно приравнивая второй индекс первого сомножителя первому индексу второго и суммируя (интегрируя) по ним

$$(ABC)_{il} = \sum_{jkl} A_{ij} B_{jk} C_{kl}.$$

Такое умножение компонент с суммированием (интегрированием) по соответствующим парам индексов и даёт нам некоммутативное умножение матриц (операторов). Для такого умножения порядок сомножителей уже важен (от него зависит какие индексы попадают в пару друг другу) и матрица A может действовать умножением на B как слева AB , так и справа BA :

$$(AB)_{ik} = \sum_j A_{ij} B_{jk}, \quad (BA)_{ik} = \sum_j B_{ij} A_{jk}.$$

Однако существуют объекты, компоненты которых нумеруются более чем двумя индексами. Многочисленные примеры таких объектов даёт нам *тензорное исчисление*. Впрочем, и в квантовой теории используется *тензорное умножение*, например при построении волновой функции сложной системы из волновых функций её частей.

Если объект имеет более двух индексов, то возникает неоднозначность в том, какие два из них использовать при построении цепочки матричных умножений. Кроме того, даже после того, как мы договорились какой индекс мы считаем «первым», а какой «последним», такой объект вставленный в цепочку несёт ещё какие-то свободные индексы, по которым его можно умножить («сверху»? «снизу»? «наискосок»? ещё на что-то:

$$\left(\begin{array}{ccc} & D & \\ A & B & C \end{array} \right)_{il}^n = \sum_{jkm} A_{ij} \frac{D_m^n}{B_j^m k} C_{kl} = \sum_{jkm} A_{ij} B_j^m k C_{kl} D_m^n$$

Подобные «ветвящиеся строчки» действительно возникают в квантовой механике.

Записывать такие «неодномерные» произведения можно по-разному:

- Можно на языке дираковских обозначений. Это часто удобно, хотя необходимость упорядочить все множители в одну строчку и привносит неоднозначность.
- Можно использовать индексные обозначения в тензорном духе. Это тоже часто удобно. Вся информация о порядке множителей при этом шифруется в индексах и сомножители можно писать в строчку в произвольном порядке и свободно переставлять. По существу такие обозначения сводят «неодномерное» умножение к обычному коммутативному.

- Наконец существуют различные диаграммные обозначения, при которых сомножители произвольно располагаются на рисунке и соединяются линиями, обозначающими пары соответствующих индексов. Такие обозначения наиболее наглядны, тем более, что часто формула, описывающая процесс совпадает с рисунком, это процесс изображающим. (Пример такого рода — эквивалентность формулы (3.13) и рисунка 3.5, см. также 3.2 «Возможно всё, что может произойти (Φ^*)»)

Ниже мы проиллюстрируем конкретными примерами все три подхода.

4.4.1 Диаграммные обозначения*

В диаграммных обозначениях объекты (волновые функции, операторы, матрицы плотности) представляются в виде узлов, в которых сходится определённое (для каждого сорта объекта) число линий. Вы можете себе представить такой объект как некое электронное устройство, из которого торчит k проводков. Каждый из проводков соответствует непрерывному или дискретному индексу (аргументу).

Проводки можно соединять попарно, причём соединяемые проводки могут относиться как к разным узлам, так и к одному узлу. Такое соединение обозначает приравнивание соответствующих индексов и суммирование/интегрирование по всему их диапазону.

Однако проводки бывают разных сортов и соединяются они по следующим правилам:

- Каждый индекс/проводок является либо бра, либо кет-индексом. Соединять между собой можно только бра и кет.
- Каждый индекс/проводок имеет свою область определения. Для соединяемых проводков области определения должны совпадать.
- В некоторых случаях изоморфные области определения относящиеся к разным степеням свободы или к разным наблюдаемым считаются различными, например, области определения координат x и y изоморфны $\mathbb{R}$, но нам удобно считать, что это разные экземпляры вещественной оси и запретить соединять соответствующие проводки/индексы. Тем более естественно считать различными области определения координатной и импульсной переменных.
- В некоторых случаях удобно проводки/индексы объединять в многожильные кабели/мультииндексы. Например, если у нас имеется частица со спином, то может быть удобно объединить все три координаты частицы и проекцию спина в один кабель/мультииндекс $r = (x, y, z, \sigma)$.
- Иногда линии (или выходы узлов) полезно подписывать соответствующими буквенными индексами, чтобы не перепутать порядок индексов и упростить перевод формул в другие обозначения.

Таким образом, в диаграммных обозначениях формулы представляются в виде диаграмм. Если диаграмма состоит из нескольких несвязанных кусков, то подразумевается, что они умножаются друг на друга.

Диаграмма в свою очередь может рассматриваться как узел, несущий все внешние (оставшиеся не соединёнными) линии/проводки. Если у диаграммы нет внешних линий, то это число.

Диаграммы с одинаковым набором внешних линий образуют линейное пространство (их можно умножать на комплексные числа и складывать).

4.4.2 Тензорные обозначения в квантовой механике*

Если вы собираете сложную электронную схему без печатной платы, просто паяя проводки, торчащие из многочисленных узлов, то вам может быть удобнее вместо схемы, изображающей ход проводков, просто пометить соответствующие проводки одинаковыми метками.

Этому подходу соответствуют тензорные обозначения: узлы (буквы) несут верхние кет-индексы и нижние бра-индексы. Если в одном члене верхний индекс совпал с нижним, то соответствующие проводки/индексы соединяются/приравниваются и интегрируются или суммируются. Знак суммы или интеграла обычно при этом опускается.

Индекс, который встречается в каждом члене формулы один раз — *свободный индекс*. Индекс, который встречается в каждом члене формулы два раза (один раз сверху, и один раз снизу) — *немой индекс*.

В каждом члене формулы должен быть одинаковый набор свободных индексов. Если одинаковый индекс встретился в одном члене формулы два раза сверху, или два раза снизу, то такая формула является бессмысленной.

Чтобы случайно не приравнять индексы, имеющие разные области определения их удобно обозначать буквами из разных алфавитов (или разных участков одного алфавита).

Тензорные обозначения в квантовой механике часто применяются в виде *спинорных обозначений*, когда объекты несут только спиновые индексы каждый из которых пробегает два значения.

4.4.3 Дираковские обозначения для сложных систем*

Дираковские обозначения соответствуют следующему правилу соединения проводков/индексов: сперва выкладываются в определённом порядке все бра-индексы, потом в обратном порядке выкладываются соответствующие кет-индексы, и начиная от середины их попарно соединяют. В таких серий бра-кет в одном члене может быть несколько. Например, если мы считаем матричный элемент для волновых функций с тремя индексами-аргументами, для случая, когда кет-вектор с тремя индексами представлен как произведение трёх кет-векторов с одним индексом:

$$\langle \varphi | \hat{A} | \psi' \rangle | \psi'' \rangle | \psi''' \rangle. \quad (4.18)$$

$$\varphi_{ijk} A^{kji}_{qrs} \psi'^s \psi''^r \psi'''^q$$

Если оператор записан в виде тензорного произведения, то это предполагает упорядочение индексов, при котором сперва выписываются все кет-индексы, а потом все бра-индексы обоих операторов:

$$\hat{A} \otimes \hat{B},$$

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})^{ik}_{jl} = A^i_j B^k_l$$

$$(\hat{A} \otimes \hat{B}) | \psi \rangle | \varphi \rangle = (\hat{A} | \psi \rangle) (\hat{B} | \varphi \rangle).$$

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})^{ik}_{jl} \psi^j \varphi^l = A^i_j \psi^j B^k_l \varphi^l$$

При использовании дираковских обозначений для многочастичных систем надо внимательно следить за тем, сколько и каких индексов несёт каждый объект

4.4. УМНОЖЕНИЕ СПРАВА, СЛЕВА, ... СВЕРХУ, СНИЗУ И НАИСКОСОК**77

(волновая функция, оператор), а также за тем, какой порядок индексов подразумевается. Например, если мы отбросим в формуле (4.18) два кет-множителя из трёх, то получившаяся формула будет по-прежнему внешне напоминать матричный элемент (число), хотя на самом деле это выражение несёт два бра-индекса, т.е. является двухиндексным бра-вектором:

$$\langle \varphi | \hat{A} | \psi' \rangle.$$

$$\varphi_{ijk} A^{kji}_{qrs} \psi^{ts}$$

4.4.4 Сравнение разных обозначений*

- ψ^i — кет-вектор $|\psi\rangle$,



- φ_i — бра-вектор $\langle \varphi |$,



- $\varphi_i \psi^i = \langle \varphi | \psi \rangle$ — скалярное произведение бра на кет,



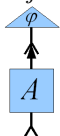
- A^i_j — оператор $\hat{A}$,



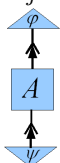
- $A^i_j \psi^j$ — оператор действует на кет-вектор: $\hat{A}|\psi\rangle$,



- $A^i_j \varphi_i$ — оператор действует на бра-вектор: $\langle \varphi | \hat{A}$,



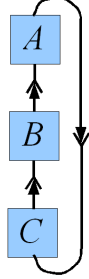
- $A^i_j \varphi_i \psi^j = \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle$ — матричный элемент,



- $A_i^i = \text{tr} \hat{A}$ — след оператора $\hat{A}$,



- $A_j^i B_k^j C_i^k = \text{tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C})$ — след произведения операторов $\hat{A}\hat{B}\hat{C}$.



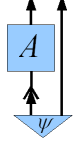
- ψ^{ij} — кет-вектор $|\psi\rangle = \sum_{\alpha} |\xi_{\alpha}\rangle |\chi_{\alpha}\rangle$ с двумя индексами,



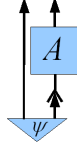
- φ_{ij} — бра-вектор $\langle\varphi| = \sum_{\alpha} \langle\zeta_{\alpha}| \langle\eta_{\alpha}|$ с двумя индексами,



- $A_j^i \psi^{jk}$ — оператор $\hat{A}$ действует на первый индекс (например, на первую степень свободы) кет-вектора $|\psi\rangle$: $\hat{A} \otimes \hat{1} |\psi\rangle = \sum_{\alpha} (\hat{A} |\xi_{\alpha}\rangle) |\chi_{\alpha}\rangle$,



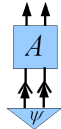
- $A_k^i \psi^{jk}$ — оператор $\hat{A}$ действует на второй индекс (например, на вторую степень свободы) кет-вектора $|\psi\rangle$: $\hat{1} \otimes \hat{A} |\psi\rangle = \sum_{\alpha} |\xi_{\alpha}\rangle (\hat{A} |\chi_{\alpha}\rangle)$,



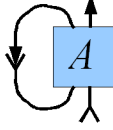
- A_{kl}^{ij} — оператор $\hat{A}$, действующий на волновых функциях с двумя индексами,



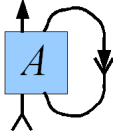
- $A_{kl}^{ij} \psi^{kl}$ — оператор действует на кет-вектор: $\hat{A} |\psi\rangle$ (если индексы i, j и k, l попарно объединить в мультииндексы $I = (i, j)$ и $K = (k, l)$, то получится $A_K^I \psi^K$),



- A_{il}^{ij} — частичный след оператора по первой паре индексов $\text{tr}_1 \hat{A}$,



- A_{kj}^{ij} — частичный след оператора по второй паре индексов $\text{tr}_2 \hat{A}$.



4.5 Смысл скалярного произведения

4.5.1 Нормировка волновых функций на единицу

Если мы хотим, чтобы суммарная вероятность всех возможных исходов какого-то измерения была равна единице, то это можно записать в виде нормировочного условия (нормировки) для волновой функции:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (4.19)$$

Если расписать скалярный квадрат через интеграл и сумму согласно (4.9), то мы получим интеграл от плотности вероятности $\psi^*(x) \psi(x)$ для непрерывного спектра ($x \in U$) и сумму вероятностей $\psi^*(k) \psi(k)$ для дискретного спектра ($k \in W$)

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_U \psi^*(x) \psi(x) dx + \sum_{k \in W} \psi^*(k) \psi(k) = 1. \quad (4.20)$$

Здесь *спектр физической величины* — набор значений, которые эта величина может принимать.

Условие (4.19) называется *нормировкой на единицу* (или *условием нормировки на единицу*). Поскольку волновая функция определена с точностью до числового множителя, на единицу может быть отнормирована любая волновая функция с конечным скалярным квадратом:

$$|\psi_{\text{норм.}}\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}}.$$

Умножение на фазовый множитель $e^{i\alpha}$, ($\alpha \in \mathbb{R}$, $|e^{i\alpha}| = 1$) не нарушает нормировку волновой функции.

Нормировка на единицу волновой функции соответствует условию нормировки на единицу для распределения вероятностей:

$$\int_U \varrho(x) dx + \sum_{k \in W} p(k) = 1. \quad (4.21)$$

Однако вспомним, что не всякое распределение вероятностей может быть нормировано на единицу. Иногда бывает полезно рассмотреть распределение вероятностей, задающееся неинтегрируемой (несуммируемой) функцией. В этом случае

мы можем говорить об относительных вероятностях попадания случайной величины в тот или иной интервал. Например, если мы имеем равномерное распределение вероятностей на бесконечной прямой, то вероятности попадания точки в тот или иной интервал пропорционально его длине, но такое распределение не нормировано на единицу. Такие распределения не реализуемы на эксперименте, но являются полезными в теории. В квантовой механике равномерное распределение по координате естественным образом возникает при рассмотрении состояния с определённым значением импульса $\mathbf{p}$ — волны де Бройля

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = e^{\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}}. \quad (4.22)$$

Ясно, что такая волновая функция не реализуема физически, т.к. частица должна быть равномерно «размазана» по бесконечному объёму. Этой невозможности и соответствует ненормируемость такой волновой функции (точнее — ненормируемость на единицу).

4.5.2 Физический смысл скалярного квадрата. Нормировка на вероятность

Таким образом, мы можем считать, что физический смысл скалярного квадрата волновой функции — полная вероятность. Обычно мы нормируем волновую функцию на единицу, но рассматривая волновую функцию *после измерения* может быть удобно нормировать волновую функцию на вероятность рассматриваемого исхода.

Если до измерения система находилась в состоянии $|\psi\rangle$, в результате измерения некоторой дискретной величины k система попадает в одно из ортогональных состояний $|\phi_k\rangle$. Причём, мы можем отнормировать эти состояния так, что

$$|\psi\rangle = \sum_k |\phi_k\rangle, \quad (4.23)$$

$$\langle\phi_k|\phi_{k'}\rangle = p_k \delta_{kk'}, \quad (4.24)$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{k,k'} \langle\phi_k|\phi_{k'}\rangle = \sum_k p_k = 1, \quad (4.25)$$

где p_k — вероятность исхода номер k .⁷

Волновые функции $|\phi_k\rangle$ получаются из $|\psi\rangle$ с помощью соответствующего данной измеряемой величины набора проекторов $\hat{P}_k$:

$$|\phi_k\rangle = \hat{P}_k |\psi\rangle, \quad (4.26)$$

$$\hat{P}_k \hat{P}_{k'} = \hat{P}_k \delta_{kk'}, \quad (4.27)$$

$$\sum_k \hat{P}_k = \hat{1}. \quad (4.28)$$

Проекторы $\hat{P}_k$ отображают векторы состояния на одномерное подпространство, если для данного k существует только одно линейно-независимое собственное состояние (невыврожденное состояние). В общем случае размерность области значений оператора $\hat{P}_k$ может быть произвольной, в том числе бесконечной.

⁷Напоминаем, что $\delta_{kk'} = \begin{cases} 1, & k = k' \\ 0, & k \neq k' \end{cases}$ — символ Кронекера.

Мы могли бы попытаться вообще запретить использование волновых функций, которые не нормированы на единицу, но это было бы не удобно, поскольку множество единичных векторов не образует линейного пространства. Вместо этого мы считаем, что все волновые функции, отличающиеся друг от друга на числовой множитель описывают одно и то же физическое состояние. Это позволяет отнормировать на единицу любое состояние с конечным скалярным квадратом заменив $|\psi\rangle$ на $\frac{e^{i\alpha}|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}$, $\alpha \in \mathbb{R}$, $e^{i\alpha}$, — произвольный фазовый множитель. Таким образом даже нормировка оставляет возможность описывать одно физическое состояние разными (получаемыми друг из друга умножением на фазовый множитель) волновыми функциями.

4.5.3 Физический смысл скалярного произведения

В данном разделе мы снова получим и обсудим выводы раздела 3.1.5 «Амплитуда при измерении и скалярное произведение».

Вероятность p_k некоторого исхода измерения из раздела 4.5.2 можно записать в следующем виде

$$\langle\phi_k|\psi\rangle = \langle\phi_k|\sum_{k'}|\phi_{k'}\rangle = \sum_{k'}\langle\phi_k|\phi_{k'}\rangle = \sum_{k'}p_k\delta_{kk'} = p_k.$$

Однако при этом начальная волновая функция ψ и конечная — ϕ_k нормированы по-разному: одна на единицу, а другая на вероятность.

Если обе волновые функции, начальную ψ и конечную ϕ , отнормировать на единицу, то скалярное произведение даёт *амплитуду вероятности* того, что система, находившаяся в состоянии ψ будет обнаружена в состоянии φ . Другими словами, мы имеем систему в состоянии ψ и ставим опыт, который должен ответить на вопрос: «А не находится ли система в состоянии φ ?» Причём если ответ будет положительным, то система и в самом деле окажется в этом состоянии. Скалярное произведение

$$A_{\varphi\psi} = \langle\varphi|\psi\rangle$$

Задаёт соответствующую амплитуду вероятности.⁸

Сама вероятность имеет вид

$$p_{\varphi\psi} = |\langle\varphi|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|\varphi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|(|\varphi\rangle\langle\varphi|)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_\varphi|\psi\rangle = \text{tr}(\hat{P}_\psi\hat{P}_\varphi), \quad (4.29)$$

$$\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad \hat{P}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|.$$

Оператор $\hat{P}_\varphi$ представляет собой проектор на направление φ (см. (4.26), (4.27), (4.28) в случае невырожденного состояния).

⁸В классической теории мы бы имели всегда вероятность 0 для несовпадающих чистых состояний (состояний с определёнными значениями координат и импульсов) и вероятность 1 для совпадающих чистых состояний. В квантовой теории мы можем подобрать такой набор состояний, что квадрат каждого равен 1, а скалярное произведение разных состояний будет давать 0. Причём мы сможем задать базис из таких взаимоисключающих состояний. Но поскольку пространство состояний является линейным пространством, в него будут попадать и всевозможные линейные комбинации базисных векторов, которые соответствуют тому, что различные взаимоисключающие состояния имеют место одновременно с некоторой амплитудой вероятности. В классической механике мы тоже можем получать при измерении различные значения с некоторыми вероятностями, для смешанных состояний, задаваемых распределениями вероятностей.

4.6 Базисы в пространстве состояний

4.6.1 Разложение по базису в пространстве состояний, нормировка базисных векторов

Собственно задавая чистое состояние $|\psi\rangle$ как волновую функцию $\psi(x)$ от какого-то набора переменных x мы уже имеем дело с разложением вектора состояния по некоторому базису.

$$|\psi\rangle = \int_U \psi(x) |\phi_x\rangle dx + \sum_{k \in W} \psi(k) |\phi_k\rangle \quad (4.30)$$

Здесь $|\phi_x\rangle$ $|\phi_k\rangle$ — базисные кет-векторы непрерывного и дискретного спектра с номерами номер x и k соответственно. По непрерывному спектру ($x \in U$) идёт интегрирование, а по дискретному ($k \in W$) — суммирование.

Базисные векторы с различными номерами ортогональны друг другу. Однако базисные векторы дискретного и непрерывного спектров нормируются по-разному. Хотя в обоих случаях это нормировка на ядро единичного оператора⁹. Т.е. нормировка проводится так, чтобы компоненту вектора состояния (значение волновой функции) можно было бы получить как скалярное произведение:

$$\begin{aligned} \psi(k) &= \langle \phi_k | \psi \rangle = \langle \phi_k | \int_U \psi(x) |\phi_x\rangle dx + \langle \phi_k | \sum_{k' \in W} \psi(k') |\phi_{k'}\rangle = \\ &= \sum_{k' \in W} \psi(k') \langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = \sum_{k' \in W} \psi(k') \delta_{kk'}, \\ \psi(x) &= \langle \phi_x | \psi \rangle = \langle \phi_x | \int_U \psi(x') |\phi_{x'}\rangle dx' + \langle \phi_x | \sum_{k \in W} \psi(k) |\phi_k\rangle = \\ &= \int_U \psi(x') \langle \phi_x | \phi_{x'} \rangle dx' = \int_U \psi(x') \delta(x - x') dx'. \end{aligned}$$

Причём условия нормировки для базисных векторов задают одновременно компоненты базисных векторов по базису, к которому эти векторы относятся, т.е. $\phi_{x_0}(x) = \langle \phi_x | \phi_{x_0} \rangle$, т.к. и то, и другое определяется скалярным произведением выбранного базисного вектора на все векторы базиса.

Таким образом, базисные векторы дискретного спектра нормируются на δ -символ:

$$\langle \phi_k | \phi_l \rangle = \delta_{kl} = \phi_l(k). \quad (4.31)$$

Т.е.

$$\langle \phi_k | \phi_l \rangle = 0, \quad k \neq l, \quad (4.32)$$

$$\langle \phi_k | \phi_k \rangle = 1. \quad (4.33)$$

А базисные векторы непрерывного спектра нормируются на δ -функцию:

$$\langle \phi_x | \phi_y \rangle = \delta(x - y) = \phi_y(x). \quad (4.34)$$

⁹Ядро оператора — разложение оператора по базису. Подробнее см. раздел 4.7.6.

Т.е.

$$\langle \phi_x | \phi_y \rangle = 0, \quad x \neq y, \quad (4.35)$$

$$\langle \phi_x | \phi_x \rangle = \infty \quad \text{скалярное произведение не определено (расходится)}. \quad (4.36)$$

Для базисных векторов непрерывного спектра скалярный квадрат оказывается не определён, т.е. вероятности, для состояния, описываемого такими состояниями не могут быть отнормированы на единицу! В этом состоит существенное отличие от базисных векторов дискретного спектра, которые нормированы на единицу и представляют собой вполне «хорошие» векторы чистых состояний.

Строго говоря базисные векторы непрерывного спектра вообще не относятся к пространству состояний $\mathcal{H}$, поскольку для всех векторов состояний задано скалярное произведение.

Обратите внимание, что уравнения (4.32), (4.33) эквивалентны условию нормировки (4.31), но аналогичные уравнения (4.35), (4.36) не эквивалентны условию нормировки (4.34) (бесконечности, в отличие от единиц, бывают разные). А учитывая, что δ -функция обладает свойством $\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}$ (для одномерной переменной x) мы видим, что нормировка одной-единственной функции непрерывного спектра невозможна. Нормируется сразу набор векторов непрерывного спектра, причём нормировка зависит от нумерации векторов: замена $x \rightarrow ax$ требует изменения нормировки базисных $\phi_x \rightarrow \frac{\phi_x}{\sqrt{a}}$.

При работе с состояниями непрерывного и дискретного спектра обычно условие квадратичной интегрируемости волновой функции заменяют на более мягкое условие локальной (на любом конечном интервале) квадратичной интегрируемости и ограниченности на бесконечности.

4.6.2 Природа состояний непрерывного спектра*

Итак, рассматривая базисные векторы непрерывного спектра мы невзначай вылезли из первоначально постулируемого пространства $\mathcal{H}$ квадратично интегрируемых (суммируемых) функций. Оказывается, что такие векторы вроде уже и не состояния, и скалярное произведение с их участием определено не всегда: когда надо посчитать соответствующую этому базисному вектору компоненту «хорошего» состояния $\psi(x) = \langle \phi_x | \psi \rangle$ то скалярное произведение определено, а когда надо посчитать скалярный квадрат $\langle \phi_x | \phi_x \rangle$ оно вдруг отказывается работать, но выдаёт нечто осмысленное, если взять $\langle \phi_x | \phi_y \rangle$. Попытаемся понять, что же это такое с двух точек зрения: с точки зрения физики и с точки зрения математики.

С точки зрения физики ненормируемые состояния не могут быть реализованы, поскольку суммарная вероятность всех исходов не должна превышать единицу. Таким образом, состояния непрерывного спектра физически нереализуемы. Таким образом, если физическая величина имеет непрерывный спектр возможных значений, то не существует состояний, в котором её значение из непрерывного спектра было бы определено однозначно. Это также означает, что значение величины из непрерывного спектра может быть измерено только с конечной точностью. Это относится, например, к состояниям, в которых определено значение координаты.

Однако мы можем приближать функцию непрерывного спектра «хорошими» квадратично интегрируемыми функциями, и такое приближение будет в некотором смысле сходиться т.е.

$$\forall \psi \in \mathcal{D} \subset \mathcal{H} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \psi_n | \psi \rangle = \langle \phi_{x_0} | \psi \rangle = \psi(x_0).$$

Например, мы можем приближать дельта-функцию узкими и высокими прямоугольными импульсами или гауссовыми кривыми с единичным интегралом.

Таким образом мы можем приближать невозможное состояние непрерывного спектра, в котором x определён с бесконечной точностью «хорошими» состояниями в которых x определён с конечной (но сколь угодно малой) неопределённостью. Невозможное состояние непрерывного спектра при этом оказывается некоторой вполне законной идеализацией. Да, для этого состояния полная вероятность оказывается бесконечной, а значит мы не можем считать абсолютные вероятности, однако мы можем считать *относительные вероятности* как отношения частот попадания какой-то величины в те или иные интервалы.

С точки зрения математики упомянутая выше сходимость — сходимость в смысле слабого предела, т.е.

$$\text{wlim}_{n \rightarrow \infty} \psi_n(x) = \delta(x - x_0) = \phi_{x_0}(x) \Leftrightarrow \forall \psi \in \mathcal{D} \subset \mathcal{H} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \psi_n | \psi \rangle = \langle \phi_{x_0} | \psi \rangle = \psi(x_0).$$

Такую сходимость применяют для того, чтобы определить обобщённые функции класса $\mathcal{D}'$ как линейные функционалы над основными функциями класса $\mathcal{D}$. Сходимость в слабом смысле в пространстве $\mathcal{H}$ совпадает со сходимостью по норме $\| \cdot \|$, которую мы определили с помощью скалярного квадрата. Линейные функционалы над пространством $\mathcal{H}$ относятся к пространству $\mathcal{H}^*$, которое изоморфно исходному и отождествляется с ним при эрмитовом сопряжении. Можно сказать, что пространство обобщённых функций класса $\mathcal{H}'$ совпадает с $\mathcal{H}^*$. Поэтому в пространстве $\mathcal{H}$ ряды, приближающие δ -функцию расходятся. Нужное нам пространство основных функций не совпадает с исходным пространством состояний $\mathcal{D} \neq \mathcal{H}$. Чтобы расширить класс обобщённых функций нам надо сузить класс основных функций: чем шире выбор в ψ , тем уже выбор в ϕ , при условии что интеграл типа скалярного произведения сходится

$$\int \phi^*(x) \psi(x) dx.$$

Другими словами, включение каждой новой функции в $\mathcal{D}$ накладывает дополнительное условие на все функции, которые могут быть включены в $\mathcal{D}'$.¹⁰

Угловые скобки в дираковских обозначениях помимо скалярного произведения волновых функций из пространства $\mathcal{H}$ теперь могут обозначать и другую операцию: действие линейного функционала из $\mathcal{D}'$ на волновую функцию из $\mathcal{D}$. Получившаяся при этом конструкция

$$\mathcal{D} \subset \mathcal{H} \subset \mathcal{D}' \tag{4.37}$$

называется *оснащённым гильбертовым пространством*.

Конкретный выбор пространства основных функций $\mathcal{D}$ зависит от решаемой задачи.

Однако мы ещё не выяснили природу интеграла по непрерывному спектру в формуле (4.30), а также природу «скалярного произведения» состояний непрерывного спектра друг на друга, в частности в формуле для нормировки (4.34).

Про смысл «скалярного произведения» векторов непрерывного спектра друг на друга см. ниже в разделе 4.6.3 «Замена базиса», а также в разделах 4.7.1 «Ядро оператора» и 4.7.2 «Матричный элемент оператора».

¹⁰Это остаётся верным до тех пор, пока $\mathcal{D}'$ плотно в $\mathcal{H}$, если слишком сильно уменьшить $\mathcal{D}$, то мы перестанем различать разные обобщённые функции с точки зрения их действия на основные.

4.6.3 Замена базиса

Прежде всего отметим, что формула (4.30) для разложения кет-вектора по базису сама по себе не позволяет вычислить какое бы то ни было число, поскольку она записана через другие кет-векторы. Чтобы получить из кет-вектора число (хотя бы его компоненту по какому-либо базису) его надо домножить слева на бра-вектор. Так и сделаем, умножим формулу (4.30) слева на некоторый базисный вектор $\langle \xi_m |$ (непрерывного или дискретного спектра, из старого базиса $\{|\phi_x\rangle\}_{x \in U \cup W}$, или из какого-либо другого)

$$\begin{aligned} \langle \xi_m | \times \left(|\psi\rangle = \int_U \psi(x) |\phi_x\rangle dx + \sum_{x \in W} \psi(x) |\phi_x\rangle \right) \\ \psi(m) = \langle \xi_m | \psi \rangle = \int_U \psi(x) \langle \xi_m | \phi_x \rangle dx + \sum_{x \in W} \psi(x) \langle \xi_m | \phi_x \rangle = \\ = \int_U \psi(x) \phi_x(m) dx + \sum_{x \in W} \psi(x) \phi_x(m). \end{aligned} \quad (4.38)$$

Полученная формула (4.38) выражает компоненты $\psi(m)$ вектора $|\psi\rangle$ в новом базисе, через его же компоненты $\psi(x)$ в старом базисе. При этом отображение записалось как линейное отображение одного векторного пространства на другое с ядром, задаваемым скалярными произведениями базисных векторов двух наборов друг на друга $\langle \xi_m | \phi_x \rangle$. Это ядро имеет вполне конкретный смысл и является, вообще говоря, обобщённой функцией от m и x . Как обобщённая функция $\langle \xi_m | \phi_x \rangle$ может не иметь определённого значения при каких-то значениях переменных, но имеет смысл как форма записи линейного отображения. Даже если значение функции $\langle \xi_m | \phi_x \rangle$ при каких-то значениях аргумента определено, интеграл, формально соответствующий скалярному произведению волновых функций непрерывного спектра, может расходиться. Например, скалярное произведение двух волн де Бройля, отвечающих различным значениям импульса в одномерном случае сводится к пределу, который не существует, но которому мы формально приписываем нулевое значение:

$$\langle \psi_{p_1} | \psi_{p_2} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{ip_1 x}{\hbar}} e^{\frac{ip_2 x}{\hbar}} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i(p_2 - p_1)x}{\hbar}} dx = \lim_{R \rightarrow +\infty} \underbrace{\int_{-R}^{+R} e^{\frac{i(p_2 - p_1)x}{\hbar}} dx}_{2 \frac{\sin\left(\frac{p_2 - p_1}{\hbar} R\right)}{(p_2 - p_1)/\hbar}} = 0. \quad (4.39)$$

Замена базиса и унитарные операторы*

Мы описали замену базиса как отображение из одного векторного пространства в другое

$$G : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2.$$

Здесь $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$ два векторных пространства, элементами которых являются наборы компонент вектора состояния из пространства $\mathcal{H}$ по базисам номер 1 и номер 2. Конечно, пространства $\mathcal{H}$, $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$ одинаковы (изоморфны), но иногда бывает

полезно различать сам вектор состояния и его представление через набор компонент.

Если оба векторных пространства $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$ «устроены» одинаково, т.е. если мы можем пронумеровать векторы дискретного спектра обоих базисов и установить между ними взаимно-однозначное соответствие, пронумеровать векторы непрерывного спектра обоих базисов и также установить между ними взаимно-однозначное соответствие, то такая одинаковая нумерация устанавливает естественные отображение между элементами обоих векторных пространств

$$J : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2, \quad J^{-1} : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1.$$

При этом у нас появляется возможность рассматривать те же формулы не как замену базиса (отображение вектора из $\mathcal{H}_1$ в $\mathcal{H}_2$), а как преобразование вектора, т.е. отображение вектора из $\mathcal{H}_1$ на другой вектор того же пространства $\mathcal{H}_1$:

$$\hat{U} = J^{-1}J : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1.$$

Поскольку такое преобразование взаимно-однозначно ($\Rightarrow$ обратимо) и сохраняет скалярное произведение (оба базиса одинаково нормированы), то оно называется *унитарным преобразованием* и описывается *унитарным оператором* $\hat{U}$.

Наоборот, если $M_1 : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_1$ задаёт компоненты вектора состояния по некоторому базису, а $\hat{U} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ — унитарный оператор, то $M_2 = M_1\hat{U} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_1$ задаёт компоненты вектора состояния по новому базису.

Для любого базиса любой унитарный оператор задаёт некоторую замену базиса на новый базис, «устроенный» также как исходный, и наоборот, любая замена базиса, при которой оба базиса «устроены» одинаково задаёт унитарный оператор.

Унитарное преобразование — обобщение поворота, а унитарный оператор — обобщением матрицы поворота.

Если базисы «устроены» различно, например в одном векторы нумеруются дискретным индексом, а в другом — непрерывным, то такую замену базиса нельзя естественным образом представить как унитарное преобразование.¹¹

Преобразование Фурье

Рассмотрим пространство $L_2(\mathbb{R})$ и базис, состоящий из волн де Бройля (состояний с определённым импульсом $\hbar k$)

$$\xi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} = \langle \phi_x | \xi_k \rangle, \quad k \in \mathbb{R}.$$

Здесь $\phi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ — волновые функции исходного базиса (состояния с определённым значением координаты x_0).

Переход к новому базису соответствует преобразованию Фурье. Этот базис является ортонормированным, т.е.

$$\langle \xi_k | \xi_l \rangle = \delta(k - l).$$

¹¹В некоторых книгах унитарными операторами называют также отображение одного пространства на другое. Однако в данном пособии унитарные преобразования понимаются как отображение пространства на себя, для того, чтобы любое преобразование можно было бы рассматривать двояким образом: как *активное преобразование* (преобразование вектора), либо как *пассивное преобразование* (замена базиса).

Хотя матричный элемент $\langle \xi_k | \xi_l \rangle$ является обобщённой функцией, при $k \neq l$ она имеет хорошо определённое (нулевое) значение, однако соответствующий интеграл

$$\langle \xi_k | \xi_l \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(l-k)x} dx$$

расходится (см. (4.39)). При стремлении к бесконечности пределов интегрирования

$$\int_{-R}^{+R} e^{i(l-k)x} dx = \frac{2 \sin((l-k)R)}{l-k}, \quad R \rightarrow +\infty$$

значение интеграла колеблется, но не стремится к какому-либо пределу. Мы можем домножить подынтегральное выражение на какой-либо регуляризующий фактор, например $e^{-\alpha|x|}$, после чего перейти к пределу $\alpha \rightarrow +0$, но смысл формулы $\langle \xi_k | \xi_l \rangle = \delta(k-l)$ не в этом, а в том, что скалярное произведение для функций, и их преобразования Фурье записывается одинаково:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(k) \psi(k) dk,$$

$$\phi^*(k) = \langle \phi | \xi_k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} dx, \quad \psi(k) = \langle \xi_k | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} \psi(x) dx.$$

Поскольку $|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) |\phi_x\rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(k) |\xi_k\rangle dk$ мы можем удобно записать друг через друга $\psi(k) = \langle \xi_k | \psi \rangle$ и $\psi(x) = \langle \phi_x | \psi \rangle$ используя ядро $\langle \xi_k | \phi_x \rangle = \langle \phi_x | \xi_k \rangle^*$:

$$\psi(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \xi_k | \phi_x \rangle \psi(x) dx, \quad \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \psi(k) dk = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \phi_x | \xi_k \rangle \psi(k) dk.$$

Если величина x безразмерна, то k тоже безразмерна и мы можем рассматривать преобразование Фурье по своему выбору как замену базиса, либо как унитарное преобразование. Если же x и k размерны, то мы можем рассматривать преобразование Фурье как замену базиса, но не можем рассматривать их как унитарное преобразование, впрочем, мы всегда можем обезразмерить переменные разделив x и умножив k на некоторую константу x_0 с размерностью x .

Часто в физике в качестве аргумента преобразования Фурье выбирается не волновое число k , а импульс $p = \hbar k$. В этом случае нормированные волновые функции нового базиса должны быть поделены на $\sqrt{\hbar}$:

$$\xi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px}, \quad p \in \mathbb{R}.$$

Другое преобразование Фурье*

Определённое выше преобразование Фурье отличается от обратного преобразования Фурье только знаком в комплексной экспоненте, однако наличие нормировочного множителя $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$, или $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ часто неудобно. Тем более, что без этого множителя волновая функция $\psi_p(x) = e^{ikx} = e^{\frac{i}{\hbar} px}$ оказывается отнормирована на одну частицу на единицу объёма.

Избавиться от корней можно переопределив скалярное произведение в импульсном представлении:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(p) \psi(p) \frac{dp}{2\pi\hbar} \quad (4.40)$$

Можно сказать, что мы ввели в пространстве импульсов/волновых чисел меру вида $\frac{dp}{2\pi\hbar} = \frac{dk}{2\pi}$. Т.е. интегрирование по импульсу всегда ведётся по такой мере. Если размерность пространства импульсов n , то такая мера имеет вид $\frac{d^n p}{(2\pi\hbar)^n} = \frac{d^n k}{(2\pi)^n}$.

Теперь мы можем записывать преобразование Фурье и обратное преобразование Фурье без корней:

$$\begin{aligned} \psi(p) &= \langle \phi_p | \psi \rangle = \int e^{-\frac{i}{\hbar} px} \psi(x) dx, & \phi_p(x) &= e^{-\frac{i}{\hbar} px} = \langle \phi_x | \phi_p \rangle \\ \psi(x) &= \langle \phi_x | \psi \rangle = \int e^{\frac{i}{\hbar} px} \psi(p) \frac{dp}{2\pi\hbar}, & \phi_x(p) &= e^{\frac{i}{\hbar} px} = \langle \phi_p | \phi_x \rangle = \langle \phi_x | \phi_p \rangle^*. \end{aligned}$$

Условия нормировки для импульсного базиса и для координатного базиса различного вида:

$$\langle \phi_x | \phi_{x'} \rangle = \phi_{x'}(x) = \delta(x - x'), \quad \langle \phi_p | \phi_{p'} \rangle = \phi_{p'}(p) = 2\pi\hbar \delta(p - p').$$

Именно такие соглашения предпочитают в большинстве книг физики. Это весьма удобно: все дифференциалы импульса делятся $2\pi\hbar$, и никаких корней не возникает. Однако при этом прямое и обратное преобразования Фурье выглядят различно, различаются условия нормировки, а пространство волновых функций в координатном и импульсном представлении различаются даже после обезразмеривания, что затрудняет рассмотрение преобразований Фурье в качестве унитарных преобразований. По этой причине математики, часто предпочитают преобразование Фурье в том виде, в котором они приведены в разделе 4.6.3.

4.7 Операторы

Операторы в квантовой теории во многом аналогичны матрицам. В случае, когда пространство волновых функций конечномерно, операторы оказываются обычными матрицами. Можно сказать, что операторы — это и есть матрицы. Не случайно, например, описывающий смешанные квантовые состояния оператор называется матрицей плотности.

Здесь мы постараемся сформулировать основные свойства операторов в таком виде, чтобы описание не зависело от того, конечна или бесконечна размерность пространства волновых функций.

Линейный оператор действует на вектор состояния и превращает его в другой вектор состояния, причём полученное состояние линейно зависит от исходного¹²:

$$\hat{A} : D \rightarrow V, \quad D, V \subset \mathcal{H},$$

¹² Область определения D оператора $\hat{A}$ может не совпадать с пространством $\mathcal{H}$. Причём такое несоответствие имеет место для очень многих физически осмысленных операторов. Обычно физики не обращают внимания на такие «мелочи», однако иногда такие «чисто математические» тонкости имеют интересный физический смысл.

$$\begin{aligned}\hat{A}\psi &= \phi, & \psi, \phi \in \mathcal{H} & \text{— чистые состояния,} \\ \hat{A}(\alpha\psi) &= \alpha(\hat{A}\psi), & \alpha \in \mathbb{C}, & \quad \hat{A}(\psi + \phi) = \hat{A}\psi + \hat{A}\phi.\end{aligned}$$

Операторы можно задавать различными способами. Например, оператор частной производной по координате x , если волновая функция задана просто, как функция от координат, можно задать как дифференциальный оператор $\frac{\partial}{\partial x} : \psi \mapsto \frac{\partial \psi}{\partial x}$. Другие операторы может быть удобнее задать через их действие на все векторы некоторого базиса, или в виде матрицы.

4.7.1 Ядро оператора*

По аналогии с обычной формулой умножения матрицы на столбец $(A\vec{a})_m = \sum_n A_{mn}a_n$ мы можем представить действие оператора $\hat{A} : D \rightarrow V$ на кет-вектор следующим образом

$$\hat{A}\psi(x) = \sum_{y \in W} A_{xy}\psi(y) + \int_{y \in U} A_{xy}\psi(y) dy. \quad (4.41)$$

Здесь W — дискретный спектр, по которому берётся сумма, как для обычных матриц, а U — непрерывный спектр, по которому берётся интеграл. Функция A_{xy} — обобщённая функция от x и y . Если волновая функция — функция от одного набора переменных x , то ядро оператора — функция от двух наборов переменных (x, y) . Её можно представить как линейный функционал на пространстве $D \times \mathcal{H}^*$, который ставит в соответствие объекту вида $|\psi\rangle\langle\phi| \in D \times \mathcal{H}^*$ число $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$. В следующей формуле, чтобы не загромождать запись, мы ограничились случаем, когда базис содержит векторы только непрерывного спектра:

$$\begin{aligned}A : D \times \mathcal{H}^* &\rightarrow \mathbb{C}, & \psi \in D, & \quad \phi \in \mathcal{H} = L_2(U), \\ A : |\psi\rangle\langle\phi| &= \psi \times \phi^\dagger \mapsto \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \int_{x, y \in U} \phi^*(x) A_{xy} \psi(y) dx dy.\end{aligned} \quad (4.42)$$

Интеграл здесь следует понимать, как линейный функционал от $\psi \times \phi^\dagger$. (Сравните с разделом 4.6.3 «Замена базиса».)

4.7.2 Матричный элемент оператора

Ядро оператора может быть записано через действие оператора на базисные векторы

$$A_{xy} = \langle\phi_x|\hat{A}|\phi_y\rangle. \quad (4.43)$$

В этом можно легко убедиться подставив в формулу (4.41) компоненты базисных волновых функций (4.31), для дискретного спектра, и (4.34), для непрерывного.

Аналогичную формулу (4.13) мы уже писали для элемента обычной матрицы.

Формулы (4.42) и (4.43) позволяют записывать матричные элементы по одному базису через компоненты операторов/матриц и состояний/векторов в другом базисе.

В соответствии со сложившейся в квантовой механике традицией мы будем называть матричным элементом также значение билинейной формы, соответствующей данному оператору на паре произвольных состояний, и будем использовать соответствующие обозначения:

$$A_{\phi\psi} = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle. \quad (4.44)$$

Если один или оба состояния в формуле (4.44) относятся к непрерывному спектру, то понимать данную формулу следует в соответствии с разделами 4.6.2 «Природа состояний непрерывного спектра», 4.7.1 «Ядро оператора».

4.7.3 Базис собственных состояний

Подобно эрмитовой (унитарной) матрице эрмитов (унитарный) оператор $\hat{A}$ можно диагонализировать: подобрать базис собственных состояний $|\phi_{xy}\rangle$ (x — собственное число, y нумерует векторы с одинаковыми собственными числами)

$$|\psi\rangle = \left(\sum_{x \in W} + \int_U dx \right) \left(\sum_{y \in W_y(x)} + \int_{U_y(x)} dy \right) \psi(x, y) |\phi_{xy}\rangle, \quad \hat{A}|\phi_{xy}\rangle = x|\phi_{xy}\rangle. \quad (4.45)$$

В таком представлении действие оператора можно представить как

$$\hat{A}\psi(x, y) = x \psi(x, y).$$

Таким образом, зная спектр (набор собственных чисел) эрмитового (унитарного) оператора и базис собственных состояний этого оператора можно описать действие этого оператора на произвольное состояние.

4.7.4 Векторы и их компоненты**

Внимательный читатель может обратить внимание, на некоторую двусмысленность введённых нами обозначений. Если, например, мы пишем разложение вектора по базису собственных состояний

$$|\psi\rangle = \sum_k \psi(k) |\phi_k\rangle, \quad \hat{A}|\phi_k\rangle = k|\phi_k\rangle,$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_k \psi(k) |\phi_k\rangle,$$

то $\psi(k)$ задаёт компоненту номер k вектора $|\psi\rangle$.

А если мы пишем

$$\hat{A}\psi(k) = k \psi(k),$$

то тогда $\psi(k)$ задаёт уже не компоненту вектора, а весь вектор, заданный как функция переменной, обозначенной буквой k .

Формально последнюю формулу было бы более правильно записать так:

$$\underbrace{(\hat{A} \underbrace{\psi}_{\text{вектор}})}_{\text{компонента}}(k) = k \psi(k),$$

но обычно мы не будем столь педантичны.

Как правило определить, что именно обозначает $\psi(k)$, или другое подобное обозначение можно исходя из контекста. В частности, если по переменной k берётся сумма или интеграл, то имеется в виду заведомо компонента вектора.

Впрочем, подобная путаница между обозначением функции и её значения в некоторой точке — обычное дело в разных областях физики и математики.

4.7.5 Среднее от оператора

Диагональные матричные элементы от эрмитовых операторов играют особую роль: они задают средние значения соответствующих *наблюдаемых* (т.е. наблюдаемых величин) по выбранному состоянию.

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad |\psi_n\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}}. \quad (4.46)$$

Это соотношение легко выводится, если записать вектор $|\psi_n\rangle$ в базисе собственных функций оператора $\hat{A}$ (далее для простоты формулы пишутся для невырожденного спектра — на каждое собственное число приходится ровно один базисный вектор). С учётом того, что состояния дискретного спектра нормированы на δ -символ, а состояния непрерывного спектра — на δ -функцию

$$\langle \phi_k | \phi_l \rangle = \delta_{kl}, \quad k, l \in W, \quad \langle \phi_x | \phi_y \rangle = \delta(x-y), \quad x, y \in U, \quad \langle \phi_k | \phi_x \rangle = 0, \quad x \in U, \quad k \in W$$

получаем среднее от $x \in U \cup W$ с весом (вероятностью для дискретного спектра и плотностью вероятности для непрерывного) $|\psi(x)|^2$:

$$\langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle = \left(\sum_{x \in W} + \int_U dx \right) x \cdot |\psi(x)|^2.$$

4.7.6 Разложение оператора по базису

Если у нас есть базис в пространстве состояний, то мы можем ввести базис в пространстве операторов $\mathcal{H} \times \mathcal{H}^*$, состоящий из операторов вида

$$|\phi_x\rangle \langle \phi_y|.$$

Произведение кет-вектора на бра-вектор следует понимать в смысле (4.16), (4.17).

Теперь матричный элемент оператора оказывается коэффициентом разложения оператора по базису. Для базиса, содержащего только векторы непрерывного спектра можно записать:

$$\hat{A} = \int_{x, y \in U} |\phi_x\rangle A_{xy} \langle \phi_y| dx dy.$$

Если базис содержит и непрерывный и дискретный спектры, то получается более громоздкая формула

$$\begin{aligned} \hat{A} = & \int_{x, y \in U} |\phi_x\rangle A_{xy} \langle \phi_y| dx dy + \sum_{x, y \in W} |\phi_x\rangle A_{xy} \langle \phi_y| + \\ & + \int_{x \in U} \sum_{y \in W} |\phi_x\rangle A_{xy} \langle \phi_y| dx + \sum_{x \in W} \int_{y \in U} |\phi_x\rangle A_{xy} \langle \phi_y| dy, \end{aligned}$$

которую можно написать более коротко следующим образом:

$$\hat{A} = \left(\sum_{x \in W} + \int_{x \in U} dx \right) \left(\sum_{y \in W} + \int_{y \in U} dy \right) |\phi_x\rangle A_{xy} \langle \phi_y|. \quad (4.47)$$

Разложение единичного оператора по произвольному ортонормированному базису можно записать так:

$$\hat{1} = \left(\sum_{x \in W} + \int_{x \in U} dx \right) |\phi_x\rangle \langle \phi_x|. \quad (4.48)$$

4.7.7 Области определения операторов в бесконечномерии*

Сколь велико различие между конечномерными и бесконечномерными пространствами и матрицами/операторами действующими на них? На первый взгляд различие сводится к замене диапазона, который пробегает индекс при суммировании. Если диапазон изменения индекса содержит непрерывные куски, то по этим кускам вместо суммирования надо интегрировать. И это всё? Нет, не всё! Когда мы считаем скалярное произведение или скалярный квадрат, то сумма конечного числа членов определена всегда. При вычислении бесконечной суммы (ряда) или интеграла выражение может оказаться расходящимся. Конечно, мы оставляем в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ только такие векторы, квадрат которых определён. Это гарантирует что скалярное произведение определено для любой пары векторов:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \frac{1}{4} (\|\psi + \phi\|^2 - \|\psi - \phi\|^2 + i\|\psi + i\phi\|^2 - i\|\psi - i\phi\|^2).$$

Такое определение скалярного произведения через норму называют *процедурой поляризации*.¹³

Однако действие некоторых операторов может выводить некоторые векторы из гильбертова пространства. Например, возможно, что функция квадратично интегрируема

$$\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx < \infty, \quad \Rightarrow \quad \psi \in \mathcal{H}$$

в но под действием оператора $\hat{x}$ (после умножения на x) интеграл уже расходится

$$\|\hat{x}\psi\|^2 = \langle \hat{x}\psi | \hat{x}\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} x^2 |\psi(x)|^2 dx \rightarrow \infty, \quad \Rightarrow \quad \hat{x}\psi \notin \mathcal{H}$$

В этом случае результат действия оператора на вектор $\hat{x}|\psi\rangle$ не определён в пространстве $\mathcal{H}$. Таким образом, оказывается, что область определения и область значения какого-либо оператора могут не совпадать с пространством чистых состояний $\mathcal{H}$. Мы иногда можем формально записать компоненты такого неопределённого вектора, но такой квадратично неинтегрируемый вектор не только не попадает в пространство $\mathcal{H}$, но и не имеет физического смысла.

Часто ли такое случается с физически осмысленными операторами? Очень часто. Всегда, когда спектр оператора не ограничен, т.е. существуют собственные числа сколь угодно большие по абсолютной величине, некоторые состояния из $\mathcal{H}$ не попадают в его область определения, но при этом область определения может

¹³Чтобы процедура поляризации определяла скалярное произведение через норму надо, чтобы норма удовлетворяла правилу параллелограмма

$$\|\psi + \phi\|^2 + \|\psi - \phi\|^2 = 2\|\psi\|^2 + 2\|\phi\|^2.$$

В этой формуле легко узнать геометрическое тождество для обычной двумерной плоскости натянутой на векторы ψ и ϕ .

быть плотна в пространстве $\mathcal{H}$. К числу неограниченных с плотной в $\mathcal{H}$ областью определения относятся операторы импульса, координаты (в бесконечном пространстве), энергии и др.¹⁴

Впрочем, когда подобные неограниченные эрмитовы операторы $\hat{A}$ с плотной областью определения используются как генераторы, для построения соответствующих унитарных операторов $e^{i\alpha\hat{A}}$ ($\alpha \in \mathbb{R}$), унитарные операторы оказываются определены всюду. Благодаря ограниченности собственных чисел ($|u| \equiv 1$) для всех унитарных операторов область определения совпадает с областью значений и совпадает со всем пространством $\mathcal{H}$.

Когда при определении неограниченного эрмитового оператора мы пишем $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, то это означает, также совпадение всюду плотных областей определения для операторов $\hat{A}$ и $\hat{A}^\dagger$. Именно для таких операторов доказывается теорема о диагонализации (полноте базиса собственных функций). Так что, если мы доказали, что некоторый оператор является симметричным, т.е., что

$$\langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A} \phi | \psi \rangle$$

для всякой пары ϕ, ψ , для которой определена левая часть равенства, то это ещё не эрмитовость.

(*) Требование совпадения областей определения $\hat{A}$ и $\hat{A}^\dagger$ можно рассматривать по аналогии с конечномерным пространством как требование квадратности матрицы. Эрмитову матрицу мы можем диагонализировать, а для этого она должна быть квадратной. В конечномерном случае условие квадратности матрицы $\hat{A}$ означает, что области определения для неё и сопряжённой матрицы $\hat{A}^\dagger$ совпадают. Аналогично мы требуем совпадения областей определения операторов $\hat{A}$ и $\hat{A}^\dagger$ в бесконечномерном случае.

Часто, когда говорят об эрмитовости какого-либо оператора на самом деле имеют в виду эрмитовость другого оператора, который получается из исходного продолжением (продолжением) на большую область определения.

Например оператор импульса, на прямой можно определить как эрмитов оператор, продолжив оператор $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Оператор импульса на полупрямой является симметричным для функций, обращающихся в ноль на границе, но он не может быть продолжен до эрмитового оператора. По этой причине импульс на полупрямой не имеет собственных функций.

Для отличия эрмитовых (или продолжаемых до эрмитовых) операторов от просто симметричных мы можем использовать следующий простой критерий: *эрмитов оператор всегда диагонализуется* (имеет полный базис собственных векторов).

Именно эрмитовы операторы в квантовой механике сопоставляются наблюдаемым величинам, так что «чисто математическое» различие между симметричными и эрмитовыми операторами на самом деле имеет физический смысл.

4.7.8 След оператора*

Данный раздел нужен в первую очередь для работы с матрицами плотности (4.8 «Матрица плотности*»). При первом чтении всё что касается матриц плотности можно пропустить, включая этот раздел.

¹⁴В общем случае ограниченным называется оператор $\hat{A}$, для которого конечна норма $\|A\| = \sup_{\psi} \frac{\|\hat{A}\psi\|}{\|\psi\|} < \infty$.

По аналогии со следом матрицы можно ввести след оператора как сумму (интеграл) диагональных матричных элементов:

$$\mathrm{tr} \hat{A} = \left(\sum_{x \in W} + \int_{x \in U} dx \right) A_{xx} = \left(\sum_{x \in W} + \int_{x \in U} dx \right) \langle x | A | x \rangle. \quad (4.49)$$

В отличие от конечномерных матриц, для которых след определён всегда, для операторов соответствующий интеграл (сумма) может расходиться. В частности след единичного оператора равен размерности пространства и расходится для бесконечномерного пространства.

Для оператора, записанного как произведение кет-вектора на бра-вектор след можно записать следующим образом:

$$\mathrm{tr} |\psi\rangle\langle\phi| = \langle\phi|\psi\rangle. \quad (4.50)$$

Если дополнить формулу (4.50) условием линейность следа:

$$\mathrm{tr}(\alpha \hat{A} + \hat{B}) = \alpha \mathrm{tr} \hat{A} + \mathrm{tr} \hat{B}, \quad (4.51)$$

то её можно принять в качестве определения следа вместо (4.49).

То, что (4.47), (4.50), (4.51) $\Rightarrow$ (4.49) очевидно.

В свою очередь из определения (4.49) сразу следует линейность (4.51), а формула (4.50) легко выводится:

$$\begin{aligned} \mathrm{tr} |\psi\rangle\langle\phi| &= \left(\sum_{x \in W} + \int_{x \in U} dx \right) \langle\phi_x|\psi\rangle\langle\phi|\phi_x\rangle = \\ &= \left(\sum_{x \in W} + \int_{x \in U} dx \right) \langle\phi|(|\phi_x\rangle\langle\phi_x|)|\psi\rangle = \\ &= \langle\phi| \left[\left(\sum_{x \in W} + \int_{x \in U} dx \right) |\phi_x\rangle\langle\phi_x| \right] |\psi\rangle = \langle\phi|\hat{1}|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle. \end{aligned}$$

Формула (4.50) позволяет циклически переставлять под следом не только операторы (матрицы), но и бра- и кет-векторы (строки и столбцы):

$$\mathrm{tr}(ab \dots yz) = \mathrm{tr}(zab \dots y) = \mathrm{tr}(b \dots yza). \quad (4.52)$$

Здесь $a, b, \dots, y, z$ — произвольный набор чисел, операторов, бра- и кет-векторов, записанных в виде произведения, для которого имеет смысл след, т.е. в виде оператора или числа (матрицы 1×1).

Мы можем принять (4.52) вместе с условием линейности (4.51) в качестве ещё одного определения следа, если ввести условие, что след числа равен самому числу:

$$\mathrm{tr} \alpha = \alpha, \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (4.53)$$

(!!!) Определив след от числа как само это число, мы определили это число как матрицу 1×1 , однако мы можем понимать то же число как матрицу $n \times n$ вида $\alpha \hat{1}$, где $\hat{1}$ — единичная матрица $n \times n$. Очевидно, что $\mathrm{tr}(\alpha \hat{1}) = n\alpha \neq \alpha = \mathrm{tr} \alpha$.

Частичный след оператора*

Пусть пространство состояний представлено в виде тензорного произведения:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2.$$

Это означает, что волновая функция представляется как функция от двух наборов аргументов, отвечающих первому и второму пространствам:

$$\psi(x, y) = \langle y | \langle x | \psi \rangle.$$

$$|\psi\rangle = \sum_{x,y} \psi(x, y) |x\rangle |y\rangle.$$

(Для упрощения формул мы пишем только суммы, как для дискретного спектра.) Здесь $(\langle y | \langle x |)^\dagger = |x\rangle |y\rangle$ — базисное состояние в пространстве $\mathcal{H}$ записанное как произведение базисных состояний $|x\rangle$ и $|y\rangle$ в пространствах $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$.

Ядро оператора в пространстве $\mathcal{H}$ оказывается функцией (для непрерывного спектра м.б. обобщённой функцией) уже от двух двойных наборов аргументов:

$$A(x, y; x', y') = \langle y | \langle x | \hat{A} | x' \rangle | y' \rangle.$$

$$\hat{A} = \sum_{x,y;x',y'} |x\rangle |y\rangle A(x, y; x', y') \langle y' | \langle x' |.$$

Для оператора на пространстве $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ мы можем определить частичный след по пространству $\mathcal{H}_2$:

$$\text{tr}_{\mathcal{H}_2} \hat{A} = \sum_{x,y;x'} |x\rangle A(x, y; x', y) \langle x' | = \sum_y \langle y | \hat{A} | y \rangle. \quad (4.54)$$

Получившийся объект является не числом, как обычный след, а оператором над пространством $\mathcal{H}_1$. Ядро следа зависит только от одного двойного набора переменных и задаётся соотношением

$$\text{tr}_{\mathcal{H}_2} \hat{A}(x; x') = \sum_{y;y} A(x, y; x', y). \quad (4.55)$$

Заметим, что при преобразовании базиса в пространстве $\mathcal{H}_2$ векторы и операторы в пространстве $\mathcal{H}_1$ не преобразуются (т.е. с точки зрения трансформационных свойств ведут себя как скаляры/числа, хотя и не коммутативные).

Все приведённые выше способы вычисления следа относятся также и к частичному следу по $\mathcal{H}_2$ с той оговоркой, что в качестве состояний, по которым берётся след рассматриваются только состояния на $\mathcal{H}_2$. В частности по аналогии с (4.53) (и с теми же оговорками!) для любого оператора $\hat{A}_1 : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$

$$\text{tr}_{\mathcal{H}_2} \hat{A}_1 = \hat{A}_1. \quad (4.56)$$

Между частичным и полным следом существует очевидное соотношение:

$$\text{tr} \hat{A} = \text{tr}_{\mathcal{H}_1} \text{tr}_{\mathcal{H}_2} \hat{A} = \text{tr}_{\mathcal{H}_2} \text{tr}_{\mathcal{H}_1} \hat{A}. \quad (4.57)$$

4.8 Матрица плотности*

До сих пор мы описывали состояния с помощью векторов состояния (волновых функций), однако существует другой, более общий способ описания состояния квантовой системы — *матрица плотности*.

Матрица плотности была введена Л.Д. Ландау и И. фон Нейманом в 1927 г.

Наибольшее, что мы в принципе можем знать о состоянии квантовой системы — вектор состояния $|\psi\rangle$ (волновая функция $\psi(x)$) с точностью до произвольного фазового множителя (если фиксировать нормировку). Поэтому вектор состояния называют ещё *чистым состоянием*. Такое состояние может быть описано матрицей плотности (на самом деле не матрицей, а оператором)

$$\hat{\rho}_1 = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (4.58)$$

Если мы не знаем в каком чистом состоянии находится система, но знаем с какой вероятностью p_k какой вектор состояния $|\psi_k\rangle$ ей соответствует, то нам известно *смешанное состояние*. Такое состояние может быть описано матрицей плотности

$$\hat{\rho} = \sum_k |\psi_k\rangle p_k \langle\psi_k|, \quad \langle\psi_k|\psi_k\rangle = 1. \quad (4.59)$$

Состояния $|\psi_k\rangle$ нормированы, но не обязательно ортогональны.

В общем случае матрица плотности — неотрицательно определённый эрмитов оператор с единичным следом, т.е.

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger, \quad \langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}, \quad \text{tr} \hat{\rho} = 1. \quad (4.60)$$

Смысл этих условий: вещественность и неотрицательность вероятности, нормировка суммарной вероятности на единицу. От условия единичного следа матрицы плотности можно отказаться, приняв, что матрица плотности определена с точностью до вещественного положительного множителя. Тогда значение следа задаёт *нормировку матрицы плотности*.

Нормированная на единицу матрицы плотности однозначно определяется состоянием системы и содержит всю информацию, необходимую для описания системы, т.е. позволяет вычислять временную эволюцию системы (про эволюцию на языке матрицы плотности см. ниже в разделе 5 «Принципы квантовой механики») любые вероятности, получаемые при измерениях, и средние любых наблюдаемых,

Вычисление среднего значения задаётся следующим образом:

$$\langle\hat{A}\rangle_\rho = \text{tr}(\hat{A}\hat{\rho}). \quad (4.61)$$

Используя линейность следа возможность циклически переставлять сомножители (включая бра- и кет-векторы) под следом (4.52) убедимся на примере матриц плотности (4.58) и (4.59), что вычисляемое по формуле (4.61) соответствует принятым нами ранее для волновых функций правилам:

$$\langle\hat{A}\rangle_{\rho_1} = \text{tr}(\hat{A}\hat{\rho}_1) = \text{tr}(\hat{A}|\psi\rangle\langle\psi|) = \text{tr}(\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle) = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\hat{A}\rangle_\psi,$$

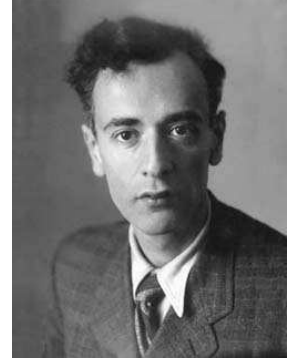


Рис. 4.4:
Лев Давыдович
Ландау (1908-1968)

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle_\rho &= \text{tr}(\hat{A}\hat{\rho}) = \text{tr} \left(\hat{A} \sum_k |\psi_k\rangle p_k \langle \psi_k| \right) = \sum_k p_k \text{tr}(\hat{A} |\psi_k\rangle \langle \psi_k|) \\
&= \sum_k p_k \langle \psi_k | \hat{A} | \psi_k \rangle = \sum_k p_k \langle \hat{A} \rangle_{\psi_k}.
\end{aligned}$$

Таким образом, в одном случае мы получили то же самое среднее, что и для волновой функции, а в другом — среднее взвешенное с весами p_k от средних значений оператора по чистым состояниям ψ_k .

Вероятность обнаружения системы, описываемой матрицей плотности, в состоянии, принадлежащем некоторому подпространству, как и для случая исходного чистого состояния (4.29) задаётся как среднее от ортогонального проектора $\hat{P}$ на соответствующее подпространство

$$p = \langle \hat{P} \rangle_\rho = \text{tr}(\hat{P}\hat{\rho}). \quad (4.62)$$

Вычисление вероятностей и изменение матрицы плотности при измерении будет обсуждено ниже в разделе 5 «Принципы квантовой механики».

4.8.1 Роль и смысл матрицы плотности*

Исходя из приведённых выше формул для средних в состоянии, задаваемом матрицей плотности, мы можем заключить, что если волновые функции (чистые состояния) учитывают только чисто квантовые неопределённости наблюдаемых величин, то матрицы плотности (смешанные состояния) учитывают как квантовые неопределённости, так и наше классическое незнание того, в каком именно квантовом состоянии находится система.

Заметим, что представление матрицы плотности через волновые функции в виде (4.59) неоднозначно. Таким образом, разделение квантовых и классических вероятностей в матрице плотности в принципе невозможно.

Задаваемое матрицей плотности смешанное состояние (4.59) можно рассматривать как среднее взвешенное от чистых состояний (4.58). Здесь имеется аналогия с классической механикой, где смешанное состояние, задаваемое распределением вероятностей в фазовом пространстве $\varrho(Q, P)$, также может рассматриваться как среднее взвешенное от чистых состояний $\varrho_{\text{ч}}(Q, P) = \delta(Q - Q_0) \delta(P - P_0)$.

Матрица плотности является естественным языком для описания состояния квантовой системы в статистической физике. В частности, распределение Гиббса, при котором вероятность квантового состояния системы с энергией E пропорциональна $e^{-E/T}$, где T — температура, выраженная в единицах энергии (kT , если ввести постоянную Больцмана k) задаётся следующей матрицей плотности нормированной на статсумму:

$$\hat{\rho} = e^{-\frac{\hat{H}}{T}}, \quad Z = \text{tr} \hat{\rho}.$$

Среди физиков нет единства в том, считать ли более фундаментальным описание на языке матрицы плотности, или на языке волновой функции. Матрица плотности предоставляет нам более общее описание, но при этом вносимые матрицей плотности вероятности можно объяснить просто незнанием точного состояния системы (волновой функции). Кроме того, принцип суперпозиции и явление интерференции более удобно описывать с использованием волновых функций, а не матриц плотности.

4.8.2 Матрица плотности для подсистемы*

Целое больше, чем сумма частей.

Аристотель, «Метафизика»^a

^aЦитата не проверена.

Описание квантовой системы на языке матрицы плотности становится необходимым, когда система является частью (подсистемой) некоторой большой системы. Чтобы перейти от системы к подсистеме, необходимо усреднить (взять частичный след) по переменным, описывающим то, что не попадает в выбранную подсистему

$$\hat{\rho}_1 = \text{tr}_2 \hat{\rho}, \quad \rho_1(x; x') = \int \rho(x, y; x', y) dy. \quad (4.63)$$

При таком переходе от системы, к подсистеме чистое состояние может перейти в смешанное. Возьмём, например, следующее состояние большой системы

$$|\Psi\rangle = A_1 |\phi_1\rangle |\chi_1\rangle + A_2 |\phi_2\rangle |\chi_2\rangle$$

Здесь $|\phi_1\rangle$ и $|\phi_2\rangle$ — два ортонормированных состояния подсистемы, $|\chi_1\rangle$ и $|\chi_2\rangle$ — два ортонормированных состояния остатка системы (термостата), $A_1 = e^{i\alpha_1} \sqrt{p_1}$ и $A_2 = e^{i\alpha_2} \sqrt{p_2}$ ($\alpha_1, \alpha_2, p_1, p_2 \in \mathbb{R}_+$, $|A_1|^2 + |A_2|^2 = p_1 + p_2 = 1$) — комплексные амплитуды членов суперпозиции.

Матрица плотности исходной системы имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| &= A_1 A_1^* |\phi_1\rangle\langle\phi_1| |\chi_1\rangle\langle\chi_1| + A_2 A_2^* |\phi_2\rangle\langle\phi_2| |\chi_2\rangle\langle\chi_2| + \\ &+ A_1 A_2^* |\phi_1\rangle\langle\phi_1| |\chi_1\rangle\langle\chi_2| + A_2 A_1^* |\phi_2\rangle\langle\phi_2| |\chi_2\rangle\langle\chi_1|. \end{aligned}$$

$\hat{\rho}$ уже не зависит от общего фазового множителя (который всё равно является нефизическим), а зависит только от вероятностей p_1, p_2 и разности фаз $(\alpha_1 - \alpha_2)$.

Возьмём теперь частичный след по переменным, описывающим термостат, при этом мы можем циклически переставлять под tr_2 только множители χ_i , но не ϕ_i

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_1 = \text{tr}_2 |\Psi\rangle\langle\Psi| &= A_1 A_1^* \text{tr}_2 |\phi_1\rangle\langle\phi_1| |\chi_1\rangle\langle\chi_1| + A_2 A_2^* \text{tr}_2 |\phi_2\rangle\langle\phi_2| |\chi_2\rangle\langle\chi_2| + \\ &+ A_1 A_2^* \text{tr}_2 |\phi_1\rangle\langle\phi_1| |\chi_1\rangle\langle\chi_2| + A_2 A_1^* \text{tr}_2 |\phi_2\rangle\langle\phi_2| |\chi_2\rangle\langle\chi_1| = \\ &= A_1 A_1^* \text{tr}_2 |\phi_1\rangle\langle\phi_1| \langle\chi_1|\chi_1\rangle + A_2 A_2^* \text{tr}_2 |\phi_2\rangle\langle\phi_2| \langle\chi_2|\chi_2\rangle + \\ &+ A_1 A_2^* \text{tr}_2 |\phi_1\rangle\langle\phi_1| \langle\chi_2|\chi_1\rangle + A_2 A_1^* \text{tr}_2 |\phi_2\rangle\langle\phi_2| \langle\chi_1|\chi_2\rangle = \\ &= p_1 |\phi_1\rangle\langle\phi_1| + p_2 |\phi_2\rangle\langle\phi_2|. \end{aligned}$$

Теперь мы полностью потеряли информацию о фазах α_i .

Аналогично мы можем записать матрицу плотности для термостата, взяв частичный след по переменным подсистемы

$$\hat{\rho}_2 = \text{tr}_1 |\Psi\rangle\langle\Psi| = p_1 |\chi_1\rangle\langle\chi_1| + p_2 |\chi_2\rangle\langle\chi_2|.$$

Мы видим, что поскольку матрицы плотности для обоих подсистем не содержат какой-либо информации о фазах α_i знание $\hat{\rho}_1$ и $\hat{\rho}_2$ не позволяет восстановить матрицу плотности всей системы $\hat{\rho}$. В этом смысле, квантовая механика присущ некоторый *хололизм*, т.е. описание сложной системы не сводится к описанию всех её подсистем (см. эпиграф).

Может показаться, что аналогичная ситуация имеет место в классической механике для смешанных состояний. Пусть $\varrho(Q_1, Q_2, P_1, P_2)$ — распределение вероятностей для сложной системы, тогда распределение вероятностей для подсистем имеют вид

$$\begin{aligned}\varrho_1(Q_1, P_1) &= \int \varrho(Q_1, Q_2, P_1, P_2) dQ_2 dP_2, \\ \varrho_2(Q_2, P_2) &= \int \varrho(Q_1, Q_2, P_1, P_2) dQ_1 dP_1.\end{aligned}$$

При этом общее распределение $\varrho(Q_1, Q_2, P_1, P_2)$ в случае общего положения (когда ϱ не представимо в виде произведения функций от Q_1, P_1 и Q_2, P_2) не восстанавливается по распределениям $\varrho_1(Q_1, P_1)$ и $\varrho_2(Q_2, P_2)$, описывающим подсистемы.

Однако в классической механике (точнее даже в классической теории вероятностей) это свойство имеет место только для смешанных состояний. Если классическое состояние сложной системы является чистым, то

$$\varrho(Q_1, Q_2, P_1, P_2) = \delta(Q_1 - Q_1^0)\delta(Q_2 - Q_2^0)\delta(P_1 - P_1^0)\delta(P_2 - P_2^0),$$

состояния подсистем также оказываются чистыми

$$\varrho_1(Q_1, P_1) = \delta(Q_1 - Q_1^0)\delta(P_1 - P_1^0), \quad \varrho_2(Q_2, P_2) = \delta(Q_2 - Q_2^0)\delta(P_2 - P_2^0)$$

причём состояние сложной системы может быть восстановлено

$$\varrho(Q_1, Q_2, P_1, P_2) = \varrho_1(Q_1, P_1)\varrho_2(Q_2, P_2).$$

В квантовом случае, как мы показали выше, чистое состояние сложной системы в общем случае не восстановимо по состояниям подсистем.

Чистое состояние системы может дать смешанное для подсистемы. Возможна и обратная ситуация, когда смешанное состояние системы даёт чистое для подсистемы. Пусть

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2.$$

Тогда если $\hat{\rho}_1 = |\psi\rangle\langle\psi|$ — чистое состояние подсистемы 1, а $\hat{\rho}_2$ — смешанное состояние подсистемы 2, то состояние сложной системы $\hat{\rho}$ является смешанным. В данном случае

$$\hat{\rho}_1 = \text{tr}_2(\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2) = \hat{\rho}_1 \underbrace{(\text{tr}_2 \hat{\rho}_2)}_{=1}, \quad \hat{\rho}_2 = \text{tr}_1(\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2) = \underbrace{(\text{tr}_1 \hat{\rho}_1)}_{=1} \hat{\rho}_2.$$

4.9 Наблюдаемые*

Наблюдаемые величины (*наблюдаемые*) в физике — величины, которые мы можем в принципе измерить на эксперименте. В классической механике в полностью определённом состоянии наблюдаемая — просто функция от состояния системы. Поэтому в классике вопрос о наблюдаемых часто обходится. В квантовой теории в одном и том же состоянии результаты измерения одной и той же наблюдаемой могут быть различны.

4.9.1 Квантовые наблюдаемые*

В стандартной терминологии квантовой механики *наблюдаемые величины*, или просто *наблюдаемые* отождествляются с эрмитовыми операторами.

Спектр наблюдаемой, который мы уже упоминали как набор значений, которые она может принимать, отождествляется со *спектром оператора* — набором его собственных чисел. Состояния, для которых значение наблюдаемой определено и равно некоторому собственному числу, оказываются *собственными состояниями* соответствующего оператора, отвечающими данному собственному числу.

Каждой наблюдаемой $\hat{A}$ мы можем сопоставить её спектральное разложение: разбиение пространства чистых состояний $\mathcal{H}$ на подпространства $\mathcal{H}_\alpha = \hat{P}_\alpha \mathcal{H}$, в которых значение данной наблюдаемой определено и равно некоторому вещественному числу α . (В данном случае мы обсуждаем случай дискретного спектра.) Оператор $\hat{A}$ в этом случае удобно представить через собственные числа α и соответствующие проекторы $\hat{P}_\alpha$:

$$\begin{aligned}\hat{A} = \hat{A}^\dagger &= \sum_{\alpha} \alpha \hat{P}_\alpha, \quad \alpha \in V \subset \mathbb{R}, \\ \sum_{\alpha} \hat{P}_\alpha &= \hat{1}, \quad \hat{P}_\alpha^\dagger = \hat{P}_\alpha, \quad \hat{P}_\alpha \hat{P}_\beta = \delta_{\alpha\beta} \hat{P}_\alpha.\end{aligned}$$

Через спектральное разложение мы можем легко определить действие оператора наблюдаемой на состояние

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \alpha \hat{P}_\alpha |\psi\rangle$$

и среднее значение наблюдаемой в данном состоянии

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{\alpha} \alpha \langle \psi | \hat{P}_\alpha | \psi \rangle = \sum_{\alpha} \alpha p_\alpha,$$

где

$$p_\alpha = \langle \psi | \hat{P}_\alpha | \psi \rangle$$

— вероятность того, что измеренное значение наблюдаемой $\hat{A}$ совпадёт с α .

Для непрерывного спектра суммы по α следует заменить на интегралы по проекторнозначной мере (см. 5.3.1 «Проекторнозначная мера**»).)

На множестве наблюдаемых возможны следующие операции, результатом которых снова являются наблюдаемые:

- $c\hat{A}$ — умножение на вещественное число $c \in \mathbb{R}$,
- $\hat{A} + \hat{B}$ — сложение наблюдаемых $\hat{A}$ и $\hat{B}$,
- $\hat{A} \bullet \hat{B} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2}$ — симметризованное умножение наблюдаемых,
- $\{\hat{A}, \hat{B}\}_q = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}]$ — квантовая скобка Пуассона.

Квантовая скобка Пуассона, как и коммутатор, является скобкой Ли, т.е. линейна по обоим аргументам, антисимметрична и удовлетворяет тождеству Якоби:

$$\{\hat{A}, \{\hat{B}, \hat{C}\}_q\}_q + \{\hat{B}, \{\hat{C}, \hat{A}\}_q\}_q + \{\hat{C}, \{\hat{A}, \hat{B}\}_q\}_q = 0.$$

Таким образом, пространство наблюдаемых оказывается вещественным линейным пространством с двумя операциями умножения (симметризованное умножение и скобка Пуассона), одна из которых симметрична, а вторая — скобка Ли.

Пространство наблюдаемых с перечисленными выше операциями называется *алгеброй наблюдаемых*.

Интересно, что состояние системы, задаваемое как матрица плотности также оказывается элементом алгебры наблюдаемых.

На самом деле не всякий элемент алгебры наблюдаемых может быть и в самом деле измерен, но с точки зрения математического языка теории это *пока*¹⁵ не важно.

4.9.2 Классические наблюдаемые**

В теоретической механике *наблюдаемыми* (классическими наблюдаемыми) называются вещественными функциями на фазовом пространстве $F(Q, P)$.

Для наблюдаемой F для каждого состояния, заданного определёнными значениями координат и импульсов (Q_0, P_0) (классическое чистое состояние), задано определённое значение наблюдаемой

$$F(Q_0, P_0).$$

Для состояния, задаваемого плотностью вероятности $\varrho(Q, P)$ (классическое смешанное состояние) определено среднее значение

$$\langle F \rangle = \int dQ dP \varrho(Q, P) \cdot F(Q, P).$$

На множестве классических наблюдаемых возможны операции, аналогичные введённым выше для квантовых наблюдаемых:

- cF — умножение на вещественное число $c \in \mathbb{R}$,
- $F + G$ — поточечное сложение наблюдаемых F и G ,
- $F \bullet G = F(Q, P) \cdot G(Q, P)$ — обычное поточечное умножение функций,
- $\{F, G\} = \sum_k \left[\frac{\partial F}{\partial Q_k} \frac{\partial G}{\partial P_k} - \frac{\partial G}{\partial Q_k} \frac{\partial F}{\partial P_k} \right]$ — классическая скобка Пуассона.

Классическая скобка Пуассона также является скобкой Ли.

Таким образом, мы получаем *алгебру классических наблюдаемых*, на которой заданы операции, аналогичные операциям, введённым выше для квантовых наблюдаемых.

Интересно, что состояние классической системы, задаваемое как распределение вероятностей $\varrho(Q, P)$ также оказывается элементом алгебры классических наблюдаемых.

¹⁵Из принципиальной неизмеримости некоторых наблюдаемых мы ещё извлечём понятие калибровочной симметрии.

4.9.3 Вещественность наблюдаемых***

Как квантовая, так и классическая алгебры наблюдаемых устроены так, что значения наблюдаемых величин непременно должны быть вещественными.

Однако значения измеряемых на эксперименте наблюдаемых величин вовсе не обязаны быть вещественными. Понятно, что с помощью нормальных операторов мы можем легко ввести комплексные наблюдаемые, но такое обобщение малоинтересно, т.к. такая комплексная наблюдаемая будет просто сводиться к двум коммутирующим вещественным наблюдаемым. Так что в этом разделе мы обсудим более общий случай.

Пусть, например, в городе живут коты разного цвета. Наблюдатель ловит случайным образом одного из котиков и определяет, что с равной вероятностью $\frac{1}{3}$ он может быть рыжим, чёрным или полосатым.

Конечно, мы можем договориться, и пронумеровать окрасы тем или иным способом, например так:

$$\text{чёрный} = 1, \quad \text{рыжий} = 2, \quad \text{полосатый} = 3.$$

После этого, мы посчитаем среднее значение кошачьего окраса и вычислим (поскольку все три окраса равновероятны), что «средний кот» у нас имеет окрас номер 2 (рыжий). Смысла это утверждение не имеет практически никакого, т.к. перенумерацией цветов мы можем сделать «средним» любой цвет из трёх.

Конечно, мы можем попытаться как-то «обнаучить» нумерацию котиков и приписать каждой масти физически осмысленное число, например, альбедо (коэффициент отражения) кошачьей шерсти, но такое «обнаучивание» имеет смысл отнюдь не всегда.

Поэтому, вместо того, чтобы нумеровать кошачьи расцветки, можно честно признать, что некоторые наблюдаемые величины естественно описывать не числами из $\mathbb{R}$, а элементами какого-либо другого множества. На этом множестве операции умножения на вещественное число, операции умножения элементов множества друг на друга, операция взятия среднего и операция взятия скобки Пуассона могут быть не определены, и в этой неопределённости нет ничего страшного.

Для предсказания результата измерения нам на самом деле нужна только одна операция — операция вычисления вероятности того или иного исхода измерения в данном состоянии.

В классическом случае такая наблюдаемая по-прежнему задаётся функцией $F(Q, P)$, но значения функции F уже не обязаны быть вещественными, а могут принадлежать произвольному множеству V .

$$F : (Q, P) \mapsto F(Q, P) \in V.$$

Ни одна из операций, необходимых для алгебры наблюдаемых не является при этом обязательной.

В квантовом случае нам достаточно задать разбиение пространства на ортогональные подпространства для дискретного спектра, (или проекторнозначную меру для непрерывного спектра):

$$\{\hat{P}_\alpha\}_{\alpha \in V}, \quad \sum_\alpha \hat{P}_\alpha = \hat{1}, \quad \hat{P}_\alpha^\dagger = \hat{P}_\alpha, \quad \hat{P}_\alpha \hat{P}_\beta = \delta_{\alpha\beta} \hat{P}_\alpha.$$



Рис. 4.5: Окрас кота — тоже наблюдаемая величина, но мы чаще описываем её словами, чем числами.

Этого достаточно, чтобы определить вероятность любого исхода измерения α :

$$p_\alpha = \langle \psi | \hat{P}_\alpha | \psi \rangle.$$

Умножать волновую функцию на элемент множества $V \not\subset \mathbb{C}$ мы не можем, так что такой наблюдаемой нельзя сопоставить оператор. Соответственно нельзя вычислить и среднее значение.

Понятно, что мы можем вручную перенумеровать элементы V вещественными числами и всё таки определить оператор наблюдаемой величины, но после этого не следует удивляться тому, что получившийся искусственный оператор ведёт себя неестественным образом.

Приведём пример такого неестественных оператора.

Угол поворота вокруг какой-либо оси мы можем задавать вещественным числом. При этом сложение таких углов, умножение их на вещественные числа и усреднение будет иметь хороший геометрический смысл. Однако угловая координата (для определённости возьмём угол φ в цилиндрических координатах) такого хорошего смысла уже не имеет. Нулевое значение угловой координаты, в отличие от нулевого значения угла поворота, никак не выделено, это лишает смысла операции сложения угловых координат, их умножения на число и усреднения. Операция вычитания угловых координат, тем не менее, имеет смысл. Чтобы увидеть это, достаточно повернуть систему координат вокруг оси z на некоторый угол $\delta\varphi$, при этом преобразовании исходные величины и результаты «нехороших» действий преобразуются по разным законам:

$$\begin{aligned} \varphi_1 &\rightarrow \varphi_1 + \delta\varphi, & \varphi_1 + \delta\varphi < 2\pi \\ \varphi_1 &\rightarrow \varphi_1 + \delta\varphi - 2\pi, & \varphi_1 + \delta\varphi \geq 2\pi \\ \varphi_2 &\rightarrow \varphi_2 + \delta\varphi, & \varphi_2 + \delta\varphi < 2\pi \\ \varphi_2 &\rightarrow \varphi_2 + \delta\varphi - 2\pi, & \varphi_2 + \delta\varphi \geq 2\pi \\ (\varphi_1 + \varphi_2) &\rightarrow (\varphi_1 + \varphi_2) + 2\delta\varphi, & (\varphi_1 + \varphi_2) + 2\delta\varphi < 2\pi, \\ (\varphi_1 + \varphi_2) &\rightarrow (\varphi_1 + \varphi_2) + 2\delta\varphi - 2\pi, & 4\pi > (\varphi_1 + \varphi_2) + 2\delta\varphi \geq 2\pi, \\ (\varphi_1 + \varphi_2) &\rightarrow (\varphi_1 + \varphi_2) + 2\delta\varphi - 4\pi, & 6\pi > (\varphi_1 + \varphi_2) + 2\delta\varphi \geq 4\pi, \\ (\varphi_1 + \varphi_2) &\rightarrow (\varphi_1 + \varphi_2) + 2\delta\varphi - 6\pi, & (\varphi_1 + \varphi_2) + 2\delta\varphi \geq 6\pi. \end{aligned}$$

Одно из следствий этого — невозможность (в общем случае) определения «среднего направления» путём усреднения оператора угловой координаты.

А так ли нам нужны операции алгебры наблюдаемых, если мы можем считать вероятности и без их помощи? На самом деле нам нужна скобка Пуассона чтобы записать уравнения временной эволюции. (Здесь мы забегаем вперёд, обращаясь к материалу раздела 5.2 «Разные представления временной (унитарной) эволюции квантовой системы».)

Если мы описываем временную эволюцию через состояния (представление Лиувилля в классике или представление Шрёдингера в квантовом случае), то мы должны иметь возможность подставить в скобку Пуассона

- состояние (распределение вероятностей в классике или матрицу плотности в квантовом случае),
- гамильтониан (функцию Гамильтона в классике или оператор Гамильтона в квантовом случае).

Если мы описываем временную эволюцию через наблюдаемые (представление Гамильтона в классике или представление Гайзенберга в квантовом случае), то мы должны иметь возможность подставить в скобку Пуассона

- наблюдаемую,
- гамильтониан (функцию Гамильтона в классике или оператор Гамильтона в квантовом случае).

Впрочем, если мы задали наблюдаемую величину не оператором, а набором проекторов $\{\hat{P}_\alpha\}_{\alpha \in V}$, и соответствующих им разрешённых значений α из произвольного множества V , то мы можем с помощью скобки Пуассона записать уравнение эволюции не для оператора наблюдаемой (который попросту отсутствует), а для проекторов $\hat{P}_\alpha$ (хороших эрмитовых операторов).

Единственная наблюдаемая, вещественность (эрмитовость) которой для нас принципиально важна — гамильтониан.

4.10 Операторы координаты и импульса

Операторы координаты и импульса на самом деле уже были нами определены, т.к. мы уже задали для них наборы собственных чисел и базисы собственных функций. Здесь мы рассмотрим одномерный случай, когда пространство состояний в координатном представлении задаётся как $L_2(\mathbb{R})$.

В координатном представлении (в базисе собственных функций оператора координаты) базисные функции самого координатного базиса имеют вид, обычный для непрерывного спектра:

$$\phi_{x_0}(x) = \langle \phi_x | \phi_{x_0} \rangle = \delta(x - x_0).$$

В том же координатном представлении базис собственных функций оператора импульса задаётся волнами де Бройля:

$$\phi_{p_0}(x) = \langle \phi_x | \phi_{p_0} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x}.$$

В импульсном представлении (в базисе волн де Бройля)

$$\phi_{p_0}(p) = \langle \phi_p | \phi_{p_0} \rangle = \delta(p - p_0).$$

В том же импульсном представлении базис собственных функций оператора координаты задаётся комплексным сопряжением волн де Бройля:

$$\phi_{x_0}(p) = \langle \phi_p | \phi_{x_0} \rangle = \langle \phi_{x_0} | \phi_p \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p x_0}.$$

Таким образом, как уже упоминалось ранее, координатное и импульсное представление связаны друг с другом преобразованием Фурье (см. раздел 4.6.3).

В своём представлении каждый оператор действует умножением на аргумент волновой функции (см. 4.7.3 «Базис собственных состояний»). Операторы импульса в координатном и координаты в импульсном представлении задаются как дифференциальные операторы. (Проверьте, что приведённые выше базисные состояния являются собственными для этих операторов!)

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad \hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi(x);$$

$$\hat{p}\psi(p) = p\psi(p), \quad \hat{x}\psi(p) = +i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\psi(p).$$

Коммутатор операторов $\hat{p}$ и $\hat{x}$ вне зависимости от представления имеет вид:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (4.64)$$

Именно уравнение (4.64) можно считать «настоящим» определением координаты и импульса.

(**) Строго говоря, область определения коммутатора $[\hat{x}, \hat{p}]$ состоит из функций, которые остаются квадратично интегрируемыми после взятия производной и умножения на x . Множество таких функций плотно в $L_2(\mathbb{R})$. Тем не менее, в некоторых случаях область определения коммутатора $[\hat{x}, \hat{p}]$ оказывается важной. Если мы будем рассматривать волновые функции периодичные с периодом a , то в область определения коммутатора попадут только функции для которых $\psi(0) = \psi(a) = 0$. И хотя такие функции также плотны в пространстве $L_2([0, a])$, собственные функции оператора импульса (при таких граничных условиях спектр импульса дискретен) в область определения коммутатора уже не попадают.

Задача о неправильном коммутаторе

Многие студенты поначалу считают коммутатор координаты и импульса так:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) + i\hbar \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}x}_1 = \underbrace{-i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}}_{\text{лишний член}} + i\hbar.$$

Найдите ошибку и не делайте такую ошибку сами.

4.11 Вариационный принцип

Среднее значение энергии в состоянии $|\psi\rangle$ может быть записано, как среднее взвешенное от стационарных уровней энергии. Это позволяет заключить, что минимальное среднее значение энергии не может быть меньше, чем энергия *основного состояния* (состояние с минимальной возможной энергией).

$$E_0 = \min_{\psi \neq 0} \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (4.65)$$

Аналогичные методы могут применяться и к другим эрмитовым операторам, но для того, чтобы минимум (максимум) достигался необходимо, чтобы спектр был ограничен снизу (сверху).

4.11.1 Вариационный принцип и уравнения Шрёдингера**

Мы можем написать (4.65) как условный минимум (но достигим он будет только если основное состояние принадлежит дискретному спектру)

$$E_0 = \min_{\langle \psi | \psi \rangle = 1} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$$

и искать условный минимум методом лагранжевых множителей

$$E_0 = \min_{\psi \neq 0} \underbrace{\left(\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle + E(1 - \langle \psi | \psi \rangle) \right)}_{\mathcal{E}[\langle \psi |, | \psi \rangle]}.$$

Т.е. у нас есть функционал

$$\mathcal{E}[\langle\psi|, |\psi\rangle] = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle + E(1 - \langle\psi|\psi\rangle)$$

если $\psi(x)$ — комплексная функция, или

$$\mathcal{E}_1[\psi] = (\psi|\hat{H}|\psi) + E(1 - (\psi|\psi)),$$

если $\psi(x)$ — вещественная функция, а скобки обозначают вещественное скалярное произведение.

Варируя функционал по $\langle\psi|$, $|\psi\rangle$ и по E получаем

$$\delta\mathcal{E} = \underbrace{\langle\delta\psi|(\hat{H}|\psi\rangle - E|\psi\rangle)}_{\text{стац. ур. Шрёдингера}} + \underbrace{(\langle\psi|\hat{H} - \langle\psi|E)}_{\text{сопр. ст. ур. Шр.}}|\delta\psi\rangle + \delta E \underbrace{(1 - \langle\psi|\psi\rangle)}_{\text{нормировка}}.$$

Эта вариация обращается в ноль, если выполнено стационарное уравнение Шрёдингера и условие нормировки на 1. То есть мы можем таким образом находить стационарные состояния дискретного спектра¹⁶, а если отказаться от нормировочного условия, то и состояния непрерывного спектра. При этом лагранжев множитель оказывается собственным значением энергии.

При записи функционала $\mathcal{E}$ в виде интеграла для стандартного гамильтониана $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(x)$ ($\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$)

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\psi^*(x), \psi(x)] &= \int \left(\psi^* \frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} \psi + U(x) \psi^* \psi + E(1 - \psi^* \psi) \right) dx = \\ &= \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*) (\nabla \psi) + U(x) \psi^* \psi + E(1 - \psi^* \psi) \right) dx \end{aligned} \quad (4.66)$$

мы получаем интегральный функционал, подобный функционалам, минимизация которых даёт условия равновесия в статике. От действия в теоретической механике он отличается отсутствием времени.

Мы можем получить и нестационарное уравнение Шрёдингера, если введём функционал действия

$$\mathcal{S}[\langle\psi(t)|, |\psi(t)\rangle] = \int_{t_0}^{t_1} \left(\langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle - \langle\psi(t)|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle \right) dt.$$

В интегральном виде для того же стандартного гамильтониана

$$\mathcal{S}[\psi^*(x), \psi(x)] = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*) (\nabla \psi) + U(x) \psi^* \psi - \psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \right) dx dt. \quad (4.67)$$

Варируя по $\langle\psi|$ и $|\psi\rangle$ получаем

$$\delta\mathcal{S} = \int_{t_0}^{t_1} \left[\underbrace{\langle\delta\psi(t)|(\hat{H}|\psi(t)\rangle - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle)}_{\text{ур. Шрёдингера}} + \underbrace{(\langle\psi(t)|\hat{H} + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(t)|)}_{\text{сопр. ур. Шрёдингера}}|\delta\psi(t)\rangle \right] dt.$$

Таким образом, мы можем получить уравнение Шрёдингера из действия как уравнение теории поля в расширенном (с добавлением времени, как дополнительной координаты) конфигурационном пространстве.

¹⁶Стационарные точки функционала дают **все** стационарные состояния, а не только основное! Однако минимум достигается только на основном состоянии, а прочие дают седловые точки, при условии что спектр неограничен сверху. Если спектр ограничен сверху, то кроме минимума появится ещё и максимум, достигаемый на состоянии и наибольшей энергией.

4.11.2 Вариационный принцип и основное состояние

В некоторых случаях может быть удобно искать точную или приближённую волновую функцию основного состояния минимизируя среднюю энергию (4.65).

Мы можем искать минимум среди волновых функций $\psi(\lambda)$ определённого вида, параметризуемых конечным числом параметров λ , тогда задача становится задачей поиска минимума функции нескольких переменных. Если вид волновых функций, среди которых ищется минимум удачно угадан, то полученная волновая функция может оказаться хорошим приближением к реальной волновой функции основного состояния.

$$E_0 \approx \min_{\lambda} \frac{\langle \psi(\lambda) | \hat{H} | \psi(\lambda) \rangle}{\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle}.$$

Также иногда может быть полезен тот факт, что средняя энергия по любому состоянию даёт оценку сверху на энергию основного состояния:

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (4.68)$$

Например, чтобы доказать наличие отрицательных собственных значений достаточно предъявить одно состояние (не обязательно собственное!), средняя энергия в котором отрицательна.

4.11.3 Вариационный принцип и возбуждённые состояния*

Точно также, как при поиске основного состояния, мы можем искать первое возбуждённое состояние и оценивать его энергию, если ограничим поиск минимума подпространством ортогональным основному состоянию:

$$E_1 = \min_{\psi \neq 0, \langle \psi_0 | \psi \rangle = 0} \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (4.69)$$

Аналогично можно искать и последующие состояния:

$$E_n = \min_{\psi \neq 0, \langle \psi_k | \psi \rangle |_{k < n} = 0} \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (4.70)$$

Однако, если основное и последующие состояния определены не точно, то такой метод даёт дополнительные ошибки, за счёт того, что в результате подпространство, выделенное условием

$$\langle \tilde{\psi}_k | \psi \rangle |_{k < n} = 0,$$

где $\tilde{\psi}_k$ — приближённые собственные состояния, окажется не ортогонально настоящим собственным состояниям ψ_k .

Глава 5

Принципы квантовой механики

5.1 Квантовая механика замкнутой системы

Эволюция замкнутой системы в квантовой механике (2.3.1 «Когда наблюдатель отвернулся...») — самая простая для понимания часть теории. Здесь нет никаких непонятностей и вероятностей: эволюция системы одинаково хорошо предсказуема как вперёд, так и назад по времени.

Эволюция замкнутой системы — вращение пространства состояний. В отличие от привычного нам двумерного или трёхмерного вращения, вращение пространства состояний (которое, как правило, бесконечномерно) может быть задано как поворот в плоскости только для бесконечномалых времён (на этом основана 7.4.2 Теорема Халфина). В общем случае (для независящего от времени гамильтониана) мы можем представить наше пространство состояний как сумму одномерных комплексных (т.е. двумерных вещественных) подпространств и в каждом таком пространстве эволюция будет описываться как обычное вращение в плоскости с определённой угловой скоростью.

Эволюция замкнутой системы может рассматриваться как симметрия — сдвиг по времени, порождаемый оператором энергии (гамильтонианом). Далее в главе 11 «Симметрии-1» мы сделаем похожие выкладки для сдвига по координате и оператора импульса.

5.1.1 Унитарная эволюция и сохранение вероятности

Когда квантовая система свободно эволюционирует не подвергаясь внешним воздействиям, в момент времени t_1 её состояние (волновая функция) $\psi(t_1)$ должно выражаться через состояние $\psi(t_0)$ в предшествующий момент времени t_0 . При этом суммарная вероятность должна сохраняться, т.е., вспоминая смысл скалярного квадрата волновой функции

$$\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_1) | \psi(t_1) \rangle = 1. \quad (5.1)$$

Предположим, что для свободной эволюции квантовой системы выполняется принцип суперпозиции, т.е. если $\chi(t_0) = \alpha\psi(t_0) + \beta\varphi(t_0)$, то $\chi(t_1) = \alpha\psi(t_1) + \beta\varphi(t_1)$ с теми же коэффициентами α и β . Это означает, что волновая функция, описывающая систему в момент времени t_1 получается из волновой функции, описывающей систему в момент времени t_0 с помощью некоторого линейного оператора $\hat{U}(t_1, t_0)$, называемого оператором эволюции:

$$\psi(t_1) = \hat{U}(t_1, t_0)\psi(t_0), \quad \varphi(t_1) = \hat{U}(t_1, t_0)\varphi(t_0), \quad \text{и т.д.}$$

Операторы эволюции должны образовывать семейство, удовлетворяющее следующим условиям:

$$\begin{aligned}\hat{U}(t_0, t_0) &= \hat{1}, \\ \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) &= \hat{U}(t_2, t_0), \quad t_2 \geq t_1 \geq t_0.\end{aligned}$$

Условие (5.1) даёт

$$\langle \psi(t_1) | \psi(t_1) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t_1, t_0) \hat{U}(t_1, t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1. \quad (5.2)$$

Поскольку (5.2) должно выполняться для всякого состояния $\psi(t_0)$, это может быть записано как условие на оператор эволюции

$$\hat{U}^\dagger(t_1, t_0) \hat{U}(t_1, t_0) = \hat{1}. \quad (5.3)$$

Условие (5.3) очень похоже на условие унитарности, но это ещё не оно. Это условие *необходимо* для унитарности, но *достаточно* только в конечномерном случае.¹

Чтобы получить для оператора эволюции унитарность для бесконечномерного пространства состояний можно добавить одно из следующих дополнительных условий:

- Просто потребовать унитарности операторов $\hat{U}(t_1, t_0)$. Это условие самое сильное, даже избыточное, оно предполагает одновременно $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1}$ и $\hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{1}$. Но первое из этих условий уже было предположено ранее.
- Потребовать дополнительно $\hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{1}$.
- Потребовать существования обратного оператора $\hat{U}^{-1}$. Тогда из ранее выведенного условия $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1}$ получаем $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$.
- Потребовать, чтобы любое конечное состояние в момент времени t_1 могло быть получено с помощью оператора $\hat{U}(t_1, t_0)$ из какого-то начального состояния в момент времени t_0 (на самом деле это предыдущее условие, сформулированное другими словами).
- Потребовать, чтобы временная эволюция квантовой системы была обратима по времени.

Таким образом, мы можем сказать, что унитарность свободной эволюции квантовой системы следует из трёх фундаментальных положений квантовой теории: **линейность, сохранение вероятности, обратимость времени**. Унитарная эволюция при таком подходе оказывается более фундаментальным положением, чем уравнение Шрёдингера.

¹В бесконечномерном случае легко построить оператор $\hat{A}$, для которого $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{1}$, но $\hat{A} \hat{A}^\dagger \neq \hat{1}$. Пусть состояния ψ_n , $n = 0, 1, 2, \dots$ образуют базис в пространстве состояний. Определим оператор $\hat{A}$ условием $\hat{A}|\psi_n\rangle = |\psi_{n+1}\rangle$. Базисные матричные элементы оператора $\hat{A}$ имеют вид $A_{m,n} = \langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle = \delta_{m,n+1}$. Ненулевые матричные элементы оператора $\hat{A}^\dagger$ получаются комплексным сопряжением и транспонированием: $A_{n,m}^\dagger = \langle \psi_n | \hat{A}^\dagger | \psi_m \rangle = \delta_{n+1,m} = A_{m,n}^*$. Это позволяет записать действие оператора $\hat{A}^\dagger$ на базисные векторы: $\hat{A}^\dagger |\psi_n\rangle = |\psi_{n-1}\rangle$, $n = 1, 2, \dots$, и $\hat{A}^\dagger |\psi_0\rangle = 0$. Действуя операторами $\hat{A}^\dagger \hat{A}$ и $\hat{A} \hat{A}^\dagger$ на базисные векторы получаем $\hat{A}^\dagger \hat{A} |\psi_n\rangle = |\psi_n\rangle$, как и полагается единичному вектору. Но $\hat{A} \hat{A}^\dagger |\psi_n\rangle = |\psi_n\rangle$ только для $n \neq 0$, тогда как $\hat{A} \hat{A}^\dagger \psi_0 = 0$, т.е. $\hat{A} \hat{A}^\dagger = \hat{1} - |\psi_0\rangle \langle \psi_0|$.

Обеспечив унитарность оператора эволюции при помощи одного из вышеперечисленных условий мы можем отказаться от условия $t_1 \geq t_0$ и на равных основаниях рассматривать эволюцию вперёд и назад по времени. Теперь

$$\hat{U}(t_0, t_1) = \hat{U}^{-1}(t_1, t_0) = \hat{U}^\dagger(t_1, t_0),$$

а условие

$$\hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t_2, t_0)$$

выполняется для любых моментов времени t_0, t_1, t_2 .

Для автономных систем, т.е. для систем, поведение которых не зависит от времени явно, мы можем произвольно сдвигать начальный и конечный моменты времени на одинаковую величину, т.е. оператор эволюции зависит только от разности времён:

$$\hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}_{t_1 - t_0}.$$

Для таких систем операторы эволюции образуют однопараметрическую группу с параметром времени t . Для этой группы умножение/обращение/единица для операторов соответствуют сложению/изменению знака/нулю параметра:

$$\hat{U}_{t_1}\hat{U}_{t_2} = \hat{U}_{t_1+t_2}, \quad (5.4)$$

$$\hat{U}_t^{-1} = \hat{U}_{-t}, \quad (5.5)$$

$$\hat{U}_0 = \hat{1}. \quad (5.6)$$

Для такой однопараметрической группы операторов эволюции мы можем брать как непрерывное время, $t \in \mathbb{R}$, так и дискретное² $t/\tau \in \mathbb{Z}$.

5.1.2 Унитарная эволюция матрицы плотности*

Эволюция замкнутой системы может быть описана на языке матрицы плотности. Согласно (4.59) матрица плотности может быть представлена в виде

$$\hat{\rho} = \sum_k |\psi_k\rangle p_k \langle\psi_k|$$

С учётом того,

$$|\psi_k(t_1)\rangle = \hat{U}(t_1, t_0)|\psi_k(t_0)\rangle, \quad \langle\psi_k(t_1)| = \langle\psi_k(t_0)|\hat{U}^\dagger(t_1, t_0)$$

получаем

$$\hat{\rho}(t_1) = \hat{U}(t_1, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^\dagger(t_1, t_0).$$

Это преобразование не нарушает требуемых матрицы плотности свойств, в частности нормировка матрицы плотности сохраняется:

$$\text{tr}\hat{\rho}(t_1) = \text{tr}[\hat{U}(t_1, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^\dagger(t_1, t_0)] = \text{tr}[\hat{\rho}(t_0)\underbrace{\hat{U}^\dagger(t_1, t_0)\hat{U}(t_1, t_0)}_{\hat{1}}] = \text{tr}\hat{\rho}(t_0).$$

² Дискретное время может быть, полезно при численных квантовомеханических расчётах. При этом вместо того, чтобы переходить к разностному аналогу временного уравнения Шрёдингера и следить за сохранением вероятности, более правильно стартовать с унитарной эволюции с дискретным временем, как с понятия более фундаментального.

5.1.3 (Не)унитарная эволюция*****

На самом деле мы можем отказаться от условия обратимости квантовой эволюции и рассматривать квантовую эволюцию, ограничившись условием сохранения вероятности (5.3) (*изометричность*). Мы можем сделать это благодаря тому, что пространства состояний в разные моменты времени можно считать различными пространствами, не все состояния в которых имеют физический смысл.

Рассмотрение пространства состояний в разные моменты времени как разных пространств естественно всегда, когда мы рассматриваем зависящую от времени замену базиса, связанную, например, со сдвигом нулевого уровня энергии, калибровочными преобразованиями, или с переходом между представлениями Шрёдингера, Гейзенберга и Дирака. Однако обычно пространства состояния в разные моменты времени связывают друг с другом с помощью унитарных отображений, мы же в данном разделе воспользуемся в том, что бесконечномерное пространство всегда может быть отображено один к одному на некоторое своё подпространство.

Зафиксируем некоторый начальный момент времени $t = 0$ и будем считать, что при $t = 0$ все векторы пространства состояний $\mathcal{H}$ имеют физический смысл. В момент времени t физический смысл имеют только векторы, которые получаются из векторов в начальный момент времени с помощью оператора эволюции $\hat{U}_t$, т.е. принадлежат к подпространству

$$\mathcal{H}_t = \hat{U}_t \mathcal{H}_0 \subset \mathcal{H}_0 = \mathcal{H}.$$

Однако такие подпространства в разные моменты времени изоморфны $\mathcal{H}_t \simeq \mathcal{H}_0$, т.е. между ними можно установить взаимно-однозначное соответствие

$$\hat{A}_t \mathcal{H}_t = \mathcal{H}.$$

С помощью оператора $\hat{A}_t$ мы можем переписать нашу неунитарную эволюцию в эквивалентной унитарной форме, отбросив все нефизические состояния. Новый оператор эволюции $\tilde{U}_t$ уже унитарен

$$\tilde{U}_t = \hat{A}_t \hat{U}_t.$$

Ясно, что мы можем используя этот приём не только сделать из любого изометричного оператора эволюции унитарный, но и из любого унитарного оператора изометричный, добавив в пространства состояний в разные моменты времени некоторое количество «нефизических» измерений.

Таким образом, мы можем рассматривать условие обратимости квантовой эволюции как чисто техническое условие, оставив вместо него более слабое и более физичное условие изометричности (сохранения вероятности). При рассмотрении эволюции замкнутой системы новый подход не позволяет получить каких-либо новых результатов, однако он может оказаться полезен для обобщений, описывающих процессы с незамкнутыми системами (например, измерения).

5.1.4 Уравнение Шрёдингера и гамильтониан

Как уже было получено (или, по существу, постулировано) в предыдущем разделе, для замкнутой автономной системы мы можем записать

$$\psi(t + \tau) = \hat{U}_\tau \psi(t). \quad (5.7)$$

Если время может меняться непрерывно, т.е. $t \in \mathbb{R}$, то предполагая непрерывность и дифференцируемость оператора эволюции по времени мы можем продифференцировать уравнение (5.7) по τ и устремив $\tau \rightarrow 0$ записать

$$\frac{d}{dt}\psi(t) = \left. \frac{d\hat{U}_\tau}{d\tau} \right|_{\tau=0} \psi(t). \quad (5.8)$$

Полученное уравнение (5.8) и есть *уравнение Шрёдингера* (или *временное уравнение Шрёдингера*). Входящий в него оператор $\left. \frac{d\hat{U}_\tau}{d\tau} \right|_{\tau=0}$ принято записывать как $\frac{\hat{H}}{i\hbar}$.

Оператор

$$\hat{H} = i\hbar \left. \frac{d\hat{U}_\tau}{d\tau} \right|_{\tau=0} \quad (5.9)$$

называется *оператором Гамильтона*, или *гамильтонианом*³.

Можно провести следующую аналогию с обычными поворотами:

- $\hat{U}_\tau$ — матрица поворота пространства состояний.
- $\frac{\hat{H}}{i\hbar}$ — матрица угловой скорости.

Мы можем легко обобщить понятие гамильтониана и на случай неавтономных систем, эволюция которых зависит от времени. В этом случае мы получаем оператор Гамильтона явно зависящий от времени:

$$\begin{aligned} \psi(t + \tau) &= \hat{U}(t + \tau, t)\psi(t), \\ \frac{d}{dt}\psi(t) &= \left. \frac{d\hat{U}(t + \tau, t)}{d\tau} \right|_{\tau=0} \psi(t) = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}(t)\psi(t), \\ \hat{H}(t) &= i\hbar \left. \frac{d\hat{U}(t + \tau, t)}{d\tau} \right|_{\tau=0}. \end{aligned}$$

Из унитарности оператора эволюции легко получить эрмитовость гамильтониана:

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger(t + dt, t) &= \left(\hat{1} + dt \frac{\hat{H}}{i\hbar} + o(dt) \right)^\dagger = \hat{1} - dt \frac{\hat{H}^\dagger}{i\hbar} + o(dt), \\ \hat{U}^\dagger(t + dt, t) &= \hat{U}^{-1}(t + dt, t) = \left(\hat{1} + dt \frac{\hat{H}}{i\hbar} + o(dt) \right)^{-1} = \hat{1} - dt \frac{\hat{H}}{i\hbar} + o(dt), \\ \Rightarrow \quad \hat{H} &= \hat{H}^\dagger. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Мы определили гамильтониан через оператор эволюции, но можно легко написать дифференциальное уравнение и начальное условие, для оператора эволюции, через гамильтониан:

$$\frac{d}{dt_1} \hat{U}(t_1, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}. \quad (5.11)$$

³Как однажды сказал французский физик русско-еврейского происхождения Анатолий Абрагам: «Гамильтониан — армянская фамилия». Сходство усугубляется тем, что в англоязычной литературе слово «Hamiltonian» всегда пишется с большой буквы.

Для случая автономной системы, когда гамильтониан не зависит от времени, получаем выражение оператора эволюции через операторную экспоненту

$$\hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}_{t_1-t_0} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot (t_1-t_0)}. \quad (5.12)$$

Автономная эволюция (с не зависящим от времени гамильтонианом) — вращение пространства состояний с постоянной угловой скоростью.

Похожие экспоненты неоднократно встретятся нам в дальнейшем при рассмотрении различных симметрий. Как мы увидим ниже, оператор эволюции для автономной системы можно рассматривать как оператор симметрии сдвига по времени, а гамильтониан — как генератор этой симметрии.

Для многих простых систем квантовый гамильтониан может быть получен из классической функции Гамильтона (т.е. энергии, выраженной через координаты и импульсы) путём «добавления шляпок», т.е. заменой классических координат и импульсов на соответствующие операторы. Обоснование такого соответствия приводится в разделе 5.2.7 «Скобка Пуассона и коммутатор». Квантовые операторы координаты и импульса будут введены в разделе 11.3.2 «Сохранение обобщённого импульса».

5.1.5 Уравнения Шрёдингера, временные и стационарные

Временное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}\psi(t) = i\hbar \frac{d}{dt}\psi(t)$$

описывает временную эволюцию волновой функции.

Стационарное уравнение Шрёдингера имеет вид

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E.$$

Это просто уравнение на собственные функции и собственные числа для оператора Гамильтона.

Если подставить решение стационарного уравнения Шрёдингера во временное, то получается

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi_E(t) = \hat{H}\psi_E(t) = E\psi_E(t),$$

$$\psi_E(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \psi_E(0).$$

Временная эволюция стационарного состояния сводится к вращению с угловой скоростью $\omega_E = \frac{E}{\hbar}$ фазового множителя $e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t}$.

Все средние для стационарного состояния имеют вид

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t &= \langle \psi_E(t) | \hat{A} | \psi_E(t) \rangle = \langle e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \psi_E(0) | \hat{A} | e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \psi_E(0) \rangle = \\ &= \langle \psi_E(0) | e^{+\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} | \psi_E(0) \rangle = \langle \psi_E(0) | \hat{A} | \psi_E(0) \rangle = \langle A \rangle_0. \end{aligned}$$

Таким образом, среднее от любого оператора по стационарному состоянию не зависит от времени. Это и даёт основание называть такое состояние стационарным. При этом следует иметь в виду, что состояние остаётся неизменным только до тех

пор, пока над ним не совершаются измерения, или другие внешние возмущения.⁴ Если мы переопределим гамильтониан, введя

$$\hat{H}' = \hat{H} + E_0 \hat{1}, \quad (5.13)$$

то для нового гамильтониана $\hat{H}'$ стационарные состояния останутся стационарными, но их уровни энергии сдвинутся на E_0 . Таким образом мы можем сдвинуть любой уровень энергии в нуль, после чего соответствующее стационарное состояние перестанет зависеть от времени. Такое переопределение гамильтониана не изменит средних значений и матричных элементов каких бы то ни было физических величин. Это означает, что нулевой уровень энергии в квантовой механике определяется столь же произвольно, сколь и в классической.⁵

Собственные функции гамильтониана, также как и любого эрмитового оператора, образуют базис. Таким образом, любая волновая функция может быть разложена по стационарным состояниям. Суперпозиция стационарных состояний, отвечающих разным уровням энергии, уже не является стационарным состоянием. Такое состояние уже зависит от времени нетривиальным образом

$$\alpha\psi_1(t) + \beta\psi_2(t) = \alpha\psi_1(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t} + \beta\psi_2(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}(\alpha\psi_1(0) + \beta\psi_2(0)e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)t}).$$

Существенная часть временной эволюции (влияющая на средние и матричные элементы) зависит только от разности энергий, поскольку общий фазовый множитель $e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}$ не несёт физического смысла (и может быть изменён сдвигом нулевого уровня энергии).

5.2 Разные представления временной (унитарной) эволюции квантовой системы

Временная (унитарная) эволюция системы в отсутствие измерения описывается семейством унитарных преобразований $\hat{U}(t_1, t_0)$ (см. раздел 5.1.1). Опираясь на материал главы 11 «Симметрии-1» мы можем сказать, что унитарная эволюция представляет собой преобразование симметрии, порождённое оператором энергии (гамильтонианом).

5.2.1 Унитарная эволюция: активная, или пассивная*

Как и любое преобразование симметрии, унитарная эволюция может быть представлена в двух естественных интерпретациях:

- как активное преобразование, т.е. преобразование меняющее векторы состояния в некотором фиксированном базисе,

⁴Если мы попробуем измерить в стационарном состоянии физическую величину, отвечающую какому-то оператору чьё значение в данном состоянии не определено (другими словами, если измеряемая величина не сохраняется в данной системе), то это измерение может с разными вероятностями дать разные значения величины, кроме того, при этом оно изменит состояние так, что оно перестанет быть стационарным, и тогда следующее измерение той же величины спустя некоторое время может дать уже другое значение.

⁵В релятивистской квантовой теории (квантовой теории поля), как и в классической релятивистской теории, нулевой уровень энергии уже не может задаваться произвольно, поскольку преобразования Лоренца «перемешивают» энергию с импульсом.

- как пассивное преобразование, т.е. преобразование меняющее базис, но оставляющее сами векторы состояния неизменными.

Базисные векторы мы нумеруем собственными числами некоторых эрмитовых или унитарных операторов. Таким образом, если мы хотим, чтобы базис собственных функций зависел от времени, то от времени должны зависеть операторы, с помощью которых мы определяем базис.

5.2.2 Пространство состояний в разные моменты времени*

Гильбертово пространство состояний квантовой системы $\mathcal{H}$ в разные моменты времени t следует считать различными пространствами состояний $\mathcal{H}_t$, поскольку у нас нет естественного способа сопоставить друг другу состояния в разные моменты времени:

- линейная комбинация векторов состояния в разные моменты времени не имеет физического смысла,
- унитарная эволюция системы является естественным кандидатом на «способ отождествления состояний в разные моменты времени», но
 - унитарная эволюция зависит от выбора гамильтониана,
 - даже нефизические преобразования (симметрии) гамильтониана могут менять эволюцию системы, например:
 - * переход в движущуюся систему координат не меняет физическую эволюцию системы, но делает ранее независимое от времени состояние зависящим,
 - * сдвиг нулевого уровня энергии также делает ранее независимое от времени состояние зависящим,
 - * калибровочное (градиентное) преобразование электромагнитного поля не меняя физического состояния системы, меняет её описание в данный момент времени и описание её эволюции.

Таким образом, описание временной эволюции квантовой системы допускает произвол в выборе базиса в каждый момент времени. Если мы хотим сохранить непрерывность, то произвол можно описать одним произвольным унитарным оператором, непрерывно зависящим от времени.

5.2.3 Представления Шрёдингера, Гейзенберга и взаимодействия

Мы никогда не работаем непосредственно с векторами состояния квантовых систем: все измеримые величины выражаются через матричные элементы тех или иных линейных операторов (скалярное произведение тоже можно рассматривать как матричный элемент единичного оператора). Если зависимость от времени волновой функции задаётся оператором эволюции, то матричный элемент оператора $\hat{A}(t)$ в момент времени t задаётся следующим образом:

$$\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle_t = \langle \varphi(t) | \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \varphi(0) | \hat{U}_t^\dagger \hat{A}(t) \hat{U}_t | \psi(0) \rangle. \quad (5.14)$$

Для нас не важна временная эволюция векторов состояния или операторов самих по себе, но матричные элементы не должны зависеть от того, в каком представлении мы их вычисляем.

Если динамика системы описывается как эволюция вектора состояния, а временная зависимость операторов $A(t)$ никак не связана с динамикой системы, т.е.

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{ш}}(t)\rangle &= |\psi(t)\rangle = \hat{U}_t |\psi(0)\rangle & (\Leftrightarrow \quad \hat{\rho}_{\text{ш}}(t) &= \hat{U}_t \hat{\rho}(0) \hat{U}_t^\dagger), \\ \hat{A}_{\text{ш}}(t) &= \hat{A}(t) \end{aligned}$$

— это **представление Шрёдингера**.

Именно представлением Шрёдингера мы пользовались выше в разделах 5.1.1 и 5.1.4, когда писали уравнение Шрёдингера для зависящей от времени волновой функции.

Если динамика системы описывается как эволюция оператора, а вектор состояния (или матрица плотности) никак не зависит от времени, т.е.

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{г}}\rangle &= |\psi(0)\rangle = |\psi_{\text{ш}}(0)\rangle & (\Leftrightarrow \quad \hat{\rho}_{\text{г}} &= \hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_{\text{ш}}(0)), \\ \hat{A}_{\text{г}}(t) &= \hat{U}_t^\dagger \hat{A}(t) \hat{U}_t = \hat{U}_t^\dagger \hat{A}_{\text{ш}}(t) \hat{U}_t \end{aligned}$$

— это **представление Гейзенберга**.

Хотя состояния и операторы в представлениях Гейзенберга и Шрёдингера эволюционируют по-разному, в нулевой момент времени они совпадают, а матричные элементы совпадают во все моменты времени:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\text{ш}}(t) | \hat{A}_{\text{ш}}(t) | \psi_{\text{ш}}(t) \rangle &= (\langle \varphi(0) | \hat{U}_t^\dagger) \hat{A}(t) (\hat{U}_t | \psi(0) \rangle) = \\ &= \langle \varphi(0) | (\hat{U}_t^\dagger \hat{A}(t) \hat{U}_t) | \psi(0) \rangle = \langle \varphi_{\text{г}} | \hat{A}_{\text{г}}(t) | \psi_{\text{г}} \rangle. \end{aligned}$$

Мы видим, что два выражения для матричных элементов, расписанных с помощью оператора эволюции различаются лишь расстановкой скобок.

Мы можем ввести также некоторое представление, промежуточное между представлениями Шрёдингера и Гейзенберга и обобщающее оба этих представления — **представление взаимодействия**:

$$|\psi_{\text{в}}(t)\rangle = \hat{U}_t^{(0)\dagger} |\psi_{\text{ш}}\rangle = \hat{U}_t^{(0)\dagger} \hat{U}_t |\psi_{\text{г}}\rangle, \quad (5.15)$$

$$\hat{\rho}_{\text{в}}(t) = \hat{U}_t^{(0)\dagger} \hat{\rho}_{\text{ш}}(t) \hat{U}_t^{(0)} = \hat{U}_t^{(0)\dagger} \hat{U}_t \hat{\rho}_{\text{г}} \hat{U}_t^\dagger \hat{U}_t^{(0)}, \quad [*] \quad (5.16)$$

$$\hat{A}_{\text{в}}(t) = \hat{U}_t^{(0)\dagger} \hat{A}_{\text{ш}}(t) \hat{U}_t^{(0)} = \hat{U}_t^{(0)\dagger} \hat{U}_t \hat{A}_{\text{г}}(t) \hat{U}_t^\dagger \hat{U}_t^{(0)}. \quad (5.17)$$

В случае $\hat{U}^{(0)} = \hat{1}$ представление взаимодействия совпадает с представлением Гейзенберга, а в случае $\hat{U}^{(0)} = \hat{U}$ — с представлением Шрёдингера.

Название «представление взаимодействия» связано с наиболее распространённым способом его использования, когда в качестве оператора $\hat{U}_t^{(0)}$ берут оператор эволюции, для гамильтониана без учёта взаимодействия, каких-либо подсистем — «невозмущённый гамильтониан» $\hat{H}_0$. Полный («возмущённый») гамильтониан, порождающий эволюцию $\hat{U}_t$ представляют как сумму невозмущённого гамильтониана $\hat{H}_0$, и некоторой добавки $\hat{V}$, описывающей взаимодействие

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}.$$

Операторы в представлении взаимодействия совпадают с операторами в гейзенберговском представлении для невозмущённого гамильтониана, но появляется зависимость волновой функции от времени, связанная с возмущением (взаимодействием).

В тех случаях, когда представление явно не указано, мы будем подразумевать представление Шрёдингера. Аналогично указание на представление может отсутствовать, когда формулы одинаково записываются в разных представлениях (см. следующий раздел).

5.2.4 Функции от операторов в разных представлениях

Переход между различными представлениями операторов в фиксированный момент времени осуществляется с помощью унитарного преобразования:

$$\hat{A} \rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}.$$

Новый оператор при этом можно рассматривать как представление старого оператора в новом базисе. Функция от операторов, определяемая с помощью операций сложения, умножения на число и умножения операторов между собой не зависит от базиса. Поэтому смена базиса (переход к новому представлению) может с равным успехом осуществляться как до, так и после вычисления функции, например:

$$\begin{aligned} (\hat{A} + b\hat{B})_\Gamma &= \hat{U}_t^\dagger (\hat{A} + b\hat{B}) \hat{U}_t = \hat{U}_t^\dagger \hat{A} \hat{U}_t + b \hat{U}_t^\dagger \hat{B} \hat{U}_t = \hat{A}_\Gamma + b\hat{B}_\Gamma, \\ (\hat{A}\hat{B})_\Gamma &= \hat{U}_t^\dagger (\hat{A}\hat{B}) \hat{U}_t = (\hat{U}_t^\dagger \hat{A} \hat{U}_t)(\hat{U}_t^\dagger \hat{B} \hat{U}_t) = \hat{A}_\Gamma \hat{B}_\Gamma. \end{aligned}$$

Аналогичные формулы можно получить и для более сложных объектов, таких как коммутатор и матричная экспонента (достаточно расписать эти операции через сложение/вычитание и умножение):

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}]_\Gamma &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})_\Gamma = \hat{A}_\Gamma \hat{B}_\Gamma - \hat{B}_\Gamma \hat{A}_\Gamma = [\hat{A}_\Gamma, \hat{B}_\Gamma], \\ (e^{\hat{A}})_\Gamma &= \hat{U}_t^\dagger e^{\hat{A}} \hat{U}_t = e^{\hat{U}_t^\dagger \hat{A} \hat{U}_t} = e^{\hat{A}_\Gamma}. \end{aligned}$$

5.2.5 Гамильтониан в представлении Гайзенберга

Когда мы определяли представление Гайзенберга мы не делали никаких специальных предположений о виде гамильтониана, т.е. в общем случае гамильтониан — некоторый зависящий от времени эрмитов оператор $\hat{H}(t)$. Однако для большинства задач гамильтониан от времени не зависит, в этом случае $\hat{U}_t = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$ и оператор эволюции коммутирует с гамильтонианом:

$$[\hat{H}, \hat{U}_t] = 0.$$

Таким образом, для автономных систем (когда гамильтониан не зависит от времени) получаем

$$\hat{H}_\Gamma = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{H} = \hat{H}_\text{ш}.$$

5.2.6 Уравнение Гайзенберга

Для того, чтобы задать дифференциальное уравнение, описывающее временную эволюцию гайзенберговских операторов продифференцируем по времени гайзенберговский оператор, выраженный через шрёдингеровский оператор и оператор эволюции:

$$\begin{aligned} \hat{A}_\Gamma &= \hat{U}_t^\dagger \hat{A}_\text{ш} \hat{U}_t \\ \frac{d\hat{A}_\Gamma}{dt} &= \frac{d\hat{U}_t^\dagger}{dt} \hat{A}_\text{ш} \hat{U}_t + \hat{U}_t^\dagger \hat{A}_\text{ш} \frac{d\hat{U}_t}{dt} + \hat{U}_t^\dagger \frac{d\hat{A}_\text{ш}}{dt} \hat{U}_t. \end{aligned}$$

Используя уравнение (5.11) мы получаем

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{U}_t}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}_t, \quad \frac{d\hat{U}_t^\dagger}{dt} = \frac{i}{\hbar} \hat{U}_t^\dagger \hat{H}. \\ \frac{d\hat{A}_\Gamma}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \hat{U}_t^\dagger [\hat{H}, \hat{A}_\text{ш}] \hat{U}_t + \hat{U}_t^\dagger \frac{d\hat{A}_\text{ш}}{dt} \hat{U}_t = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_\Gamma, \hat{A}_\Gamma] + \left(\frac{d\hat{A}_\text{ш}}{dt} \right)_\Gamma. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Полные и частные производные от операторов по времени

В формуле Гайзенберга (5.18) фигурирует две разных производных от оператора по времени:

$$\frac{d\hat{A}_r}{dt}, \quad \left(\frac{d\hat{A}_m}{dt} \right)_r.$$

Первая формула — «просто производная по времени» в представлении Гайзенберга, вторая — «просто производная по времени» в представлении Шрёдингера (которую потом выразили в представлении Гайзенберга).

При этом производная $\frac{d\hat{A}_m}{dt}$ никак не зависит от гамильтониана, т.е. на ней никак не сказывается временная эволюция системы.

Введём следующее определение: *полная производная от оператора $\hat{A}$ по времени* — оператор, среднее от которого по любому состоянию равно производной по времени от среднего по этому же состоянию

$$\left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle. \quad (5.19)$$

Удобнее всего вычислять полную производную по времени в представлении Гайзенберга, поскольку в этом случае от времени зависят только операторы (не волновые функции), и полная производная от оператора оказывается «просто производной по времени».

Определим также *частную производную по времени от оператора $\hat{A}$* , как полную производную при замороженной эволюции системы, т.е. в случае $\hat{H} \equiv 0$ (т.е. $\hat{U} \equiv \hat{1}$). Частная производная по времени совпадает с «просто производной» в представлении Шрёдингера.

Таким образом мы перенесли из классической теоретической механики в квантовую механику понятия частной и полной производной по времени от наблюдаемой величины.

$$\left(\frac{d\hat{A}}{dt} \right)_r = \frac{d\hat{A}_r}{dt}, \quad \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right)_m = \frac{d\hat{A}_m}{dt}.$$

Теперь мы можем переписать формулы Гайзенберга следующим образом:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}]. \quad (5.20)$$

Эта формула применима в любом представлении, поэтому мы убрали указание на то, в каком представлении берутся входящие в неё операторы.

Интегралы движения

Определив полную производную от оператора по времени мы можем обратиться к вопросу об интегралах движения. Чтобы оператор $\hat{A}$ задавал интеграл движения достаточно, чтобы оператор явно не зависел от времени и коммутировал с гамильтонианом

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0, \quad [\hat{H}, \hat{A}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d\hat{A}}{dt} = 0.$$

Такой эрмитов оператор порождает соответствующую однопараметрическую группу симметрий (унитарных операторов) вида $e^{ia\hat{A}}$. Это соответствует выводам раздела 11.3 «Непрерывные симметрии и законы сохранения».

Правило Лейбница и коммутатор*

Правило Лейбница для полной производной по времени

$$\frac{d\hat{A}\hat{B}}{dt} = \hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt} + \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B}$$

следует из тождества:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]. \quad (5.21)$$

Эту формулу легко проверить расписав коммутаторы в левой и правой части равенства как разности произведений операторов. Эту формулу можно назвать *правилом Лейбница для коммутатора, относительно операторного умножения*.

Для операторов есть ещё одно естественное умножение — сам коммутатор. Два раза применив формулу (5.21) мы получаем уже *правило Лейбница для коммутатора, относительно коммутатора*⁶

$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] = [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] - [\hat{B}\hat{A}, \hat{C}] = [[\hat{A}, \hat{C}], \hat{B}] + [\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]]. \quad (5.22)$$

Отсюда следует:

$$\frac{d[\hat{A}, \hat{B}]}{dt} = \left[\hat{A}, \frac{d\hat{B}}{dt} \right] + \left[\frac{d\hat{A}}{dt}, \hat{B} \right]$$

С учётом антисимметрии коммутатора формула (5.22) может быть переписана как *тождество Якоби для коммутатора*:

$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] = 0. \quad (5.23)$$

Антисимметрия, линейность и наличие тождества Якоби позволяет рассматривать коммутатор как *скобку Ли*, задействуя в квантовой механике мощный математический аппарат теории *алгебр Ли*. Возможность рассмотрения коммутатора как скобки Ли будет важна и для установления соответствия с теоретической механикой, где аналогичную роль играет скобка Пуассона.

Пример: Эволюция волнового пакета для свободной частицы

Гамильтониан для свободной частицы получается из классического надеванием шляпок на H и p (в координатном представлении, когда волновые функции представлены как функции от координат, $\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}$) в формуле для классической функции Гамильтона (в выражении энергии через координаты и импульсы):

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}.$$

Используя его, мы можем написать полные производные по времени от операторов координаты и импульса (координата и импульс не зависят от времени явно, так то частная производная по времени вклада не даёт):

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{p} \right] = 0, \quad \frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x} \right] = \frac{i}{2m\hbar} (\underbrace{\hat{p}[\hat{p}, \hat{x}]}_{-i\hbar} + \underbrace{[\hat{p}, \hat{x}]\hat{p}}_{-i\hbar}) = \frac{\hat{p}}{m}.$$

⁶Обратите внимание, здесь коммутатор выступает сразу в двух ипостасях: как производная и как произведение.

Мы воспользовались здесь тождеством (5.21).

Формулы совпадают с классическими «с точностью до шляпок».

В представлении Гайзенберга мы получаем

$$\frac{d\hat{p}_r}{dt} = 0, \quad \hat{p}_r(0) = \hat{p}_m; \quad \frac{d\hat{x}_r}{dt} = \frac{\hat{p}_r}{m}, \quad \hat{x}_r(0) = \hat{x}_m.$$

Система легко интегрируется:

$$\hat{p}_r(t) = \hat{p}_m = \hat{p}_r(0); \quad \hat{x}_r(t) = \hat{x}_m + t \frac{\hat{p}_m}{m} = \hat{x}_r(0) + t \frac{\hat{p}_r(0)}{m}.$$

При усреднении по произвольной волновой функции (которая в гайзенберговском представлении не зависит от времени) получаем, что в среднем волновой пакет движется с постоянной скоростью:

$$\langle \hat{p} \rangle_t = \langle \hat{p} \rangle_0; \quad \langle \hat{x} \rangle_t = \langle \hat{x} \rangle_0 + t \frac{\langle \hat{p} \rangle_0}{m}. \quad (5.24)$$

Для вычисления среднеквадратичных отклонений нам понадобятся операторы $\hat{x}_r^2$ и $\hat{p}_r^2$:

$$\hat{p}_r^2(t) = \hat{p}_m^2; \quad \hat{x}_r^2(t) = \left(\hat{x}_m + t \frac{\hat{p}_m}{m} \right)^2 = \hat{x}_m^2 + t^2 \frac{\hat{p}_m^2}{m^2} + \frac{t}{m} (\hat{p}_m \hat{x}_m + \hat{x}_m \hat{p}_m).$$

Для среднеквадратичных отклонений получаем:

$$\begin{aligned} \langle \delta p^2 \rangle_t &= \langle \hat{p}^2 \rangle_t - \langle \hat{p} \rangle_t^2 = \langle \delta p^2 \rangle_0; \\ \langle \delta x^2 \rangle_t &= \langle \hat{x}^2 \rangle_t - \langle \hat{x} \rangle_t^2 = \frac{t^2}{m^2} \langle \delta p^2 \rangle_0 + \frac{t}{m} (\langle \hat{p} \hat{x} + \hat{x} \hat{p} \rangle_0 - 2 \langle \hat{x} \rangle_0 \langle \hat{p} \rangle_0) + \langle \delta x^2 \rangle_0. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Линейный по времени член в $\langle \delta x^2 \rangle_t$ можно обнулить выбором нулевого момента времени, однако для любого t выполняется соотношение неопределённостей $\langle \delta x^2 \rangle_t \langle \delta p^2 \rangle_t \geq \frac{\hbar^2}{4}$. При больших положительных или отрицательных временах размер волнового пакета неограниченно расплывается, что однозначно говорит нам, что размер волнового пакета действительно никак не связан с размером самой частицы.

5.2.7 Скобка Пуассона и коммутатор*

В теоретической механике наблюдаемые представляются не эрмитовыми операторами, как в квантовой механике, а функциями от канонических переменных (координат и импульсов), т.е. классическая наблюдаемая имеет вид

$$F(Q, P, t). \quad (5.26)$$

Полная производная от классической наблюдаемой (с учётом динамической эволюции системы) имеет вид

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_a \left(\frac{\partial F}{\partial Q_a} \frac{dQ_a}{dt} + \frac{\partial F}{\partial P_a} \frac{dP_a}{dt} \right).$$

Производные по времени от координат и импульсов в классической механике выражаются с помощью уравнений Гамильтона:

$$\frac{dQ_a}{dt} = \frac{\partial H}{\partial P_a}, \quad \frac{dP_a}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial Q_a}.$$

Где $H(Q, P)$ — функция Гамильтона, т.е. энергия выраженная через координаты и импульсы. Функция Гамильтона — тоже наблюдаемая, классический аналог квантового гамильтониана.

Используя уравнения Гамильтона мы можем переписать полную производную от F :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \underbrace{\sum_a \left(\frac{\partial F}{\partial Q_a} \frac{\partial H}{\partial P_a} - \frac{\partial F}{\partial P_a} \frac{\partial H}{\partial Q_a} \right)}_{\{F, H\}} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\}.$$

Здесь мы обозначили сумму по a через скобку Пуассона $\{F, H\}$.

Сравнивая получившееся уравнение с уравнением Гайзенберга (5.20) мы видим, что классическая скобка Пуассона соответствует коммутатору:

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} &\quad \sim \quad \frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}], \\ \{\cdot, \cdot\} &\sim \frac{1}{i\hbar} [\cdot, \cdot]. \end{aligned}$$

Помимо формул для полных производных от наблюдаемых величин очень важную роль играют канонические коммутационные соотношения, для которых также есть классический теоретикомеханический аналог:

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{q}_a, \hat{p}_b] = \delta_{ab}, \quad \{Q_a, P_a\} = \delta_{ab}.$$

Благодаря соответствию между коммутатором и скобкой Пуассона некоторые выкладки могут переноситься из теоретической механики и обратно с помощью простого изменения обозначений. Например, как будет продемонстрировано ниже, гармонический осциллятор в представлении Гайзенберга колеблется как классический осциллятор «с точностью до шляпок» (т.е. с точностью до замены квантовых наблюдаемых классическими). Похожее соответствие мы наблюдали и выше в разделе 5.2.6 «Пример: Эволюция волнового пакета для свободной частицы», когда изучали распывание волнового пакета свободной частицы в представлении Гайзенберга. Однако для более сложных гамильтонианов соответствие уже не является столь точным.

Связь между коммутатором и скобкой Пуассона была открыта Полем Дираком в октябре 1925 года вскоре после того, как Гайзенберг ввёл невиданные ранее в физике некоммутирующие переменные.

5.2.8 Чистые и смешанные состояния в теоретической механике*

Для того, чтобы ясно увидеть аналоги представлений Шрёдингера и Гайзенберга в классической механике удобно перейти от рассмотрения чистых классических состояний, задаваемых точными значениями координат и импульсов к смешанным классическим состояниям, задаваемым распределением вероятности по координатам и импульсам.

Таким образом, помимо наблюдаемых, как функций на фазовом пространстве (5.26) мы вводим состояния

$$\varrho(Q, P, t), \quad \varrho(Q, P, t) > 0, \quad \int dQ dP \varrho(Q, P, t) = 1. \quad (5.27)$$

которые также задаются как функции на фазовом пространстве. Последнее условие задаёт нормировку состояния на единицу. Иногда, например при рассмотрении измерения удобно от этого условия отказываться.

Среднее от наблюдаемой по состоянию задаётся интегралом вида

$$\langle \varrho, F \rangle = \int dQ dP F(Q, P, t) \varrho(Q, P, t), \quad (5.28)$$

в частности нормировка состояния задаёт среднее от единицы.

Мы преднамеренно не уточнили к каким классам функций относятся наблюдаемые и состояния, т.к. выбор соответствующих функциональных пространств зависит от задачи. Сейчас нам удобно выбрать для наблюдаемых и состояний пространства основных и обобщённых функций по Шварцу

$$\begin{aligned} F &\in \mathcal{S} = \{F \in C^\infty | \forall n, m \in \mathbb{N} \ x^n F^{(m)} \longrightarrow 0, x \rightarrow \pm\infty\}, \\ \rho &\in \mathcal{S}' = \{\rho | \forall F \in \mathcal{S} \ \rho : F \mapsto \langle \rho, F \rangle \text{ непрерывно и линейно}\}. \end{aligned}$$

Таким образом, как в квантовой механике, так и в классической мы имеем линейные (если отказаться от нормировки состояний на единицу) пространства наблюдаемых и смешанных состояний, а также линейную по обоим аргументам операцию усреднения наблюдаемой по состоянию.

Среди всех состояний можно выделить чистые:

$$\begin{aligned} \rho_{Q_0 P_0}(Q, P) &= \delta(Q - Q_0) \cdot \delta(P - P_0) \\ \langle \rho_{Q_0 P_0}, F \rangle &= F(Q_0, P_0). \end{aligned}$$

Как и в квантовой механике чистое состояние задаётся значениями максимального набора независимых наблюдаемых. Однако имеется принципиальное различие. В классике все наблюдаемые совместимы (коммутируют, одновременно измеримы), и все максимальные наборы независимых наблюдаемых описывают одни и те же семейства чистых состояний. Из-за этого в классической механике может возникнуть путаница (отождествление) между понятиями «чистое состояние» и «максимальный набор независимых наблюдаемых». В квантовой механике не все наблюдаемые совместимы, и разные максимальные наборы независимых наблюдаемых описывают различные семейства чистых состояний.

5.2.9 Представления Гамильтона и Лиувилля в теоретической механике**

Как и в квантовой механике эволюцию системы можно описывать как эволюцию состояния при неизменных наблюдаемых (представление Лиувилля), либо как эволюцию наблюдаемых при неизменном состоянии (представление Гамильтона):⁷

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_L}{dt} &= -\{\rho_L, H\}, & \frac{dF_L}{dt} &= \frac{\partial F_L}{\partial t}, \\ \frac{d\rho_r}{dt} &= 0, & \frac{dF_r}{dt} &= \frac{\partial F_r}{\partial t} + \{F_r, H\}. \end{aligned}$$

⁷Представление Гамильтона обозначено индексом «г», точно также, как выше обозначали представление Гейзенберга. Поскольку одно представление переходит в другое в классическом пределе, то это не должно вызвать путаницы, а наоборот, это даёт нам мнемоническое правило как классические представления временной эволюции соотносятся с классическими: Гейзенберг и Гамильтон начинаются на одну букву и у обоих эволюция описывается через наблюдаемые.

Обратите внимание, что состояние в представлении Лиувилля и наблюдаемая в представлении Гамильтона эволюционируют «в разные стороны» (разный знак перед скобкой Пуассона). Данные уравнения при замене скобки Пуассона на коммутатор $\{\cdot, \cdot\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[\cdot, \cdot]$ переходят в квантовые уравнения для операторов и матриц плотности в представлениях Шрёдингера и Гейзенберга соответственно.

Интегралы, задающие средние наблюдаемой F в момент времени t связаны друг с другом заменой переменных интегрирования

$$\begin{aligned} \langle \rho, F \rangle_t &= \int dQ dP F_{\text{л}}(Q, P, t) \rho_{\text{л}}(Q, P, t) = \\ &= \int dQ dP \underbrace{F_{\text{л}}(Q(Q_0, P_0, t), P(Q_0, P_0, t), t)}_{F_{\text{г}}(Q_0, P_0, t)} \underbrace{\rho_{\text{л}}(Q(Q_0, P_0, t), P(Q_0, P_0, t), t)}_{\rho_{\text{г}}(Q_0, P_0)} = \\ &= \int dQ_0 dP_0 \underbrace{\frac{\partial(Q, P)}{\partial(Q_0, P_0)}}_{=1} F_{\text{г}}(Q_0, P_0, t) \rho_{\text{г}}(Q_0, P_0) = \\ &= \int dQ dP F_{\text{г}}(Q, P, t) \rho_{\text{г}}(Q, P) \end{aligned}$$

Здесь $Q(Q_0, P_0, t)$ и $P(Q_0, P_0, t)$ — координаты и импульсы в момент t как функции от начальных значений Q_0, P_0 и времени t .

$$Q(Q_0, P_0, 0) = Q_0, \quad P(Q_0, P_0, 0) = P_0.$$

Тождество на якобиан

$$J = \frac{\partial(Q, P)}{\partial(Q_0, P_0)} = 1$$

— Теорема Лиувилля о сохранении фазового объёма. Его физический смысл — сохранение вероятности, в этом оно аналогично условию унитарности квантовой эволюции.

Докажем Теорему Лиувилля. Для этого достаточно показать, что $\frac{dJ}{dt} = 0$ в начальный момент времени.

$$Q^i(\delta t) = Q_0^i + \frac{\partial H}{\partial P^i} \cdot \delta t + o(\delta t), \quad P^i(\delta t) = P_0^i - \frac{\partial H}{\partial Q^i} \cdot \delta t + o(\delta t).$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(Q(\delta t), P(\delta t))}{\partial(Q_0, P_0)} &= \det \left(\begin{array}{c|c} \delta_j^i + \frac{\partial^2 H}{\partial P^i \partial Q^j} \cdot \delta t & \frac{\partial^2 H}{\partial P^i \partial P^j} \cdot \delta t \\ -\frac{\partial^2 H}{\partial Q^i \partial Q^j} \cdot \delta t & \delta_j^i - \frac{\partial^2 H}{\partial Q^i \partial P^j} \cdot \delta t \end{array} \right) + o(\delta t) = \\ &= 1 + \text{tr} \left(\begin{array}{c|c} \frac{\partial^2 H}{\partial P^i \partial Q^j} & \frac{\partial^2 H}{\partial P^i \partial P^j} \\ -\frac{\partial^2 H}{\partial Q^i \partial Q^j} & -\frac{\partial^2 H}{\partial Q^i \partial P^j} \end{array} \right) \cdot \delta t + o(\delta t) = \\ &= 1 + \sum_i \left[\frac{\partial^2 H}{\partial P^i \partial Q^i} - \frac{\partial^2 H}{\partial Q^i \partial P^i} \right] \delta t + o(\delta t) = 1 + o(\delta t). \end{aligned}$$

Таким образом,

$$J(0) = 1, \quad \frac{dJ}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad J \equiv 1.$$



Рис. 5.1: Уильям Роуан Гамильтон (1805–1865). W



Рис. 5.2: Жозеф Лиувиль (1809–1882). W

5.2.10 Уравнения в представлении взаимодействия*

Дифференциальное уравнение для оператора в представлении взаимодействия мы можем получить дифференцированием выражения (5.17) $\hat{A}_B = \hat{U}_t^{(0)\dagger} \hat{A}_B \hat{U}_t^{(0)}$, но результат можно написать сразу, он совпадает с уравнениями Гайзенберга для невозмущённого гамильтониана (5.18):

$$\frac{d\hat{A}_B}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_B^{(0)}, \hat{A}_B] + \left(\frac{d\hat{A}_B}{dt} \right)_B. \quad (5.29)$$

Волновая функция (5.15) $|\psi_B(t)\rangle = \hat{U}_t^{(0)\dagger} |\psi_B(t)\rangle$ при дифференцировании по времени даёт

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\psi_B(t)\rangle &= \frac{d\hat{U}_t^{(0)\dagger}}{dt} |\psi_B\rangle + \hat{U}_t^{(0)\dagger} \frac{d}{dt} |\psi_B\rangle = \frac{i}{\hbar} \hat{U}_t^{(0)\dagger} \hat{H}^{(0)} |\psi_B\rangle + \hat{U}_t^{(0)\dagger} \frac{-i}{\hbar} \underbrace{\hat{H}}_{(\hat{H}^{(0)} + \hat{V})} |\psi_B\rangle = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \hat{U}_t^{(0)\dagger} \hat{V} \underbrace{|\psi_B\rangle}_{\hat{U}_t^{(0)} |\psi_B\rangle} = -\frac{i}{\hbar} \underbrace{\hat{U}_t^{(0)\dagger} \hat{V} \hat{U}_t^{(0)}}_{\hat{V}_B} |\psi_B\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{V}_B |\psi_B\rangle \end{aligned}$$

Таким образом, временная эволюция волновой функции в представлении взаимодействия описывается уравнением Шрёдингера, в котором вместо гамильтониана используется оператор возмущения, записанный в представлении взаимодействия:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_B(t)\rangle = \hat{V}_B |\psi_B\rangle. \quad (5.30)$$

Эволюцию волновой функции в представлении взаимодействия мы можем описать как действие на исходную волновую функцию специального оператора эволюции

$$|\psi_B(t)\rangle = \hat{U}_t^{(0)\dagger} |\psi_B(t)\rangle = \underbrace{\hat{U}_t^{(0)\dagger} \hat{U}_t}_{\hat{U}_t^B} |\psi(0)\rangle = \hat{U}_t^B |\psi(0)\rangle.$$

Глядя на (5.30) мы можем записать уравнение Шрёдингера для оператора эволюции $\hat{U}_t^B = \hat{U}_t^{(0)\dagger} \hat{U}_t$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_t^B = \hat{V}_B \hat{U}_t^B, \quad \hat{U}_0^B = \hat{1}. \quad (5.31)$$

При этом, оператор $\hat{V}_B$ может зависеть от времени, даже если гамильтонианы $\hat{H}^{(0)}$ и $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V}$ от времени не зависели. Это возможно с тем случае, если $[\hat{H}^{(0)}, \hat{V}] \neq 0$.

5.3 Измерение

Процедура измерения — единственное место в стандартной квантовой механике, которое вносит в теорию *вероятности* и *необратимость*. При унитарной эволюции переход от начального состояния к конечному описывается обратимыми операторами, а значит всегда можно восстановить по конечному состоянию начальное. При измерении иначе: состояние после измерения всегда получается из состояния до измерения с помощью необратимого оператора (проектора), случайным образом выбираемого из некоторого набора.

Влияние измерения на состояние системы неизбежно в квантовой механике. Это накладывает принципиальные ограничения на точность при одновременном измерении различных величин (*соотношения неопределённостей*). Влияние измерения на состояние системы носит существенно неклассический характер, с чем связан ряд интересных эффектов и парадоксов, которые мы также обсудим ниже.

Процедура измерения не выводится из уравнений, описывающих поведение изолированных систем.

5.3.1 Проекционный постулат

Обсуждая вероятностный смысл волновой функции мы уже затрагивали процедуру измерения (см. 3.1.4 «Распределение вероятностей и волновые функции при измерении», 3.1.5 «Амплитуда при измерении и скалярное произведение», 4.5.1 «Нормировка волновых функция на единицу»).

Наряду с формулами для волновых функций здесь приводятся соответствующие формулы для матриц плотности, которые при первом чтении можно пропускать.

Как мы уже знаем, в результате измерения, дающего ответ «да» волновая функция $\psi_{\text{до}}$ проецируется с помощью ортогонального проектора

$$\hat{P}_{\text{да}} = \hat{P}_{\text{да}}^\dagger = \hat{P}_{\text{да}} \hat{P}_{\text{да}}$$

на некоторое подпространство $\mathcal{H}_{\text{да}}$ пространства $\mathcal{H}$. Нормированная на вероятность волновая функция (матрица плотности*) сразу после измерения имеет вид:

$$|\psi_{\text{да}}\rangle = \hat{P}_{\text{да}} |\psi_{\text{до}}\rangle \in \mathcal{H}_{\text{да}}.$$

$$\hat{\rho}_{\text{да}} = \hat{P}_{\text{да}} \hat{\rho}_{\text{до}} \hat{P}_{\text{да}} \in \mathcal{H}_{\text{да}} \otimes \mathcal{H}_{\text{да}}^*, \quad \hat{\rho}_{\text{до}} \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^*. \quad [*]$$

При этом вероятность того, что измерение даст ответ «да» выражается следующими способами:

$$p_{\text{да}} = \langle \hat{P}_{\text{да}} \rangle = \langle \psi_{\text{до}} | \hat{P}_{\text{да}} | \psi_{\text{до}} \rangle = \langle \psi_{\text{да}} | \psi_{\text{до}} \rangle = \langle \psi_{\text{да}} | \psi_{\text{да}} \rangle.$$

$$p_{\text{да}} = \langle \hat{P}_{\text{да}} \rangle = \text{tr}(\hat{\rho}_{\text{до}} \hat{P}_{\text{да}}) = \text{tr}(\hat{\rho}_{\text{до}} \hat{P}_{\text{да}}^2) = \text{tr}(\hat{P}_{\text{да}} \hat{\rho}_{\text{до}} \hat{P}_{\text{да}}) = \text{tr}(\hat{\rho}_{\text{да}}) \quad [*]$$

Процесс измерения в стандартной квантовой механике считается мгновенным, а результат измерения абсолютно непредсказуемым (можно определить лишь вероятности).

Если задан проектор $\hat{P}_{\text{да}}$, то можно определить проектор

$$\hat{P}_{\text{нет}} = \hat{1} - \hat{P}_{\text{да}},$$

описывающий неполучение ответа «да» (получение ответа «нет»). Подпространство $\mathcal{H}_{\text{нет}}$ состоит из векторов, ортогональных всем векторам из $\mathcal{H}_{\text{да}}$. Любой вектор из $\mathcal{H}$ однозначно разлагается по этим подпространствам:

$$|\psi\rangle = \hat{1}|\psi\rangle = (\hat{P}_{\text{да}} + \hat{P}_{\text{нет}})|\psi\rangle = \hat{P}_{\text{да}}|\psi\rangle + \hat{P}_{\text{нет}}|\psi\rangle = |\psi_{\text{да}}\rangle + |\psi_{\text{нет}}\rangle.$$

Свойства проектора $\hat{P}_{\text{нет}}$ и его использования полностью аналогичны свойствам $\hat{P}_{\text{да}}$. Во всех рассуждениях мы можем сделать замену «да» $\leftrightarrow$ «нет».

В следующих подразделах мы рассматриваем вопрос о построении проекторов для различных вопросов/измерений и их свойствах.

Невырожденный дискретный спектр

Пусть мы измеряем физическую величину, описываемую эрмитовым оператором $\hat{A}$ с дискретным невырожденным спектром. Т.е.

$$\hat{A}|\varphi_k\rangle = \alpha_k|\varphi_k\rangle, \quad \alpha_k \neq \alpha_{k'}, \quad k \neq k',$$

причём k — дискретный параметр.

Набор φ_k образует ортогональный базис, элементы которого можно нормировать на единицу, т.е.

$$\langle \varphi_k | \varphi_{k'} \rangle = \delta_{kk'}, \quad (5.32)$$

$$\sum_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k| = \hat{1}. \quad (5.33)$$

Мы можем описать измерение, определяющее значение физической величины $\hat{A}$, т.е. определяющее в каком из состояний φ_k находится система, следующим образом:

- $\hat{P}_k = |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k|$ — проектор на состояние φ_k ,
- проекторы описывают взаимоисключающие исходы, поскольку (из-за ортогональности состояний φ_k) $\hat{P}_k \hat{P}_{k'} = \hat{P}_k \delta_{kk'}$,
- $p_k = \langle \psi | \hat{P}_k | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | \psi \rangle$ — вероятность того, что в результате измерения система будет найдена в состоянии φ_k и, соответственно, попадёт в это состояние (см. (4.29)),
- эрмитов оператор $\hat{P}_k$ можно трактовать как наблюдаемую, отвечающую на вопрос «равна ли величина $\hat{A}$ значению α_k (да=1, нет=0)?», или «какова вероятность того, что $\hat{A}$ равняется α_k ?»⁸
- $\hat{1} = \sum_k \hat{P}_k$ — представление единичного оператора в виде суммы проекторов,
- используя предыдущий пункт мы можем разложить исходную волновую функцию ψ по базису состояний φ_k :

$$|\psi\rangle = \hat{1}|\psi\rangle = \sum_k \hat{P}_k |\psi\rangle = \sum_k |\varphi_k\rangle \underbrace{\langle \varphi_k | \psi \rangle}_{\text{число}} = \sum_k \langle \varphi_k | \psi \rangle |\varphi_k\rangle.$$

- Коэффициенты разложения ψ по φ_k равны $\langle \varphi_k | \psi \rangle$ и задают соответствующие амплитуды вероятностей, как и положено компонентам волновой функции,
- Под действием проектора $\hat{P}_k$ исходное состояние ψ превращается в нормированное на вероятность состояния ϕ_k из раздела 4.5.2: $\hat{P}_k |\psi\rangle = |\varphi_k\rangle \underbrace{\langle \varphi_k | \psi \rangle}_{\text{число}} = \langle \varphi_k | \psi \rangle |\varphi_k\rangle = \phi_k$,
- оператор наблюдаемой может быть представлен в виде $\hat{A} = \sum_k \alpha_k \hat{P}_k$.

⁸Вероятность задаётся как среднее от оператора $\hat{P}_k$, а измерение наблюдаемой $\hat{P}_k$ всегда даёт 0 или 1, поскольку только эти числа являются собственными, и только такие значения вероятности мы можем измерить *в единичном опыте*: вероятность *после измерения* всегда равна либо 1 (событие произошло), либо 0 (событие не произошло).

Вырожденный дискретный спектр

Случай вырожденного дискретного спектра отличается от невырожденного тем, некоторым собственным числам соответствует несколько линейно независимых собственных функций, т.е.

$$\hat{A}|\varphi_{kc}\rangle = \alpha_k|\varphi_{kc}\rangle, \quad \alpha_k \neq \alpha_{k'}, \quad k \neq k',$$

Дискретный параметр $c = 1, \dots, n_k$ нумерует собственные функции, отвечающие данному собственному числу α_k .

Мы снова можем выбрать набор φ_{kc} так, чтобы он задавал ортонормированный базис, т.е.

$$\langle \varphi_{kc} | \varphi_{k'c'} \rangle = \delta_{kk'} \delta_{cc'}, \quad (5.34)$$

$$\sum_k \sum_c |\varphi_{kc}\rangle \langle \varphi_{kc}| = \hat{1}. \quad (5.35)$$

В правилах из списка в разделе «Невырожденный дискретный спектр» следует заменить только первый пункт.

Рассмотрение измерения для случая дискретного вырожденного спектра отличается только определением набора проекторов на собственные подпространства оператора $\hat{A}$, отвечающих выбранным k :

$$\hat{P}_k = \sum_c |\varphi_{kc}\rangle \langle \varphi_{kc}|, \quad \text{tr} \hat{P}_k = n_k.$$

Теперь проектор $\hat{P}_k$ отображает волновые функции на подпространство размерности n_k , натянутое на векторы из набора $\{|\varphi_{kc}\rangle\}_{c=1}^{n_k}$.

Параметр $c \in U_k$ может быть и непрерывным, в этом случае изменяется условие нормировки состояний, поскольку суммы по c заменяются интегралами:

$$\langle \varphi_{kc} | \varphi_{k'c'} \rangle = \delta_{kk'} \delta(c - c'), \quad (5.36)$$

$$\sum_k \int_{U_k} |\varphi_{kc}\rangle \langle \varphi_{kc}| dc = \hat{1}, \quad (5.37)$$

$$\hat{P}_k = \int_{U_k} |\varphi_{kc}\rangle \langle \varphi_{kc}| dc. \quad (5.38)$$

Непрерывный спектр

Собственные состояния непрерывного спектра нормируются уже не на δ -символ, а на δ -функцию. В случае невырожденного спектра мы имеем:

$$\begin{aligned} \hat{A}|\varphi_\alpha\rangle &= \alpha|\varphi_\alpha\rangle, \\ \langle \varphi_\alpha | \varphi_\beta \rangle &= \delta(\alpha - \beta), \\ \int |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha| d\alpha &= \hat{1}. \end{aligned}$$

Функции $|\varphi_\alpha\rangle$ как всякие функции непрерывного спектра не являются волновыми функциями из пространства $\mathcal{H}$.⁹

⁹Собственные состояния непрерывного спектра не попадают в пространство состояний

Мы можем формально написать оператор $\hat{p}_\alpha = |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|$, но этот оператор отображает *почти все* элементы $\mathcal{H}$ на вектора пропорциональные $|\varphi_\alpha\rangle$, т.е. не попадающие в $\mathcal{H}$. Однако среднее от оператора $\hat{p}_\alpha$ задаёт плотность вероятности обнаружения значения наблюдаемой $\hat{A}$ близкого к α :

$$\varrho(\alpha) = \langle\psi|\hat{p}_\alpha|\psi\rangle.$$

Функция $\varrho(\alpha)$ определена почти при всех значения α , однако непосредственный физический смысл имеет не она, а интегралы от неё:

$$P_{[a,b]} = \int_a^b \varrho(\alpha) d\alpha = \langle\psi|\left(\int_a^b |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha| d\alpha\right)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_{[a,b]}|\psi\rangle.$$

Интеграл от «нехорошего» оператора $\hat{p}_\alpha$ уже является «хорошим» оператором-проектором (см. раздел 3.1.4 «Распределения вероятностей и волновые функции при измерении»):

$$\hat{P}_{[a,b]} = \int_a^b \hat{p}_\alpha d\alpha = \int_a^b |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha| d\alpha.$$

Когда проектор $\hat{P}_{[a,b]}$ действует на волновую функцию, представленную в как функция α , то из волновой функции «вырезается кусок» $[a, b]$, а вне этого отрезка волновая функция обнуляется (3.9) (проверьте, используя $\psi(\alpha) = \langle\varphi_\alpha|\psi\rangle$).

Удобно определить проекторнозначную функцию $\hat{P}(a) = \hat{P}_{(-\infty, a]}$. С её помощью мы можем определить проекторы, отвечающие отрезкам:

$$\hat{P}_{(a,b]} = \hat{P}(b) - \hat{P}(a).$$

Такая функция хороша тем, что при всех значениях аргумента мы имеем «хорошие» (и даже ограниченные) эрмитовы операторы и можем, используя их, не задумываясь о сложностях работы с непрерывным спектром.

Как и в случае дискретного спектра, мы можем определить исходный оператор $\hat{A}$ через собственные числа и проекторы, но теперь вместо суммы надо писать интеграл:

$$\hat{A} = \int \alpha |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha| d\alpha. \quad (5.39)$$

Проекторнозначная мера**

Последний интеграл (5.39) не совсем обычен, поскольку является пределом интегральных сумм, в которых вместо длин отрезков, служат проекторы:

$$\sum_k \alpha_k \int_{\alpha_k}^{\alpha_{k+1}} |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha| d\alpha = \sum_k \alpha_k (\hat{P}(\alpha_{k+1}) - \hat{P}(\alpha_k)).$$

$|\varphi_\alpha\rangle \notin \mathcal{H}$, но попадают в оснащённое гильбертово пространство $|\varphi_\alpha\rangle \in \mathcal{D}'$ (4.37). Т.е. для почти всех состояний ($|\psi\rangle \in \mathcal{D}$) определено скалярное произведение $\langle\varphi_\alpha|\psi\rangle$. А также наоборот: скалярное произведение $\psi(\alpha) = \langle\varphi_\alpha|\psi\rangle$ определено для всех $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ и почти всех α . Это скалярное произведение задаёт функцию $\psi(\alpha)$, которая представляет разложение вектора $|\psi\rangle$ по базису $|\varphi_\alpha\rangle$. Функция $\alpha \rightarrow \psi(\alpha)$ квадратично интегрируема (принадлежит $L_2(\mathbb{R})$), а элементы пространства $L_2(\mathbb{R})$ определены с точностью до множества точек лебеговой меры ноль.

Это напоминает, используемое в теории вероятности понятие *интеграла по мере*, но в обычном интеграле по мере используется числовая, а не проекторнозначная функция:

$$\int f(x) \mu(dx) = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \sum_k f(x_k) (M(x_{k+1}) - M(x_k)).$$

Здесь $\mu(dx) = M(x + dx) - M(x)$ — мера. Мера конечного полуинтервала имеет вид $\mu((a, b]) = M(b) - M(a)$. Для *гладкой монотонно-возрастающей* функции M интеграл по мере сводится к обычному интегралу:

$$\int f(x) \mu(dx) = \int f(x) M'(x) dx.$$

для гладкой функции M мера любой точки равно нулю.

Однако, если монотонно-возрастающая *кусочно-гладкая* функция M имеет скачки, то мера точки скачка отлична от нуля $\mu(\{a\}) = M(a+) - M(a-)$. Интеграл по мере теперь состоит из двух членов: обычного интеграла и взвешенной суммы по точкам скачков x_k

$$\int f(x) \mu(dx) = \int f(x) M'(x) dx + \sum_{x_k} f(x_k) \mu(\{x_k\}).$$

Такого рода интегралы нам уже встречались, когда мы рассматривали операторы имеющие как дискретный спектр, так и непрерывный спектр.

Аналогично мы можем определить *проекторнозначную меру* с помощью *монотонно-возрастающей проекторнозначной функции* $\hat{P}(\alpha)$.

Монотонность проекторнозначной функции означает, что с ростом α растёт подпространство, на которое проецирует проектор: $\hat{P}(\alpha)\mathcal{H} \supset \hat{P}(\beta)\mathcal{H}$, если $\alpha > \beta$. Это свойство удобно записать так:

$$\hat{P}(\alpha)\hat{P}(\beta) = \hat{P}(\beta)\hat{P}(\alpha) = \hat{P}(\min(\alpha, \beta)).$$

Как и функция M , функция $\hat{P}$ может испытывать скачки в точках, отвечающих дискретному спектру:

$$\hat{P}(\{\alpha_k\}) = \hat{P}(\alpha_k+) - \hat{P}(\alpha_k-) \neq 0$$

Интеграл по проекторнозначной мере позволяет представить эрмитов оператор в виде интеграла, который сводится и интегралу по непрерывному спектру и сумме по дискретному:

$$\hat{A} = \int \alpha(k) \hat{P}_A(dk) = \int_{\alpha \in U} \alpha |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha| d\alpha + \sum_{\alpha \in W} \alpha |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha|.$$

Проекторнозначная мера $\hat{P}_A$ (индекс A показывает, с каким эрмитовым оператором эта мера связана) позволяет рассматривать единым образом дискретный и непрерывный спектры. При этом все рассматриваемые операторы являются эрмитовыми операторами на $\mathcal{H}$ и нам нет необходимости обращаться к оснащённому гильбертовому пространству.

5.3.2 Селективное и неселективное измерение*

Выше мы уже упоминали, что квантовое измерение происходит вне зависимости от того, смотрит ли наблюдатель на стрелку прибора и есть вообще ли у прибора стрелка (2.3.2 «На наших глазах...»).

В разделе 5.3.1 «Проекционный постулат» мы предполагали, что результат измерения известен и сохраняли в волновой функции или матрице плотности только ту часть, которая соответствует случившемуся результату измерения. Это *селективное измерение*.

Неселективное измерение не даёт наблюдателю информации о том, чему равна измеряемая величина. Наблюдатель лишь знает чему равна вероятность того или иного исхода. Для каждого конкретного исхода он мог бы задать волновую функцию, но он не знает какой именно исход состоялся. **Любое измерение до того, как оно проведено, или до того, как до нас дошла информация об исходе измерения, следует рассматривать как неселективное.**

Состояние после неселективного измерения в случае общего положения описывается не волновой функцией, а матрицей плотности, даже если первоначальное состояние было чистым.

При известном исходе измерения k (*селективное измерение*) нормированная на вероятность матрица плотности после измерения выражается как

$$\hat{\rho}_k = \hat{P}_k \hat{\rho}_{\text{до}} \hat{P}_k \in \mathcal{H}_k \otimes \mathcal{H}_k^*, \quad \text{tr} \hat{\rho}_k = p_k.$$

При неизвестном исходе измерения (*неселективное измерение*) нам надо просуммировать матрицы плотности по всем возможным исходам:

$$\hat{\rho}_{\text{н.с.}} = \sum_k \hat{P}_k \hat{\rho}_{\text{до}} \hat{P}_k, \quad \text{tr} \hat{\rho}_{\text{н.с.}} = 1. \quad (5.40)$$

Веса, соответствующие вероятностям исходам здесь не нужны, т.к. $\hat{\rho}_k$ нормированы на вероятности.

Если матрица плотности записана в базисе собственных векторов измеряемой величины, то после неселективного измерения матрица становится блочно-диагональной — все диагональные блоки, отвечающие определённому k сохраняются, все недиагональные блоки обнуляются.

Матрица до измерения:

$$\hat{\rho} = \hat{1} \hat{\rho} \hat{1} = \left(\sum_k \hat{P}_k \right) \hat{\rho} \left(\sum_{k'} \hat{P}_{k'} \right) = \sum_{k,k'} \hat{P}_k \hat{\rho} \hat{P}_{k'}.$$

Недиагональные слагаемые

$$\hat{P}_k \hat{\rho} \hat{P}_{k'}, \quad k \neq k'$$

после измерения обнуляются и из двойной суммы остаётся сумма диагональных элементов (5.40). Можно сказать, что неселективное измерение обнуляет члены связанные квантовой интерференцией, но не трогает членов связанных с классическими вероятностями.

(Ф) Состояние системы после селективного измерения в принципе не предсказуемо (можно предсказать лишь вероятности исходов). Состояние системы после неселективного измерения, заданное как матрица плотности предсказуемо заранее, оно содержит все возможные результаты измерений.

(фф*) В литературе при обсуждении процедуры измерения много путаницы между селективным и неселективным измерением. В частности вопрос о природе выбора системой того или иного исхода измерения (т.е. вопрос о квантовых вероятностях, имеющий смысл только для селективного измерения) часто (почти всегда) подменяется выводом в том или ином приближении формулы (5.40) для неселективного измерения.

5.3.3 Приготовление состояния

Процедура измерения превращает состояние системы в собственное для некоторого эрмитового оператора (наблюдаемой). Формально мы можем придумать эрмитов оператор $\hat{P}_\phi$, для которого собственным состоянием будет любое наперёд заданное состояние $|\phi\rangle$, причём данное состояние будет невырожденным, например:

$$\hat{P}_\phi = |\phi\rangle\langle\phi|.$$

При измерении наблюдаемой $\hat{P}_\phi$ мы получаем одно из двух значений: либо 0, либо 1 (мы считаем, $\|\phi\| = 1$). В последнем случае система попадает в состояние $|\phi\rangle$.

Таким образом, имея исходную систему в произвольном состоянии и измеряя некоторую, специально подобранную физическую величину мы, при благоприятном исходе измерения помещаем систему в нужное нам состояние.

Описанная процедура *измерения с последующим отбором* называется *приготовлением состояния*.

Например, мы можем *приготовить* фотоны в состоянии с определённой линейной поляризацией пропустив их через поляризатор. Часть фотонов при этом окажется забракованной (поглотится или отразится, в зависимости от устройства поляризатора).

Разумеется, приготовление состояния срабатывает не всегда, а с вероятностью $|\langle\psi|\phi\rangle|^2$, которая в случае общего положения отлична от нуля.

Не всегда удаётся придумать физический эксперимент, измеряющий искусственно сконструированную наблюдаемую. В некоторых случаях, когда такой эксперимент может оказаться запрещён законами сохранения.

Глава 6

Одномерные квантовые системы

Случай одномерного движения квантовой частицы является одним из самых простых в квантовой механике.¹ Кроме того, одномерные задачи часто возникают в процессе решения более сложных задач при разделении переменных. Наличие для одномерного случая удобных свойств и интересных теорем окончательно убеждает в необходимости посвятить одномериию отдельную главу.

На протяжении этой главы мы будем исследовать гамильтониан для частицы в потенциале $U(x)$ который может быть записан так:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x). \quad (6.1)$$

6.1 Структура спектра

6.1.1 Откуда берётся спектр?

Соответствующее гамильтониану (6.1) стационарное уравнение Шрёдингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + U(x) \psi(x) = E \psi \Leftrightarrow \psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \psi(x) = 0. \quad (6.2)$$

Задача нахождения спектра этого уравнения в математике называется *задачей Штурма-Лиувилля*. Она была заранее² исследована Жозефом Лиувиллем и Шарлем Штурмом ещё в 19-м веке (1837–1841 гг.).

Потенциал $U(x)$ мы будем считать непрерывным или кусочно непрерывным.

При каждом значении E это линейное дифференциальное уравнение второго порядка имеет два линейно независимых решения. Однако физический смысл стационарных состояний имеют только те решения, которые можно отнормировать на 1 (дискретный спектр), либо на δ -функцию (непрерывный спектр).



Рис. 6.1: Шарль Франсуа Штурм (1803–1855). W

¹Одномерное движение — не самый простой случай. Пространство состояний для такой системы $L_2(\mathbb{R})$ бесконечномерно и изоморфно любому другому бесконечномерному сепарабельному гильбертову пространству. Самое маленькое пространство состояний квантовой системы — $\mathbb{C}^2$ соответствует спину $\frac{1}{2}$, или любой другой двухуровневой системе.

²Заранее, с точки зрения квантовой теории.

Таким образом, мы обнаруживаем, что при данном конкретном значении E из двумерного пространства решений физический смысл имеет только некоторое подпространства размерности 2, 1, или 0 (в последнем случае нетривиальных решений нет совсем).

Обычно условие нормируемости (на δ -функцию или на 1) можно заменить условием ограниченности.

6.1.2 Вещественность собственных функций

Поскольку функция $U(x)$ вещественна, для всякого решения $\psi(x)$ дифференциального уравнения (6.2) (как и аналогичного уравнения в пространстве любой размерности!) функции

$$\psi^*(x), \quad \operatorname{Re} \psi(x) = \frac{\psi(x) + \psi^*(x)}{2}, \quad \operatorname{Im} \psi(x) = \frac{\psi(x) - \psi^*(x)}{2i}$$

также являются решениями. Причём из ограниченности, или нормируемости $\psi(x)$ следует ограниченности или нормируемости для тех функций из набора ψ^* , $\operatorname{Re} \psi$ и $\operatorname{Im} \psi$, которые не равны тождественно нулю. Благодаря этому при исследовании спектра мы можем ограничиться вещественными решениями.

6.1.3 Структура спектра и асимптотика потенциала

Пусть потенциал $U(x)$ имеет пределы на обоих бесконечностях:

$$U_- = \lim_{x \rightarrow -\infty} U(x), \quad U_+ = \lim_{x \rightarrow +\infty} U(x).$$

Также нам может понадобиться значение потенциала в нижней точке и в верхней точке

$$U_0 = \min_{x \in \mathbb{R}} U(x), \quad U_1 = \max_{x \in \mathbb{R}} U(x).$$

Пусть, для определённости, $U_- \leq U_+$, тогда эти четыре точки расположены на шкале энергий в следующем порядке

$$U_0 \leq U_- \leq U_+ \leq U_1.$$

При $x \rightarrow \pm\infty$ уравнение Шрёдингера стремится к виду

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_{\pm})\psi(x) = 0. \quad (6.3)$$

Его решение задаётся волнами де Бройля при $E > U_{\pm}$, или вещественными экспонентами при $E < U_{\pm}$:

$$e^{\pm ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_{\pm})}; \quad e^{\pm \kappa x}, \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_{\pm} - E)}.$$

Обе волны де Бройля ограничены, хотя и квадратично не интегрируемы. Это означает, что при $E > U_-$ мы не сможем отнормировать волновую функцию на 1, а значит в этом диапазоне не может быть состояний дискретного спектра.

При $E \geq U_+$ асимптотики на обоих бесконечностях всегда ограничены, с какими бы коэффициентами мы не комбинировали волны де Бройля. Это означает, что в этом диапазоне энергий все значения E принадлежат к непрерывному спектру являются двукратно вырожденными.

При $U_+ > E > U_-$ на $+\infty$ мы вместо волн де Бройля получаем вещественные экспоненты. Из этих двух асимптотик только одна $e^{-\kappa x}$ ограничена, а другая $e^{+\kappa x}$ неограниченно возрастает. Таким образом на асимптотику на $+\infty$

$$\psi(x) \sim c_- e^{-\kappa x} + c_+ e^{+\kappa x}, \quad x \rightarrow +\infty$$

накладывается **одно условие**: $c_+ = 0$. Это условие выделяет из двумерного пространства решений уравнения (6.2) одномерное подпространство. На $-\infty$ по-прежнему любое решение ограничено, но не квадратично интегрируемо. Таким образом, в диапазоне $U_+ > E > U_-$ все значения энергии принадлежат к непрерывному невырожденному спектру.

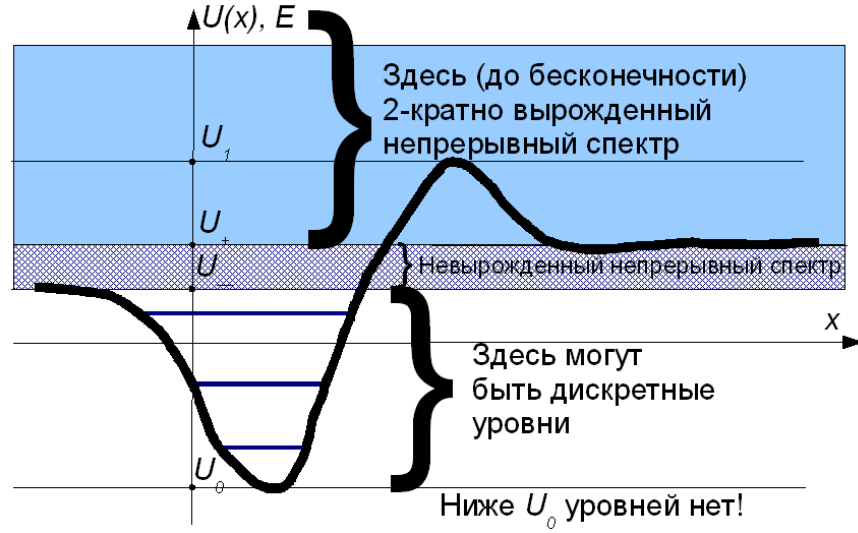


Рис. 6.2: Структура спектра в одномерном случае.

При $E < U_-$ мы имеем на обеих бесконечностях экспоненциальные асимптотики:

$$\psi(x) \sim c_- e^{-\kappa x} + c_+ e^{+\kappa x}, \quad x \rightarrow +\infty;$$

$$\psi(x) \sim d_- e^{-\kappa x} + d_+ e^{+\kappa x}, \quad x \rightarrow -\infty.$$

Условие ограниченности теперь даёт два граничных условия:

$$c_+ = 0, \quad d_- = 0.$$

Если эти два условия линейно независимы, то в двумерном пространстве решений уравнения (6.2) не остаётся ненулевых ограниченных решений. Если эти два условия окажутся линейно зависимыми, то останется одно линейно независимое ограниченное решение. И если при конечных x не будет разрывов ψ , около которых интеграл от $|\psi|^2$ расходится, то состояние окажется принадлежащим к дискретному спектру. Поскольку в состояниях дискретного спектра вероятность обнаружить частицы на больших расстояниях от классически разрешённой области экспоненциально спадает с расстоянием, мы будем также называть такие состояния *связанными*.

В случае общего положения условия $c_+ = 0$, $d_- = 0$ должны быть линейно независимыми, так что почти все значения $E < U_-$ не являются собственными. Есть ли среди них хотя бы одно собственное значение (разумеется дискретное)?

При $E \leq U_0$ ограниченных собственных функций нет. Если выбрать вещественную волновую функцию (возможность этого была доказаны выше 6.1.2 «Вещественность собственных функций»), то окажется, что ψ'' и ψ везде имеют одинаковый знак:

$$\psi''(x) = \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(U_{\pm} - E)}_{\geq 0} \psi(x).$$

Если на $\psi(x \rightarrow -\infty) > 0$ (этого всегда можно добиться умножением на число), то при $x \rightarrow -\infty$ получаем $\psi > 0$, $\psi' > 0$ (из единственной разрешённой асимптотики $e^{\kappa x}$) и $\psi'' > 0$. При этом, если волновая функция не терпит разрывов, то она должна монотонно возрастать на всей оси. Таким образом, при $x \rightarrow +\infty$ мы также получаем $\psi > 0$ и $\psi' > 0$. Однако это не совместимо с асимптотикой $e^{-\kappa x}$, (единственной разрешённой на $+\infty$).

В диапазоне $U_- > E > U_0$ при разных потенциалах дискретные уровни энергии могут как присутствовать, так и отсутствовать.

С помощью правила Бора-Зоммерфельда (см. ниже 13.5.4 «Квазиклассическое квантование») общее число дискретных уровней можно оценить следующим интегралом, который также можно считать мерой глубины ямы:

$$N = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{U(x) < U_-} \sqrt{2m(U_- - U(x))} dx > 0. \quad (6.4)$$

Таким образом, **достаточно глубокая яма любой формы должна содержать дискретные уровни.**

Задачу определения наличия уровней в мелкой яме мы рассмотрим отдельно, а пока дадим без вывода результат. При условии

$$U_1 = U_+ = U_- > U_0 \quad (6.5)$$

всегда существует хотя бы один дискретный уровень.

Также забегая вперёд, отметим, что *существование дискретного уровня в мелкой яме является особенностью одномерной задачи.*

6.1.4 Прямоугольная яма

Рассмотрим потенциал прямоугольной потенциальной ямы ширины a и глубины V :

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| \geq \frac{a}{2} \\ -V, & |x| < \frac{a}{2} \end{cases}. \quad (6.6)$$

Все неотрицательные значения энергии относятся к непрерывному спектру. Нас интересуют дискретные уровни энергии, которые могут лежать в диапазоне $0 > E > -V$.

Потенциал прямоугольной ямы задаётся чётной функцией $U(x) = U(-x)$, отсюда следует, что гамильтониан коммутирует с оператором пространственной инверсии $\hat{I}$ ($\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$), т.е. $\hat{H}\hat{I} = \hat{I}\hat{H}$. Для такого гамильтониана мы можем выбрать собственные состояния так, чтобы они были также собственными для оператора $\hat{I}$ (см. 4.2 «Матрицы (л)»), т.е. чтобы все они были чётными или нечётными.

Стационарные состояния, не являющиеся состояниями с определённой чётностью, возможны только в непрерывном вырожденном спектре при $E > 0$. При $E < 0$ спектр невырожден и каждое состояние либо чётно, либо нечётно.

Рассматриваемый потенциал кусочно постоянен. В пределах каждого куска уравнение Шрёдингера даёт решение в виде волн де Бройля (если $E > U(x)$) или вещественных экспонент (если $E < U(x)$).

В точках разрыва потенциала нам надо поставить условия склейки волновой функции. Причём, поскольку одномерное уравнение Шрёдингера является обыкновенным дифференциальным уравнением второго порядка, достаточно потребовать непрерывности самой функции ψ и её первой производной:

$$\begin{aligned}\psi(\frac{a}{2} + 0) &= \psi(\frac{a}{2} - 0), & \psi'(\frac{a}{2} + 0) &= \psi'(\frac{a}{2} - 0); \\ \psi(-\frac{a}{2} + 0) &= \psi(-\frac{a}{2} - 0), & \psi'(-\frac{a}{2} + 0) &= \psi'(-\frac{a}{2} - 0).\end{aligned}$$

Впрочем, из четырёх условий сшивки можно ограничиться двумя (например, в точке $\frac{a}{2}$), если сразу искать решения с определённой чётностью.

Будем параллельно рассматривать чётный и нечётный случаи пометая их индексами «+» и «-» соответственно.

Поскольку нас интересуют в первую очередь собственные числа, нормировочные множители выбираем так, чтобы не загромождать вычисления.

Справа от ямы волновая функция может быть выбрана в виде

$$\psi_{\pm}(x) = e^{-\kappa_{\pm}(x-a/2)}, \quad \psi'(x) = -\kappa_{\pm} e^{-\kappa_{\pm}(x-a/2)}, \quad \kappa_{\pm} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE_{\pm}}, \quad x \geq \frac{a}{2}.$$

На границе ямы получаем

$$\psi_{\pm}(a/2 + 0) = 1, \quad \psi'_{\pm}(a/2 + 0) = -\kappa_{\pm}.$$

Волновую функцию слева от ямы можно восстановить из чётности и отдельно её исследовать нет необходимости:

$$\psi_{\pm}(x) = \pm \psi_{\pm}(-x), \quad x \leq -\frac{a}{2}.$$

Внутри ямы волновая функция задаётся чётной или нечётной комбинацией волн де Бройля, т.е. косинусом или синусом:

$$\psi_{+}(x) = A_{+} \cos(k_{+}x), \quad \psi_{-}(x) = A_{-} \sin(k_{-}x), \quad k_{\pm} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E_{\pm} + V)}, \quad x \in [-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}],$$

$$\psi'_{+}(x) = -A_{+}k_{+} \sin(k_{+}x), \quad \psi'_{-}(x) = A_{-}k_{-} \cos(k_{-}x).$$

На границе ямы получаем

$$\begin{aligned}\psi_{+}(\frac{a}{2} - 0) &= A_{+} \cos(k_{+}\frac{a}{2}), & \psi_{-}(\frac{a}{2} - 0) &= A_{-} \sin(k_{-}\frac{a}{2}), \\ \psi'_{+}(\frac{a}{2} - 0) &= -A_{+}k_{+} \sin(k_{+}\frac{a}{2}), & \psi'_{-}(\frac{a}{2} - 0) &= A_{-}k_{-} \cos(k_{-}\frac{a}{2}).\end{aligned}$$

Условия сшивки

$$\psi_{\pm}(\frac{a}{2} + 0) = \psi_{\pm}(\frac{a}{2} - 0), \quad \psi'_{\pm}(\frac{a}{2} + 0) = \psi'_{\pm}(\frac{a}{2} - 0)$$

дают две системы линейных уравнений с одним неизвестным $A_{\pm}$ для чётного и нечётного случаев:

$$\begin{cases} A_{+} \cos(k_{+}\frac{a}{2}) = 1 \\ -A_{+}k_{+} \sin(k_{+}\frac{a}{2}) = -\kappa_{+} \end{cases}; \quad \begin{cases} A_{-} \sin(k_{-}\frac{a}{2}) = 1 \\ A_{-}k_{-} \cos(k_{-}\frac{a}{2}) = -\kappa_{-} \end{cases}.$$

Для собственных состояний уравнения в системе должны давать одинаковые значения $A_{\pm}$. Разделив второе уравнение на первое получим условия разрешимости

$$k_+ \operatorname{tg}(k_+ \frac{a}{2}) = \kappa_+; \quad -k_- \operatorname{ctg}(k_- \frac{a}{2}) = \kappa_-.$$

Полученные трансцендентные уравнения мы исследуем графически.

Сначала обезразмерим их умножив на $\frac{a}{2}$. Введём обезразмеренное волновое число $K_+ = k_+ \frac{a}{2}$ для чётного случая и $K_- = k_- \frac{a}{2}$ для нечётного. Также введём обезразмеренный параметр затухания $\Lambda_{\pm}$ и параметр глубины ямы R :

$$\Lambda_{\pm} = \frac{a}{2} \kappa_{\pm} = \frac{a}{2\hbar} \sqrt{2m(E_{\pm} + V)} = \sqrt{\frac{mVa^2}{2\hbar^2} - K_{\pm}^2} = \sqrt{R^2 - K_{\pm}^2}, \quad R = \sqrt{\frac{mVa^2}{2\hbar^2}}.$$

Обезразмеренные уравнения принимают вид

$$K_+ \operatorname{tg} K_+ = \sqrt{R^2 - K_+^2}; \quad -K_- \operatorname{ctg} K_- = \sqrt{R^2 - K_-^2}.$$

Поскольку с точностью до замены $K_+ \leftrightarrow K_-$ правые части уравнений совпадают их графики удобно изобразить на одной координатной плоскости.

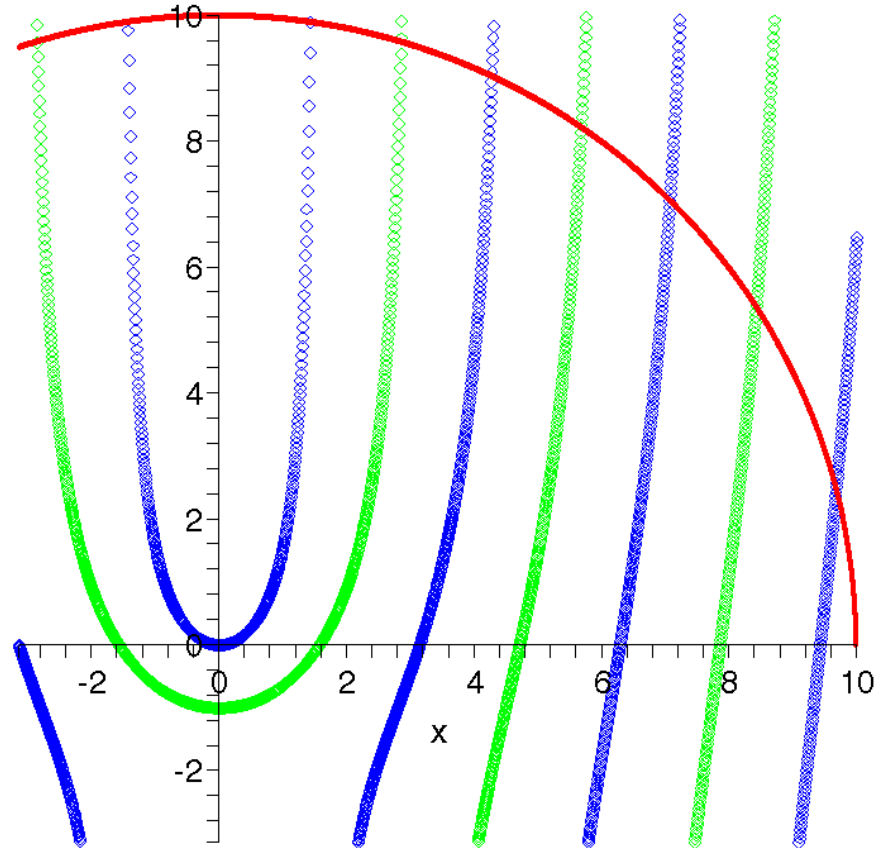


Рис. 6.3: Графики на плоскости $K - \Lambda$. Графики $K \operatorname{tg} K$, $-K \operatorname{ctg} K$ и $\sqrt{R^2 - K^2}$ (для $R = 10$). Физический смысл имеет только область $K > 0$, $\Lambda > 0$.

Правая часть обоих уравнений изображается кругом радиуса R . Левая часть для чётного случая изображается ветвями, имеющими нули в точках πn и асимптоты в точках $\pi n + \frac{\pi}{2}$. Для нечётного случая нули и асимптоты в левой части меняются местами.

При любом значении параметра R всегда имеется хотя бы одно чётное решение.

Число уровней

Мы видим, что общее число чётных и нечётных решений соответствует числу точек вида $\frac{\pi}{2}n$ попавших в диапазон $[0, R]$.³

Чётные и нечётные решения чередуются, при этом в яме всегда есть по крайней мере один чётный уровень.

Общее число решений составляет

$$N_{\pi} = \left[\frac{2R}{\pi} \right] + 1 = \left[\frac{\sqrt{2mV}a}{\pi\hbar} \right] + 1 = [N] + 1.$$

где квадратные скобки обозначают целую часть числа. Таким образом, число решений отличается от приведённой выше квазиклассической оценки (6.4) не более чем на 1.

Глубокие уровни*

Для глубоких уровней ($\Lambda = \sqrt{R^2 - K^2} \gg 1$) значения K близки к $\frac{\pi}{2}n$, т.к. окружность пересекает ветви $K \operatorname{tg} K$ и $-K \operatorname{ctg} K$ на большой высоте, там где они близко подходят к своим асимптотам. Условие $K = \frac{\kappa a}{2} \approx \frac{\pi n}{2}$ соответствует тому, что в яме помещается почти (чуть меньше чем) целое число полуволн. При этом на границе ямы волновая функция близка к нулю, и очень быстро по сравнению с размером ямы ($\frac{\kappa a}{2} = \Lambda \gg 1$) спадает за пределами ямы.

Предел мелкой ямы*

Мелкой естественно считать прямоугольную яму, в которой имеется ровно один уровень, т.е. для которой

$$\frac{2R}{\pi} = \frac{\sqrt{2mV}a}{\pi\hbar} < 1.$$

Если устремить параметр R к нулю, т.е. в пределе

$$\frac{2R}{\pi} = \frac{\sqrt{2mV}a}{\pi\hbar} \ll 1,$$

трансцендентное уравнение для основного состояния можно решить:

$$K \operatorname{tg} K = \sqrt{R^2 - K^2}, \quad \Rightarrow \quad K^2 \approx \sqrt{R^2 - K^2}$$

На K^2 получаем уравнение

$$K^4 + K^2 - R^2 \approx 0, \quad \Lambda \approx K^2 \approx \frac{-1 + \sqrt{1 + 4R^2}}{2} \approx R^2.$$

Мелкую яму удобно характеризовать одним параметром κ_0 , который характеризует скорость убывания волновой функции основного состояния вне ямы, и через который удобно выражается энергия основного состояния:

$$\kappa_0 = \frac{2\Lambda}{a} = \frac{mVa}{\hbar^2}, \quad E_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} \approx -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} = -\frac{mV^2 a^2}{2\hbar^2}.$$

³Если $R = \frac{\pi}{2}n$ то мы получаем одно ненормированное состояние с нулевой энергией.

δ -яма как мелкая яма*

Рассматривая мелкие прямоугольные ямы мы можем перейти к пределу, соответствующему переходу к δ -потенциалу

$$a \rightarrow 0, \quad V \rightarrow \infty, \quad aV = \text{const.}$$

При этом предельном переходе яма становится всё более и более мелкой

$$R = \sqrt{\frac{mVa^2}{2\hbar^2}} = \text{const} \cdot \sqrt{a} \rightarrow 0.$$

Параметр мелкой ямы κ_0 при таком переходе постоянен

$$\kappa_0 = \frac{mVa}{\hbar^2},$$

а формула для энергии основного состояния выполняется всё точнее и точнее. В пределе мы имеем

$$E_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m}. \quad (6.7)$$

Потенциал при таком предельном переходе стремится в смысле слабого предела к δ -функции:

$$\text{wlim}_{a \rightarrow 0} U(x) = -Va \delta(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \kappa_0 \delta(x).$$

Обратите внимание, что размерность дельта-функции обратна размерности аргумента! В частности дельта-функция от координаты имеет размерность обратной длины. Это легко увидеть взяв от дельта-функции интеграл:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\delta(x)}_{\text{длина}^{-1}} \cdot \underbrace{dx}_{\text{длина}} = \underbrace{1}_{\text{безразмерно}}.$$

6.1.5 δ -яма

Мы уже исследовали δ -яму как предельный случай мелкой прямоугольной ямы. Теперь мы исследуем тот же потенциал непосредственно.

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера для дельта-ямы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) - \frac{\hbar^2}{m} \kappa_0 \delta(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (6.8)$$

При $x \neq 0$ $\delta(x) = 0$, а решать уравнение Шрёдингера для нулевого потенциала мы уже умеем. Значит нам осталось исследовать условие сшивки решений с нулевым потенциалом в точке 0.

Единственное, что можно делать с дельта-функцией — проинтегрировать её. Поскольку нас интересует условие сшивки в нуле, то естественно интегрировать по малой окрестности нуля:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi''(x) dx - \frac{\hbar^2}{m} \kappa_0 \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x) \psi(x) dx = E \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi(x) dx.$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'(x) \Big|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} - \frac{\hbar^2}{m} \kappa_0 \psi(0) = E \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi(x) dx.$$

Для ограниченной функции $\psi(x)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$ получаем условие сшивки в нуле:

$$\frac{1}{2} \psi'(x) \Big|_{-0}^{+0} + \kappa_0 \psi(0) = 0. \quad (6.9)$$

Сама волновая функция в нуле должна быть непрерывна, т.к. для разрывной в нуле волновой функции ψ'' будет содержать член $\sim \delta'(x)$, который будет нечем скомпенсировать.

$$\psi(+0) = \psi(-0).$$

$\delta(x) = \delta(-x)$, т.е. дельта-яма — чётные потенциал и мы можем искать решения уравнения (6.8) отдельно для чётного и нечётного случаев.

Для непрерывных нечётных волновых функций ψ' также оказывается непрерывным:

$$\psi(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi'(+0) = \psi'(-0).$$

Это условие сшивки не чувствует дельта-ямы. Таким образом, все нечётные собственные функции для дельта-ямы такие же как для потенциала $U(x) \equiv 0$. Связанных состояний среди нечётных функций нет.

Будем искать связанное чётное состояние. Оно обязано иметь вид

$$\psi(x) = C e^{-\kappa|x|}, \quad E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}.$$

Мы сразу откинули растущие на бесконечности решения. Условие непрерывности выполняется автоматически. Осталось проверить условие сшивки (6.9). Оно даёт

$$\kappa = \kappa_0 \quad \Rightarrow \quad E_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m}.$$

Таким образом, мы воспроизвели результат (6.7), полученный ранее предельным переходом для мелкой прямоугольной ямы.

Задача: Об условии сшивки в точке δ -ямы**

Мы можем составить базис в пространстве $L_2(\mathbb{R})$ из собственных функций уравнения (6.8). Все базисные функции будут удовлетворять линейному однородному условию сшивки (6.9). В силу линейности условия (6.9) любая конечная взвешенная сумма базисных функций будет удовлетворять тому же условию сшивки.

Означает ли это, что тому же условию сшивки будет удовлетворять любая линейная комбинация базисных функций? Как условие (6.9), наложенное на базисные функции, согласуется с тем, что не все функции пространства $L_2(\mathbb{R})$ удовлетворяют этому условию?

6.1.6 Существование уровня в мелкой яме

Пусть для рассматриваемого потенциала $U(x)$ выполняются условия $U_1 = U_- = U_+ > U_0$. Нам надо доказать, что существует хотя бы одно собственное состояние с энергией $U_1 > E > U_0$. Это состояние, как было показано выше (см. Рис.6.2), неизбежно будет принадлежать дискретному спектру.

В соответствии с вариационным принципом (4.68) нам достаточно предъявить любое состояние ψ_{Π} , для которого средняя энергия меньше U_1 . Энергия этого состояния даст оценку сверху на энергию основного состояния. Оно неизбежно попадёт в указанный диапазон, т.к. ниже дна ямы U_0 уровней быть не может (см. Рис.6.2).

В качестве состояния ψ_{Π} возьмём основное состояние для мелкой симметричной прямоугольной ямы, такой, что она всюду мельче, чем яма $U(x)$:

$$U_{\Pi}(x) = \begin{cases} U_1, & x \notin (a, b) \\ U_1 - V, & x \in (a, b) \end{cases}, \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad U_{\Pi}(x) \geq U(x).$$

Как было показано выше, дискретное состояние с энергией $U_1 > E_{\Pi} > U_1 - V > U_0$ есть в любой, сколь угодно мелкой *симметричной* прямоугольной яме.

$$\begin{aligned} E_0 &< \langle \psi_{\Pi} | \hat{H} | \psi_{\Pi} \rangle = \langle \psi_{\Pi} | \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x) | \psi_{\Pi} \rangle = \\ &= \underbrace{\langle \psi_{\Pi} | \frac{\hat{p}^2}{2m} + U_{\Pi}(x) | \psi_{\Pi} \rangle}_{E_{\Pi}} + \underbrace{\langle \psi_{\Pi} | U(x) - U_{\Pi}(x) | \psi_{\Pi} \rangle}_{\substack{<0 \forall x \\ <0}} < E_{\Pi} < U_1. \end{aligned}$$

Таким образом, в любой мелкой яме удовлетворяющей условию (6.5) неизбежно имеется хотя бы одно связанное состояние с энергией E_0 , удовлетворяющей условию $U_1 > E_{\Pi} > E_0 > U_0$.

6.2 Осцилляторная теорема

Осцилляторная теорема позволяет уточнить структуру дискретного спектра одномерной квантовой системы, давая информацию о поведении нулей собственных состояний.

Всякое одномерное состояние дискретного спектра (для гамильтониана вида (6.1)) имеет два нуля на границах области определения волновой функции: это либо точки $\pm\infty$, либо точки, в которых стоят бесконечно высокие стенки, ограничивающие области движения частицы.

Помимо нулей на границе, могут быть нули внутри области определения волновой функции. Для рассматриваемых нами потенциалов (удовлетворяющих условиям теоремы существования и единственности решений обыкновенного дифференциального уравнения) все нули внутри области определения являются точками перемены знака волновой функции (собственные волновые функции мы выбираем вещественными).

Пронумеруем все дискретные уровни в порядке возрастания энергии начиная с основного состояния, которому присвоим номер 0. Будем говорить, что n -ое возбуждённое состояние — это состояние номер n , по указанное нумерации. В частности нулевое возбуждённое состояние — это состояние номер 0, то есть основное состояние.

Осцилляторная теорема.

- Число внутренних нулей n -го возбуждённого состояния равно n .
- Между каждой парой нулей состояния номер n (включая нули на границе области определения) находится один и только один нуль состояния номер $n + 1$.

Доказывать осцилляторную теорему мы будем по частям. Читатель может пропустить доказательство (все его пункты помечены звёздочками), но в любом случае знание осцилляторной теоремы полезно при исследовании спектров одномерных систем.

6.2.1 Об области применимости теоремы*

Применяя осцилляторную теорему следует следить за условиями её применимости. Например, одномерная задача может решаться с граничными условиями отличными от обнуления волновой функции на границе. Приведём некоторые контрпримеры.

- Если, мы будем решать задачу о спектре свободной частицы на отрезке $[0, a]$ с периодическими граничными условиями

$$\psi(0) = \psi(a), \quad \psi'(0) = \psi'(a), \quad (6.10)$$

то спектр (кроме основного состояния) будет дискретным и двукратно вырожденным (стоячие волны де Бройля: синусы и косинусы с длиной волны, укладывающейся в отрезок целое число раз):

$$E_0 = 0, \quad \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}; \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad ak_n = 2\pi n, \quad n = 1, 2, \dots, \\ \psi_{n+}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(k_n x), \quad \psi_{n-}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x). \quad (6.11)$$

- Если, мы будем решать задачу о спектре свободной частицы на отрезке $[0, a]$ с антипериодическими граничными условиями

$$\psi(0) = -\psi(a), \quad \psi'(0) = -\psi'(a),$$

то основное состояние станет двукратно вырожденным

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad ak_n = \pi(2n + 1), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

Собственные функции задаются теми же формулами (6.11). При этом одно из двух основных состояний (ψ_{0+}) будет менять знак в точке $\frac{a}{2}$.

- Если, мы будем решать задачу о спектре свободной частицы на отрезке $[0, a]$ с периодическими граничными условиями со сдвигом фазы, например

$$\psi(0) = i\psi(a), \quad \psi'(0) = i\psi'(a),$$

то очевидно, что среди собственных функций (бегущих волн де Бройля) не будет ни одной вещественной и ни одной обращаемой в нуль.

- Нарушение условий единственности решений стационарных уравнений Шрёдингера с данными граничными условиями физически соответствует тому, что область определения разделена бесконечно высокими стенками на несколько кусков, тогда в пределах каждого куска волновая функция задаётся независимо. В этом случае осцилляторная теорема применима для волновой функции локализованной в пределах конкретного куска, но не для их объединения.

6.2.2 Нули основного состояния*

Покажем, что основное состояние не имеет внутренних нулей, т.е. оно не меняет знак на всей области определения.

Пусть ψ_0 ($\|\psi_0\| = 1$) — основное состояние. E_0 — средняя энергия в основном состоянии. Согласно вариационному принципу (см. раздел 4.11.2) основное состояние соответствует минимуму средней энергии системы. Поскольку в одномерном случае дискретный спектр невырожден, состояние со средней энергией E_0 единственно с точностью до числового множителя.

$$E_0 = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle, \quad \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \psi_1 = e^{i\alpha} \psi_0, \quad \alpha \in \mathbb{R}.$$

Состояние, задающееся функцией $\psi_1(x) = |\psi_0(x)| = \psi_0(x) \operatorname{sgn}(\psi_0(x))$ даёт ту же среднюю энергию:⁴

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle &= \int \psi_1(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_1''(x) + U(x) \psi_1(x) \right) dx = \\ &= \int \psi_0(x) \operatorname{sgn}(\psi_0(x)) \times \\ &\times \left(-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi_0''(x) \operatorname{sgn}(\psi_0(x)) + \psi_0'(x) \operatorname{sgn}'(\psi_0(x))] + U(x) \psi_0(x) \operatorname{sgn}(\psi_0(x)) \right) dx = \\ &= \int \psi_0(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_0''(x) + U(x) \psi_0(x) \right) dx = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle = E_0. \end{aligned}$$

Добавки связанные с δ -функцией (sgn') обнуляются т.к. попадают на нули функции $\psi_0(x)$ и умножаются на значение ψ_0 в данных точках.

Таким образом, в силу невырожденности дискретных уровней в одномерном случае, состояние ψ_1 отличается от исходного состояния ψ_0 на постоянный множитель, что возможно только когда ψ_0 нигде не меняет знака.

Случай периодических граничных условий**

Приведённое доказательство можно модифицировать для случая периодических граничных условий на отрезке (6.10), который выше приводился в качестве контрпримера.

Мы не можем заранее утверждать, что основное состояние невырождено, поэтому состояние ψ_1 обязано иметь ту же энергию E_0 , но оно может оказаться основным состоянием.

Пространство стационарных состояний с энергией E_0 — линейное пространство, так что мы можем наряду с ψ_0 и ψ_1 рассматривать такие функции, как

$$\psi_+(x) = \frac{\psi_0 + \psi_1}{2} = \psi_0(x) \theta(\psi_0(x)), \quad \psi_-(x) = \frac{\psi_0 - \psi_1}{2} = \psi_0(x) \theta(-\psi_0(x)).$$

Здесь ($\theta(x) = \frac{\operatorname{sgn} x + 1}{2}$ — ступенька). Функции ψ_+ и ψ_- совпадают с ψ_0 в областях положительного (отрицательного) знака и тождественно равны нулю в областях противоположного знака. Существование отличных от нуля волновых функций, для которых в какой-то точке $\psi(x_0) = \psi'(x_0) = 0$ нарушает условия существования и единственности решения стационарного уравнения Шрёдингера,⁵ так что

⁴Комплексное сопряжение не пишем, т.к. волновая функция вещественна.

⁵Нарушение условий единственности упоминалось как один из примеров выше (см. 6.2.1 «Области применимости теоремы*»).

предположение о линейной независимости ψ_0 и ψ_1 не выполняется и мы приходим к выводу, что основное состояние одномерной системы с периодическими граничными условиями вообще не имеет нулей.

Основное состояние должно быть невырожденным т.к. две функции имеющие постоянный знак в одинаковой области (в силу условия единственности) не могут быть ортогональны друг другу.

6.2.3 Вронскиан (л*)

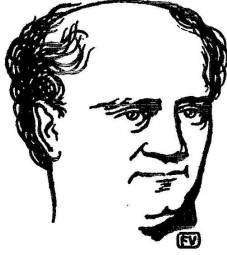


Рис. 6.4:

Юзеф Вроньский
(1776–1853).
[1897 г. Felix Vallotton. W]

Удобным инструментом для исследования зависимости решений дифференциального уравнения является *вронскиан* (*определитель Вроньского*), введенный Юзефом Вроньским в 1812 году.

Поскольку мы изучаем дифференциальные уравнения второго порядка, то и вронскиан нам понадобится второго порядка:

$$W[\psi_1, \psi_2] = \begin{vmatrix} \psi_1 & \psi_2 \\ \psi_1' & \psi_2' \end{vmatrix} = \psi_1 \psi_2' - \psi_2 \psi_1'. \quad (6.12)$$

Если вронскиан обратился в ноль в точке x , это означает что значения функций и их первых производных в точке x пропорциональны друг другу. Для дифференциального уравнения второго порядка зная функцию и её производную в точке x мы можем поставить *задачу Коши* и найти значения функции на всей оси. Таким образом, если ψ_1 и ψ_2 являются решениями уравнений Шрёдингера для одного и того же потенциала и для одной и той же энергии, то (в силу того, что уравнения линейные, однородные, второго порядка) если вронскиан равен нулю в одной точке $W[\psi_1, \psi_2](x) = 0$, то он равен нулю всюду и функции ψ_1 и ψ_2 пропорциональны друг другу.

Докажем более общее утверждение, описывающих зависимость вронскиана от координаты для двух функций, являющихся решениями стационарного уравнения Шрёдингера.

$$\begin{aligned} W'[\psi_1, \psi_2] &= \psi_1 \psi_2'' - \psi_2 \psi_1'' = \psi_1 \frac{2m_2}{\hbar^2} (U_2(x) - E_2) \psi_2 - \psi_2 \frac{2m_1}{\hbar^2} (U_1(x) - E_1) \psi_1 = \\ &= \psi_1 \psi_2 \frac{2}{\hbar^2} [m_2 (U_2(x) - E_2) - m_1 (U_1(x) - E_1)]. \end{aligned}$$

Если $m_1 = m_2 = m$ и $U_1(x) = U_2(x)$, то соотношение упрощается:

$$W'[\psi_1, \psi_2] = \psi_1 \psi_2 \frac{2m}{\hbar^2} [E_1 - E_2]. \quad (6.13)$$

Проинтегрировав формулы (6.13) получаем

$$W[\psi_1, \psi_2](x_1) - W[\psi_1, \psi_2](x_0) = \frac{2m}{\hbar^2} [E_1 - E_2] \int_{x_0}^{x_1} \psi_1(x) \psi_2(x) dx. \quad (6.14)$$

6.2.4 Рост числа нулей с номером уровня*

Применим формулу (6.14) для изменения вронскиана к двум последовательным нулям $x_0 < x_1$ дискретного стационарного состояния ψ_1 с энергией E_1 . Второе состояние ψ_2 пусть также будет дискретным собственным с энергией $E_2 > E_1$.

Функции $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ возьмём вещественные, причём выберем такой знак, чтобы $\psi_1(x) > 0$ при $x \in (x_0, x_1)$.

$$\begin{aligned} & \underbrace{\overbrace{[\psi_1(x_1) \psi_2'(x_1) - \psi_2(x_1) \psi_1'(x_1)]}^0}_{W[\psi_1, \psi_2](x_1)}}^{\leq 0} - \underbrace{\overbrace{[\psi_1(x_0) \psi_2'(x_0) - \psi_2(x_0) \psi_1'(x_0)]}^0}_{W[\psi_1, \psi_2](x_0)}}^{\geq 0} = \\ & = \psi_2(x_1) \overbrace{(-\psi_1'(x_1))}^{\geq 0} + \psi_2(x_0) \overbrace{\psi_1'(x_0)}^{\geq 0} = \overbrace{\frac{2m}{\hbar^2} [E_1 - E_2]}^{< 0} \int_{x_0}^{x_1} \overbrace{\psi_1(x)}^{> 0} \psi_2(x) dx. \end{aligned}$$

Это равенство не может выполняться, если функция $\psi_2(x)$ не меняет знак на интервале (x_0, x_1) хотя бы один раз.

Таким образом, между любыми двумя нулями функции $\psi_1(x)$ (включая два нуля на границе области определения) найдётся хотя бы один ноль функции $\psi_2(x)$. Таким образом, число нулей стационарного состояния $\psi_2(x)$, отвечающего большей энергии *строго больше* чем число нулей стационарного состояния $\psi_1(x)$.

(*) Принадлежность состояний ψ_1 и ψ_2 к дискретному спектру важна для сходимости интеграла лишь в случае бесконечной области интегрируемости. Если x_0 и x_1 конечны, то от этого условия можно отказаться. Таким образом, между любыми двумя нулями вещественной функции непрерывного спектра также будет хотя бы один ноль другой вещественной собственной функции, отвечающей большей энергии.

6.2.5 Сокращение числа нулей*

Для того, чтобы завершить доказательство осцилляторной теоремы (после того, как мы доказали рост числа нулей с ростом энергии), нам осталось показать, что если для некоторого одномерного гамильтониана вида (6.1) существует дискретное стационарное состояние ψ_n с энергией E_n , имеющее n внутренних нулей, то найдётся дискретное стационарное состояние ψ_{n-1} того же гамильтониана с числом внутренних нулей равным $n - 1$.

Пусть x_k , $k = 1, \dots, n$ — внутренние нули функции ψ_n . x_0 и x_{n+1} — границы области определения. Пусть нули пронумерованы в порядке возрастания:

$$-\infty \leq x_0 < \underbrace{x_1 < \dots < x_n}_{\text{внутренние нули}} < x_{n+1} \leq +\infty.$$

Если разделить ось x на $n + 1$ интервал (x_k, x_{k+1}) ($k = 0, \dots, n$), поставив в точках x^k ($k = 1, \dots, n$) бесконечно высокие стенки, то в каждой из $n + 1$ получившихся потенциальных ям мы будем иметь дискретный спектр, для которого состояние

$$\psi_{nk}(x) = I_{(x_k, x_{k+1})}(x) \cdot \psi_n(x), \quad k = 0, \dots, n$$

(характеристическая функция определена уравнением (3.10)), полученное ограничением ψ_n на соответствующий интервал станет основным, т.к. ψ_n , ограниченное на соответствующий интервал уже не имеет внутренних нулей.

Покажем, при помощи вариационного принципа (см. раздел 4.11.2), что при расширении одной из ям, за счёт отодвигания стенки энергия основного состояния строго убывает. При расширении ямы номер k средняя энергия, вычисленная для состояния ψ_{nk} не изменится, т.к. мы просто расширим область интегрирования

вне (x_k, x_{k+1}) , туда где $\psi_{nk}(x) \equiv 0$. Таким образом энергия основного состояния не увеличится. Однако функция $\psi_{nk}(x)$ не может доставлять минимум гамильтониану расширенной ямы, так как она тождественно равна нулю на интервале, на который отодвинулась стенка, не удовлетворяет на этом интервале условию единственности и не может быть собственной функцией. Значит энергия основного состояния при расширении ямы станет строго меньше.

Если мы будем двигать стенки, то между двумя стенками спектр всегда будет только дискретным, а значит будет дискретным и основное состояние.

Между стенкой и бесконечной точкой (если $x_0 = -\infty$, или $x_{n+1} = +\infty$) дискретный спектр заведомо сохранится, если мы не будем сдвигать крайнюю левую стенку левее x_1 , а крайнюю правую — правее x_n , т.к. асимптотика на бесконечности не может «испортиться» при понижении уровня энергии.

Чтобы доказать существование состояния ψ_{n-1} над достаточно показать, что мы можем выкинуть одну из n стенок, которые мы поставили в точки x_k , а оставшиеся так расставить на интервале (x_1, x_n) в точки y_k ($k = 1, \dots, n-1$), чтобы энергии основных уровней во всех n ямах совпали друг с другом. Тогда искомую функцию всегда можно записать как линейную комбинацию функций основных состояний $\psi_{n-1,k}$ ($k = 0, \dots, n-1$) в ямах между новыми положениями стенок:

$$\psi_{n-1}(x) = \sum_{k=0}^{n-1} c_{n-1,k} \psi_{n-1,k}(x).$$

Значения функций $\psi_{n-1,k}(x)$ вне соответствующих интервалов (y_k, y_{k+1}) равны нулю, а коэффициенты $c_{n-1,k}$ подбираются так, чтобы обеспечить в точках y_k непрерывность первой производной ψ'_{n-1} .

Покажем что расстановка $n-1$ стенки, при которой энергия основных состояний во всех n ямах одинакова действительно существует. Для этого мы сделаем естественное предположение, что энергия основного состояния непрерывно зависит от положения бесконечно высоких стенок, её ограничивающих.

Пусть стенки перемещаются по следующим правилам:

0) Начнём с конфигурации с выкинутой первой стенкой. Т.е. пусть стенки стоят в точках $y_k(0) = x_{k+1}$ ($k = 1, \dots, n-1$).

1) На шаге номер k ($k = 1, \dots, n-1$) мы передвигаем стенку номер k влево настолько, чтобы уравнивать энергии основных состояний в ямах справа и слева от справа от неё. В результате мы получаем конфигурацию стенок $y_k(1)$, в которой энергии основных состояний в яме k монотонно возрастают справа налево при $k = 0, \dots, n-2$, а в последних двух ямах основные уровни совпадают, причём $E_{n-1,n-2}(1) = E_{n-1,n-1}(1) < E_n$

2) Повторяем шаг 1) бесконечно много раз.

3) В результате все мы получаем некоторую предельную конфигурацию стенок y_k ($k = 1, \dots, n-1$). Предел обязан существовать, т.к. все стенки сдвигаются только влево, и не одна и из них не сдвигается левее чем x_1 , т.к. сдвиг левее чем x_1 означает, что $E_{n-1,0} > E_n$, что невозможно.

6.2.6 Завершение доказательства*

Мы показали, что если состояние дискретного спектра имеет n внутренних нулей, то мы можем построить состояние, имеющее $n-1$ нуль. Уменьшая число нулей на каждом шаге на один мы, убеждаемся, что в дискретном спектре число

внутренних нулей меняется с шагом единица от нуля (для основного состояния) до некоторого максимального числа или бесконечности.

Доказанное ранее утверждение, что число нулей в непрерывном спектре растёт с ростом энергии теперь означает, что число нулей нумерует дискретные уровни подряд в порядке возрастания энергии.

Нули функции ψ_{n+1} должны чередоваться с нулями ψ_n , т.к. нам нужен нуль на каждом промежутке между нулями функции ψ_n , а таких промежутков имеется ровно $n + 1$.

Таким образом, осцилляторная теорема доказана.

6.3 Одномерная задача рассеяния

6.3.1 Постановка задачи

В одномерном случае, когда потенциал на бесконечностях имеет конечные пределы может быть поставлена одномерная задача рассеяния, в которой для падающей частицы с определённой энергией надо определить с какой вероятностью она пройдёт через потенциал, а с какой вероятностью отразится обратно.

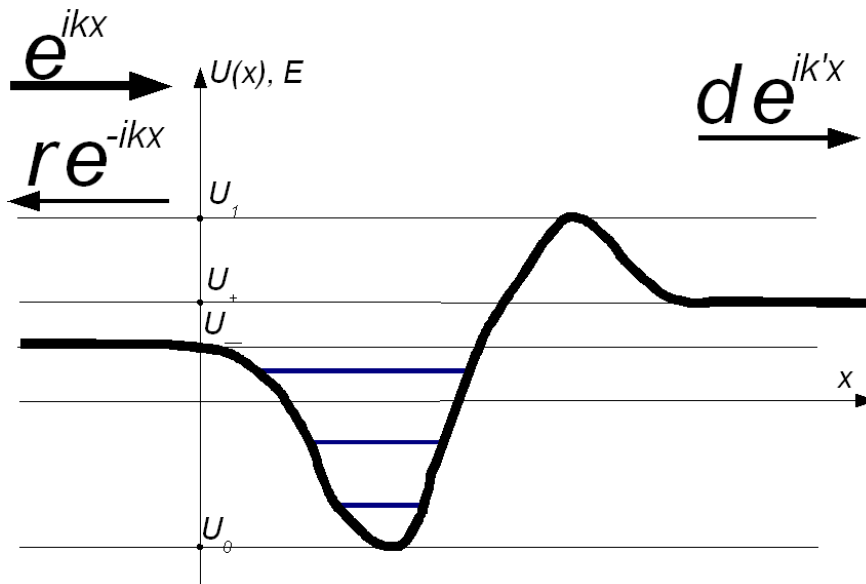


Рис. 6.5: Асимптотики волновой функции на бесконечностях в одномерной задаче рассеяния.

Одномерная задача рассеяния ставится для энергии из непрерывного спектра, причём, как мы увидим далее, нетривиальное решение возможно только для вырожденного значения энергии.

Одномерная задача рассеяния ставится как задача определения асимптотики на бесконечности (там, где потенциал выходит на константу) решения стационарного

уравнения Шрёдингера определённого вида:

$$\begin{aligned}
 \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x)) &= 0, \\
 \psi(x) &\rightarrow \underbrace{e^{ikx}}_{\text{падающая волна}} + \underbrace{r e^{-ikx}}_{\text{отражённая волна}}, \quad x \rightarrow -\infty \\
 \psi(x) &\rightarrow \underbrace{d e^{ik'x}}_{\text{прошедшая волна}}, \quad x \rightarrow +\infty, \\
 k &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_-)}, \quad k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_+)}.
 \end{aligned} \tag{6.15}$$

Из задачи (6.15) определяются *амплитуда отражения* r и *амплитуда прохождения* d . Падающая, отражённая и прошедшая волны ненормированы на 1. Падающая волна отнормирована на единичную (относительную) вероятность на единицу длины. В отражённой и рассеянной волнах вероятность (относительная) на единицу длины составляет $|r|^2$ и $|d|^2$. В падающей и отражённой волне частица имеет импульс $+\hbar k$ и $-\hbar k$. В прошедшей волне — $+\hbar k'$. Скорость (классическая, или групповая) пропорциональна импульсу, таким образом отношение потоков в отражённой волне и падающей волне (коэффициент отражения) совпадает с отношением вероятностей. Отношение потоков в прошедшей и падающей волне (коэффициент прохождения) отличается от отношения вероятностей на отношения скоростей частиц (импульсов, или волновых чисел).

Т.е. коэффициенты (вероятности) отражения R и прохождения D определяются так:

$$R = |r|^2, \quad D = \frac{k'}{k} |d|^2. \tag{6.16}$$

Поскольку частица не может исчезнуть или быть захваченной потенциалом (т.к. энергия сохраняется) $R + D = 1$ (ниже мы это строго докажем).

6.3.2 Пример: рассеяние на ступеньке

Рассмотрим одномерную задачу рассеяния на потенциале ступеньки:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ V, & x > 0 \end{cases}.$$

В данном случае асимптотическое поведение волновой функции (6.15) начинается непосредственно от нуля:

$$\psi(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx}, \quad \psi'(x) = ik(e^{ikx} - r e^{-ikx}), \quad x \leq 0, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE},$$

$$\psi(x) = d e^{ik'x}, \quad \psi'(x) = ik' d e^{ik'x}, \quad x \geq 0, \quad k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V)}.$$

Нам остаётся сшить волновую функцию в нуле используя условия непрерывности самой функции и её первой производной:

$$\psi(-0) = 1 + r = \psi(+0) = d, \quad \psi'(-0) = ik(1 - r) = \psi'(+0) = ik'd.$$

Получаем систему

$$\begin{cases} 1 + r = d, \\ 1 - r = \frac{k'}{k} d \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} d = \frac{2k}{k+k'}, \\ r = \frac{k-k'}{k+k'}. \end{cases} \tag{6.17}$$

Из амплитуд выражаем коэффициенты прохождения и отражения

$$R = |r|^2 = \left| \frac{k - k'}{k + k'} \right|^2, \quad D = \frac{k'}{k} |d|^2 = \frac{4kk'}{|k + k'|^2}.$$

Для полученного ответа выполняются следующие свойства:

- $R + D = 1$ — сохранение вероятности,
- При $V = 0$ (ступенька исчезает) $k = k'$, частица проходит без рассеяния: $R = 0$, $D = 1$.
- При $E \rightarrow +\infty$ получаем $\frac{k}{k'} \rightarrow 1$, частица проходит без рассеяния: $R \rightarrow 0$, $D \rightarrow 1$.
- При $V > E$ волновое число k' — мнимое, частица полностью отражается: $R = 1$, D — мнимое, что означает, «неправильную» (экспоненциальную) асимптотику при $x > 0$, т.е. вместо мнимого D следует брать $D = 0$.⁶
- Если рассмотреть рассеяние справа налево, или, что равносильно, заменить V на $-V$, а E на $E - V$, т.е. поменять местами k и k' , то R и D не изменятся. (неизменность D и R при изменении направления рассеяния в общем случае доказывается далее в разделе 6.3.5 «Рассеяние слева направо и справа налево»).

Проверка этих общих свойств для конкретного потенциала может применяться как простейший самоконтроль полученного решения одномерной задачи рассеяния.

6.3.3 Пример: рассеяние на δ -яме

Рассмотрим одномерную задачу рассеяния на потенциале δ -ямы:

$$U(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \kappa_0 \delta(x).$$

Как и для ступеньки, асимптотическое поведение волновой функции (6.15) начинается непосредственно от нуля:

$$\psi(x) = e^{ikx} + re^{-ikx}, \quad \psi'(x) = ik(e^{ikx} - re^{-ikx}), \quad x \leq 0,$$

$$\psi(x) = de^{ikx}, \quad \psi'(x) = ikde^{ikx}, \quad x \geq 0, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}.$$

Одно из условий сшивки по-прежнему условие непрерывности волновой функции, а второе изменяется на условие на скачок первой производной для δ -ямы:

$$\psi(-0) = 1 + r = \psi(+0) = d, \quad \psi'|_{-0}^{+0} = ikd - ik(1 - r) = -2\kappa_0\psi(0) = -2\kappa_0d.$$

Получаем систему

$$\begin{cases} 1 + r = d, \\ d + r - 1 = 2i\frac{\kappa_0}{k}d \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} d = \frac{k}{k - i\kappa_0}, \\ r = \frac{i\kappa_0}{k - i\kappa_0} \end{cases}. \quad (6.18)$$

⁶Мнимому D тоже можно придать физический смысл, но это уже не будет коэффициент прохождения.

Из амплитуд выражаем коэффициенты прохождения и отражения

$$R = |r|^2 = \frac{\kappa_0^2}{k^2 + \kappa_0^2}, \quad D = |d|^2 = \frac{k^2}{k^2 + \kappa_0^2}.$$

Как пример самопроверки снова проверим общие свойства:

- $R + D = 1$ — сохранение вероятности,
- При $\kappa = 0$ (яма исчезает) частица проходит без рассеяния: $R = 0$, $D = 1$.
- При $E \rightarrow +\infty$ получаем $\frac{\kappa_0}{k} \rightarrow 0$, частица проходит без рассеяния: $R \rightarrow 0$, $D \rightarrow 1$.
- При $\kappa_0 \rightarrow -\infty$ δ -яма превращается в δ -барьер, который по мере роста $-\kappa_0$ становится всё более и более непроницаемым, частица полностью отражается: $R \rightarrow 1$, $D \rightarrow 0$.
- Для чётного потенциала рассеяние справа налево не полностью симметрично рассеянию слева направо и отдельно его рассматривать не надо.

6.3.4 Общие свойства одномерного рассеяния

Разрешимость задачи

Если k и k' вещественны, то E — двукратно вырожденное состояние. Отсутствие падающей волны в асимптотике на $+\infty$ (т.е. равенство нулю амплитуды при члене $e^{-ik'x}$ при $x \rightarrow +\infty$) выделяет из двумерного пространства состояний с данной энергий одномерное подпространство. Единичная амплитуда падающей волны (e^{ikx} при $x \rightarrow +\infty$) фиксирует нормировку рассматриваемого решения. Таким образом, амплитуды r и d определяются однозначно.

Если k — вещественное, а k' — мнимое, то энергия E относится к непрерывному невырожденному спектру. Асимптотика на $+\infty$ имеет вид $e^{-|k'|x}$, так что следует считать, что $d = 0$.⁷ Как уже говорилось выше, в одномерном случае стационарные состояния могут быть записаны как вещественные волновые функции. Для невырожденного уровня это означает, что собственное состояние всегда может быть сделано вещественным умножением на постоянный множитель. Для асимптотики $x \rightarrow -\infty$ получаем, что $|r| = 1$, т.е. частица отражается с единичной вероятностью. Однако фаза амплитуды r может нести некоторую интересную информацию (например, если одномерная задача получена из задачи на радиальное движение в центральном поле).

Сохранение вероятности*

Свойство сохранения вероятности при рассеянии ($R + D = 1$) мы уже обосновали. Теперь мы его докажем.

⁷Как мы уже видели выше, для рассеяния на ступеньке с высотой выше чем энергия частицы, аналитическое продолжение со случая бегущей прошедшей волны $e^{ik'x}$ на случай вещественной экспоненты даст нам ненулевое значение d , однако формально вычисленный коэффициент прохождения $D = \frac{k'}{k} |d|^2$ при этом оказывается мнимым, что ясно говорит нам, что $e^{ik'x}$ уже не волна де Бройля, а вещественная экспонента, затухающая на $+\infty$, и правильное значение $d = 0$.

Плотность вероятности $\varrho(x)$ обнаружения частицы в точке x и плотность потока вероятности $\mathbf{j}(x)$ задаются выражениями⁸

$$\varrho(x) = |\psi(x)|^2, \quad \mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (-\psi^* \nabla \psi + \psi \nabla \psi^*) = \operatorname{Re} \left(\psi^*(x) \frac{\hat{p}}{m} \psi(x) \right).$$

Для них выполняется уравнение непрерывности⁹

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad \Rightarrow \quad \text{в одномерии} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0.$$

В одномерном случае вектор $\mathbf{j}$ имеет всего одну компоненту.

Для стационарных состояний от времени зависит только фаза волновой функции и $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$. Так что для одномерных стационарных состояний, которые используются в одномерной задаче рассеяния, ток вероятности вдоль всей оси постоянен:

$$j(x) = \operatorname{const}, \quad j(x) = \frac{i\hbar}{2m} (-\psi^* \psi' + \psi \psi'^*).$$

Вычислим $j(x)$ на $-\infty$ и $+\infty$, используя заданные при постановке задачи (6.15) асимптотики:

$$\begin{aligned} j(+\infty) &= |d|^2 \frac{\hbar k'}{m}, & j(-\infty) &= (1 - |r|^2) \frac{\hbar k}{m}. \\ j(-\infty) &= j(+\infty) & \Rightarrow & \quad 1 - \underbrace{|r|^2}_R = \underbrace{\frac{k'}{k} |d|^2}_D. \end{aligned}$$

6.3.5 Рассеяние слева направо и справа налево**

Выше мы сформулировали одномерную задачу рассеяния для волны, падающей слева направо (6.15), однако мы можем поставить для того же потенциала $U(x)$ задачу рассеяния для волны, падающей справа налево:

$$\psi_o'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) = 0, \quad (6.19)$$

$$\psi_o(x) \rightarrow \underbrace{e^{-ik'x}}_{\text{падающая волна}} + \underbrace{r_o e^{ik'x}}_{\text{отражённая волна}}, \quad x \rightarrow +\infty$$

$$\psi_o(x) \rightarrow \underbrace{d_o e^{-ikx}}_{\text{прошедшая волна}}, \quad x \rightarrow -\infty,$$

$$\begin{aligned} k &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_-)}, & k' &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_+)}, \\ R_o &= |r_o|^2, & D_o &= \frac{k}{k'} |d_o|^2. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Решив для одного потенциала $U(x)$ задачу рассеяния в обоих направлениях для энергии $E > U_+$ мы получим два разных решения $\psi(x)$ и $\psi_o(x)$ стационарного уравнения Шрёдингера для одного и того же потенциала и одной и той же энергии.

⁸См. раздел 13.6 «Сохранение вероятности и уравнение непрерывности», можно отложить чтение текущего раздела до тех пор, пока указанный раздел не будет изучен, или перепрыгнуть вперёд, а потом вернуться назад. Либо, последовать совету в следующей сноске.

⁹ Вы можете используя уравнение Шрёдингера легко проверить это уравнение, и рассматривать его как обоснование приведённого определения $\mathbf{j}$. Либо можно ограничиться проверкой свойства $j(x) = \operatorname{const}$ для одномерного стационарного случая.

Ещё два решения того же уравнения для той же энергии мы можем получить взяв комплексно сопряжённые функции $\psi^*(x)$ и $\psi_o^*(x)$.

Все четыре решения принадлежат к одному двумерному линейному пространству решений стационарного уравнения Шрёдингера с данной энергией. Отсюда следует, что между ними должна быть линейная зависимость.

Чтобы исследовать зависимость решений используем *вронскиан* (6.12) (см. 6.2.3 «Вронскиан ($\mathcal{L}^*$)»). Для частиц, движущихся с одинаковой энергией в одинаковых потенциалах, вронскиан от координаты не зависит (6.13)!

Подставляя в вронскиан асимптотики на $\pm\infty$ четырёх связанных с одномерной задачей рассеяния решений уравнения Шрёдингера $\psi(x)$, $\psi^*(x)$, $\psi_o(x)$, $\psi_o^*(x)$ мы получим ряд тождеств на параметры этих асимптотик r , d , r_o , d_o , k , k' .

- $\frac{i}{2}W[\psi, \psi^*] = \underbrace{k'|d|^2}_{x \rightarrow +\infty} = \underbrace{k(1 - |r|^2)}_{x \rightarrow -\infty}$ — с точностью до множителя этот вронскиан совпадает с током вероятности j для решения $\psi(x)$. Мы ещё раз доказали сохранение вероятности в одномерной задаче рассеяния.
- $\frac{i}{2}W[\psi_o, \psi_o^*] = \underbrace{-k'(1 - |r_o|^2)}_{x \rightarrow +\infty} = \underbrace{-k|d_o|^2}_{x \rightarrow -\infty}$ — с точностью до множителя этот вронскиан совпадает с током вероятности j для решения $\psi_o(x)$.
- $\frac{i}{2}W[\psi, \psi_o] = \underbrace{k'd}_{x \rightarrow +\infty} = \underbrace{k d_o}_{x \rightarrow -\infty}$ — отсюда получаем (поскольку k и k' вещественны), что

$$D = \frac{k'}{k}|d|^2 = \frac{k}{k'}|d_o|^2 = D_o.$$

Коэффициенты прохождения (а значит и коэффициенты отражения) через барьер в обе стороны одинаковы!

- $\frac{i}{2}W[\psi, \psi_o^*] = \underbrace{k'dr_o^*}_{x \rightarrow +\infty} = \underbrace{-k d_o^* r}_{x \rightarrow -\infty}.$

6.3.6 Волновые пакеты

До сих пор мы рассматривали рассеяние на потенциале бесконечно длинных монохроматических волн. Это предельный случай, который принципиально не может быть реализован на практике, так как плоская волна, как и любое состояние непрерывного спектра, не может быть нормирована на единицу.

Реальное рассеяние — рассеяние волновых пакетов, которые уже не являются монохроматическими, но зато имеют конечную норму. Рассеяние достаточно длинных волновых пакетов (длинных по координате и узких по импульсу) должно в пределе соответствовать тому, что мы уже получили для монохроматических волн (состояний с определённой энергией).

Следует ожидать, что падающий волновой пакет провзаимодействовав с потенциалом расщепится на два волновых пакета: прошедший и отражённый, причём интегралы от $|\psi(x)|^2$ по интервалам содержащим соответствующие пакеты будут соответствовать коэффициентам прохождения и отражения для данного потенциала.

Свободный волновой пакет

Рассмотрим волновой пакет, распространяющийся в потенциале $U(x) = \text{const}$. Полученный результат потом можно будет сравнить с асимптотическим поведением отражённой и прошедшей волны в областях $x \rightarrow \pm\infty$ где потенциал выходит на константу.

Мы уже рассматривали движение и распыление волнового пакета ранее, (5.2.6 «Эволюция волнового пакета для свободной частицы»).

Любую волновую функцию можно разложить по монохроматическим волнам используя преобразование Фурье:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ikx} f(k - k_0) dk. \quad (6.21)$$

Волновой пакет, который нас интересует должен описываться функцией $f(k - k_0)$ которая быстро стремится к нулю, когда k удаляется от k_0 , тогда волна будет близкой к монохроматической.

Вынеся из под интеграла множитель e^{ik_0x} мы записываем $\psi(x)$ в виде произведения монохроматической волны на медленно зависящую от координаты амплитуду $\tilde{f}(x)$, связанную с функцией $f(k')$ преобразованием Фурье:

$$\psi(x) = e^{ik_0x} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ik'x} f(k') dk'}_{\tilde{f}(x)} = \tilde{f}(x) e^{ik_0x}. \quad (6.22)$$

Характерное изменение волнового числа δk , на котором спадает функция f должно быть достаточно малым по сравнению с k_0 .

Волновая функция $\psi(x)$ осциллирует с волновым числом близким к k_0 , при этом длина волнового пакета $\delta x \sim \frac{1}{\delta k}$ оценивается из соотношения неопределённостей.

Волна с волновым числом k осциллирует во времени с циклической частотой $\omega(k)$:

$$e^{i(kx - \omega(k)t)}.$$

В частности для свободной нерелятивистской частицы

$$\omega(k) = \frac{E(k)}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Для исходного волнового пакета получаем

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{i(kx - \omega(k)t)} f(k - k_0) dk = \\ &= e^{i(k_0x - \omega(k_0)t)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{i(k'x - [\omega(k_0 + k') - \omega(k_0)]t)} f(k') dk'. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Предположим, что функция $f(k')$ достаточно быстро спадает с ростом аргумента, чтобы разность частот можно было выразить через производную:

$$\omega(k_0 + k') - \underbrace{\omega(k_0)}_{\omega_0} \approx \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} k' = v(k_0) k'.$$

Здесь $v_0 = v(k_0) = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0}$ — функция с размерностью скорости, которую далее мы идентифицируем как *групповую скорость* (для свободной частицы $v(k) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$)

$$\psi(x, t) \approx e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ik'(x-v_0 t)} f(k') dk'}_{\tilde{f}(x-v_0 t)} = \tilde{f}(x-v_0 t) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}. \quad (6.24)$$

Таким образом, волновой пакет движется не меняя формы¹⁰ с групповой скоростью $v_0 = v(k_0)$.

Рассеяние волнового пакета*

Точно также как выше (6.21) мы построили волновой пакет из монохроматических волн, построим с помощью той же функции $f(k - k_0)$ суперпозицию волновых функций, описывающих рассеяние монохроматических волн близкой частоты:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi_k(x) f(k - k_0) dk, \\ \psi_k''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E(k) - U(x)) \psi_k(x) &= 0, \\ \psi_k(x) &\rightarrow e^{ikx} + r(k) e^{-ikx}, \quad x \rightarrow -\infty \\ \psi_k(x) &\rightarrow d(k) e^{ik'(k)x}, \quad x \rightarrow +\infty, \\ E(k) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad k'(k) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E(k) - U_+)} = \sqrt{k^2 - \frac{2mU_+}{\hbar^2}}, \\ \int |f(k)|^2 dk &= \int |\tilde{f}(x)|^2 dx = 1. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Если теперь учесть зависимость от времени, дающую для состоянию с энергией $E(k)$ множитель $e^{-i\omega(k)t}$, $\omega(k) = \frac{E(k)}{\hbar}$, мы получим

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi_k(x) e^{-i\omega(k)t} f(k - k_0) dk. \quad (6.26)$$

Исследуем асимптотическое поведение $\psi(x, t)$ при $x \rightarrow \pm\infty$.

Запишем амплитуды отражения и прохождения в следующем виде:

$$r(k) = |r(k)| e^{i\alpha(k)} \approx |r(k)| e^{i(\alpha_0 + \alpha_1(k - k_0))} \approx r_0 e^{i\alpha_1(k - k_0)},$$

$$d(k) = |d(k)| e^{i\beta(k)} \approx |d(k)| e^{i(\beta_0 + \beta_1(k - k_0))} \approx d_0 e^{i\beta_1(k - k_0)}.$$

Мы пренебрегли изменением абсолютной величины амплитуд, но учли изменение их фазы до первого порядка по $k - k_0$.¹¹

Продельвая для двух слагаемых асимптотики $x \rightarrow -\infty$ преобразования, аналогичные преобразованиям, приведшим к бегущему волновому пакету (6.24) полу-

¹⁰Чтобы учесть распывание волнового пакета разность частот $\omega(k_0 + k') - \omega(k_0)$ надо разложить до второй производной по k' , чтобы учесть дисперсию (зависимость от волнового числа) групповой скорости.

¹¹Если учесть зависимость $|r|$ и $|d|$ от k , то это приведёт лишь к искажению формы волнового пакета и необходимости усреднения $R(k)$ и $D(k)$ с весом $|f(k - k_0)|^2$.

чаем

$$\begin{aligned}
 x &\rightarrow \infty \\
 \psi(x, t) &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int (e^{ikx} + r(k) e^{-ikx}) e^{-i\omega(k)t} f(k - k_0) dk = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{i(kx - \omega(k)t)} f(k - k_0) dk + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int r_0 e^{i(-kx - \omega(k)t + \alpha_1(k - k_0))} f(k - k_0) dk = \\
 &= \underbrace{\tilde{f}(x - v_0 t) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}}_{\text{падающий пакет}} + \underbrace{r_0 \tilde{f}(\alpha_1 - x - v_0 t) e^{i(-k_0 x - \omega_0 t)}}_{\text{отражённый пакет}}.
 \end{aligned} \tag{6.27}$$

Мы видим, что при достаточно больших отрицательных значениях x , когда потенциал уже можно считать константой, падающий волновой пакет, чья форма описывается функцией $\tilde{f}(x - v_0 t)$, движется направо по закону $x = v_0 t$. Через рассматриваемую область этот пакет проходит при больших отрицательных временах.

Вероятность обнаружить частицу в падающем пакете равна 1:

$$\int_{-\infty}^0 |\psi(x, t \rightarrow -\infty)|^2 dx = \int |\psi(x, t)|^2 dx = \int |\tilde{f}(x)|^2 dx = 1.$$

Отражённый пакет имеет форму описывающуюся функцией $\tilde{f}(-x - v_0 t + \alpha_1)$, он движется через ту же область больших отрицательных x по закону

$$x = \alpha_1 - v_0 t = -v_0 \left(t - \frac{\alpha_1}{v_0} \right).$$

Вероятность обнаружить частицу в отражённом пакете равна $|r_0|^2$, т.е. коэффициенту (вероятности) отражения:

$$\int_{-\infty}^0 |\psi(x, t \rightarrow +\infty)|^2 dx = \int |r_0 \tilde{f}(-x)|^2 dx = |r_0|^2 \int |f(k - k_0)|^2 dk = |r_0|^2 = R_0.$$

Функцию $k'(k)$ мы также разложим до первого порядка по $k - k_0$:

$$k'(k) = \underbrace{k'(k_0)}_{k_1} + \underbrace{\frac{dk'}{dk} \Big|_{k=k_0}}_C \underbrace{(k - k_0)}_{k_2} = k_1 + C k_2, \quad C = \frac{dk'}{dk} \Big|_{k=k_0} = \frac{k}{k'} \Big|_{k=k_0} = \frac{k_0}{k_1}.$$

Продельвая для $x \rightarrow +\infty$ аналогичные преобразования получаем

$$x \rightarrow +\infty \tag{6.28}$$

$$\begin{aligned}
 \psi(x, t) &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d(k) e^{ik'(k)x} e^{-i\omega(k)t} f(k - k_0) dk \approx \\
 &\approx e^{i(k_1 x - \omega_0 t)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d_0 e^{i(C(k - k_0)x - [\omega(k) - \omega_0]t + \beta_1(k - k_0))} f(k - k_0) dk \approx \\
 &\approx e^{i(k_1 x - \omega_0 t)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d_0 e^{ik_2(Cx - v(k_0)t + \beta_1)} f(k_2) dk_2 = \\
 &= \underbrace{d_0 \tilde{f}(Cx - v(k_0)t + \beta_1) e^{i(k_1 x - \omega_0 t)}}_{\text{прошедшая волна}} = d_0 \tilde{f}\left(\frac{k_0}{k_1}(x - v_1 t) + \beta_1\right) e^{i(k_1 x - \omega_0 t)}, \\
 v_1 &= \frac{v(k_0)}{C} = \frac{\frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_1}}{\frac{dk}{dk'} \Big|_{k'=k_1}} = \frac{d\omega}{dk'} \Big|_{k'=k_1}.
 \end{aligned} \tag{6.29}$$

Таким образом, прошедший пакет имеет форму описываемую функцией $\tilde{f}\left(\frac{k_0}{k_1}(x - v_1 t) + \beta_1\right)$, которая сжата по координате, по сравнению с функцией $\tilde{f}$ в $\frac{k_0}{k_1}$ раз, он движется через область больших положительных x по закону

$$x = v_1 t - \beta_1 \frac{k_1}{k_0} = v_1 \left(t - \frac{\beta_1 k_1}{v_1 k_0}\right) = v_1 \left(t - \frac{\beta_1}{v_0}\right).$$

Вероятность обнаружить частицу в прошедшем пакете равна $|d|^2 \frac{k_1}{k_0}$, т.е. коэффициенту (вероятности) прохождения:

$$\int_0^{+\infty} |\psi(x, t \rightarrow +\infty)|^2 dx = \int \left| d_0 \tilde{f}\left(\frac{k_0}{k_1} x\right) \right|^2 dx = |d_0|^2 \frac{k_1}{k_0} = D_0.$$

Таким образом, мы проверили, что определённые ранее коэффициенты отражения и прохождения действительно определяют вероятности отражения и прохождения частицы для почти монохроматического волнового пакета.

Если продолжить законы движения волновых пакетов на малые времена, то окажется, что через точку $x = 0$ они проходят в ненулевые моменты времени, $\frac{\alpha_1}{v_0}$ и $\frac{\beta_1}{v_0}$.

Если $\alpha_1(v_0 - v_1) + 2v_1\beta_1 = 0$, тогда три прямые, изображающие движение трёх волновых пакетов пересекаются в одной точке и мы можем обратить эти задержки в нуль сдвигом начала координат по x , но в общем случае эти задержки не могут быть обнулены.

Таким образом, рассмотрев рассеяние волновых пакетов мы не только проверили постановку одномерной задачи рассеяния, но и уточнили её. Теперь помимо амплитуд и коэффициентов отражения и прохождения мы можем определять времена (или длины) задержки волновых пакетов при рассеянии. Длины задержки можно выразить следующими формулами

$$\alpha_1(k) = \text{Im} \frac{1}{r^*(k)} \frac{d}{dk} r(k), \quad \beta_1(k) = \text{Im} \frac{1}{d^*(k)} \frac{d}{dk} d(k).$$

Соответствующие времена получаются делением на групповую скорость при $x \rightarrow -\infty$, т.е. $v_0 = \frac{\hbar k}{m}$.

Далее мы рассмотрим эти задержки на примерах рассеяния на ступеньке и δ -ямы.

Пример: задержка волновых пакетов рассеянных ступенькой*

Вернёмся к рассмотренному ранее процессу рассеяния волнового пакета на ступеньке. Амплитуды прохождения и отражения имеют вид (6.17)

$$d = \frac{2k}{k + k'}, \quad r = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad E > V, \quad k, k' \in \mathbb{R}.$$

Для энергии выше высоты ступеньки обе амплитуды вещественны, т.е. прошедший и отражённый волновые пакеты выходят из начала координат без задержки.

Для энергии ниже высоты ступеньки, d надо положить равным нулю, а амплитуды r можно получить аналитическим продолжением:

$$d = 0, \quad r = \frac{k - k'}{k + k'} = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}, \quad E < V, \quad k, \kappa \in \mathbb{R},$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V - E)} = \sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2} - k^2} = \sqrt{\kappa_1^2 - k^2},$$

$$r(k) = \frac{k - i\sqrt{\kappa_1^2 - k^2}}{k + i\sqrt{\kappa_1^2 - k^2}}, \quad r^* = \frac{1}{r}, \quad \kappa_1^2 = \frac{2mV}{\hbar^2},$$

$$\alpha_1(k) = \text{Im} \frac{1}{r^*} \frac{dr}{dk} = \text{Im} r \frac{dr}{dk} = 2 \frac{\kappa_1^4 + 4\kappa_1^2 k^2 - 4k^4}{\kappa_1^4 \kappa}.$$

Для высокой ступеньки ($\kappa_1 \gg k$) получаем

$$\alpha_1(k) \approx \frac{2}{\kappa}.$$

Т.е. задержка отражённого волнового пакета соответствует глубине проникновения волны в потенциальный барьер.

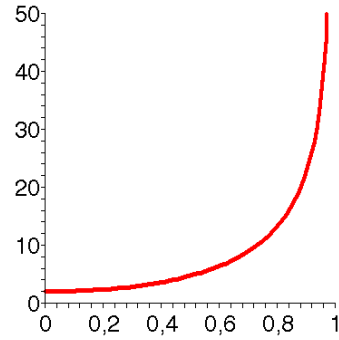


Рис. 6.6: $\alpha_1(k)$ — длина задержки для волны, отражённой от ступеньки. Единица измерения длины — $\frac{1}{\kappa_1}$.

Пример: задержка волновых пакетов рассеянных δ -ямой*

Вернёмся к рассмотренному ранее процессу рассеяния волнового пакета на δ -яме. Амплитуды прохождения и отражения имеют вид (6.18)

$$d = \frac{k}{k - i\kappa_0}, \quad r = \frac{i\kappa_0}{k - i\kappa_0}.$$

$$\alpha_1 = \kappa_0 \frac{\kappa_0^2 - 3k^2}{(k^2 + \kappa_0^2)^2}, \quad \beta_1 = -\kappa_0 \frac{k^2 - 3\kappa_0^2}{(k^2 + \kappa_0^2)^2}.$$

В пределе низкой энергии ($|\kappa_0| \gg k$) задержки определяются длиной затухания волновой функции в связанном состоянии δ -ямы:

$$\alpha_1 \approx \frac{1}{\kappa_0}, \quad \beta_1 \approx \frac{3}{\kappa_0}.$$

В пределе высокой энергии ($|\kappa_0| \ll k$) мы получаем уже не задержки, а опережения:

$$\alpha_1 \approx -3\frac{\kappa_0}{k^2}, \quad \beta_1 \approx -\frac{\kappa_0}{k^2}.$$

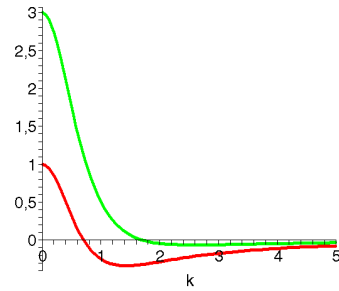


Рис. 6.7: Длина задержки для волны, отражённой (нижний график) и прошедшей (верхний график) через δ -яму. Единица измерения длины — $\frac{1}{\kappa_0}$.

6.3.7 Резонансное рассеяние*

Процесс рассеяния на потенциале можно рассматривать как интерференцию падающей волны и волн, отражённых (возможно многократно) от неоднородностей потенциала. При этом в зависимости от соотношения длин волн и расстояний между неоднородностями (характерных длин потенциала) интерференция может усиливать или ослаблять отражённую или прошедшую волну. В результате коэффициенты отражения и прохождения могут осциллировать при изменении энергии (и волнового числа) падающей волны.

Проще всего анализировать подобную ситуацию для случая кусочно постоянного потенциала, когда все неоднородности являются точечными: представляют собой скачки потенциала.

Пусть при данной энергии E волновое число в области $(x_0, x_0 + a)$ длины a с локально постоянным потенциалом U_a составляет $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_a)}$. Решение стационарного уравнения Шрёдингера в данной области записывается в виде

$$\psi_a(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx).$$

Если в рассматриваемой области укладывается целое число волн, то вне зависимости от A и B значения волновой функции и её первой производной на концах интервала совпадают:

$$ka = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad \psi_a(x_0) = \psi_a(x_0 + a), \quad \psi'_a(x_0) = \psi'_a(x_0 + a).$$

Если мы будем сшивать волновую функцию слева и справа от рассматриваемой области, то саму область $(x_0, x_0 + a)$ можно удалить, напрямую склеив области $(-\infty, x_0)$ и $(x_0 + a, +\infty)$. Волновая функция вне вырезанного интервала при этом не изменится. В частности, не изменятся коэффициенты отражения и прохождения.

Если в рассматриваемой области укладывается полуцелое число волн, то вне зависимости от A и B значения волновой функции и её первой производной на концах интервала отличаются только знаком:

$$ka = \pi(2n + 1), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad \psi_a(x_0) = -\psi_a(x_0 + a), \quad \psi'_a(x_0) = -\psi'_a(x_0 + a).$$

Если мы будем сшивать волновую функцию слева и справа от рассматриваемой области, то саму область $(x_0, x_0 + a)$ можно удалить, напрямую склеив области $(-\infty, x_0)$ и $(x_0 + a, +\infty)$, поменяв при этом знак волновой функции в одной из этих областей. Волновая функция с одной стороны вырезанного интервала при этом не изменится, а с другой — поменяет знак. Коэффициенты отражения и прохождения снова не изменятся.

Таким образом, при рассмотрении одномерной задачи рассеяния в области постоянного потенциала можно убрать или добавить целое число полуволен без изменения коэффициентов отражения и прохождения.

В частности, это означает, что при рассеянии на симметричной прямоугольной потенциальной яме (6.6) коэффициент отражения должен обращаться в нуль (при вырезании участка $(-\frac{a}{2}, +\frac{a}{2})$ яма как бы исчезает) при выполнении следующего условия:

$$k'a = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V)} = \pi n, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Действительно, если проделать соответствующие выкладки,¹² то для такой ямы

$$R = \frac{(k'^2 - k^2)^2 \sin^2(k'a)}{(2k'k)^2 \cos^2(k'a) + (k'^2 + k^2)^2 \sin^2(k'a)} = \frac{\frac{2mV}{\hbar^2} \sin^2(k'a)}{(2k'k)^2 \cos^2(k'a) + (k'^2 + k^2)^2 \sin^2(k'a)}.$$

При указанных (резонансных) условиях $R = 0$.

При $k'a \approx \pi(n + \frac{1}{2})$ также наблюдается резонанс, но не для прохождения, а для отражения.

При работе с кусочно-постоянными потенциалами наличие резонансного рассеяния можно использовать для проверки полученного ответа.

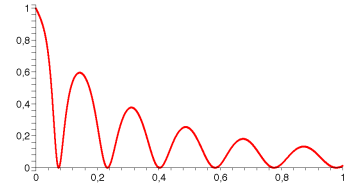


Рис. 6.8: $R(E)$ для прямоугольной ямы при $a = 30$, $\hbar = m = V = 1$.

¹²Читатель может проделать это в качестве упражнения.

Глава 7

Эффекты теории измерений

Если квантовая теория не потрясла тебя — ты её ещё не понял.

Нильс Бор W

7.1 Классическая (колмогоровская) вероятность (л*)

Предполагается, что читатель имеет некоторое (на физическом уровне строгости) представление о теории вероятностей. Однако прежде чем обсуждать тонкие различия квантовых и классических вероятностей полезно строго сформулировать, что же такое классическая вероятность.

На протяжении столетий понятие вероятности формулировалось на полуинтуитивном уровне, как частота случайных событий, что отсылало нас к плохо определённом понятию случайности. Многие математики пытались формализовать это определение.

На сегодняшний день мы имеем теорию вероятностей, основные понятия которой были сформулированы А.Н. Колмогоровым в 1933 году вообще без отсылок к случайности,¹ вместо этого вероятность рассматривается как *мера* (обобщение площади, объёма, массы и вообще количества) на некотором *вероятностном пространстве*.

Интересно, что к моменту создания квантовой теории у математиков ещё не было математически последовательной аксиоматической теории вероятностей. Лишь после возникновения *квантовой* теории, для которой понятие вероятности является центральным, была создана *классическая* аксиоматика теории вероятности. При этом классическое понимание вероятности полезно, но в некоторых случаях недостаточно для квантовой теории.²

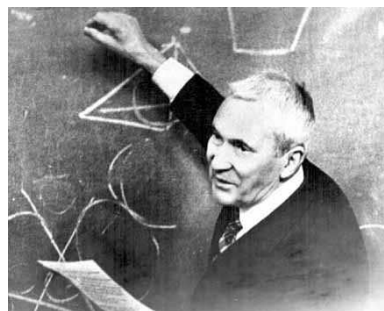


Рис. 7.1: Андрей Николаевич Колмогоров (1903–1987). W

¹Интересно, что уже после создания аксиоматики теории вероятностей, А.Н. Колмогоров исследовал возможность формализации понятия случайности, действуя в русле старой, доколмогоровской теории вероятностей. При этом были получены интересные результаты, но задача так и не была полностью решена.

²К сожалению гуманитарная культура в понимании вероятности и случайности в массе своей

7.1.1 Определение вероятностного пространства**

Вероятностное пространство — это тройка

$$(\Lambda, \Sigma, P),$$

состоящая из непустого множества Λ — *пространство элементарных событий*, некоторой сигма-алгебры Σ состоящей из подмножеств множества Λ — *множество событий*,

$$\Lambda, \emptyset \in \Sigma; \quad \forall A, B \in \Sigma: A \cap B, A \cup B \in \Sigma,$$

$$\forall A_k \in \Sigma, k \in \mathbb{N}: \bigcup_{k \in \mathbb{N}} A_k \in \Sigma;$$

и вероятностной меры (*вероятности*) P :

$$P: \Sigma \rightarrow [0, 1], \quad P(\Lambda) = 1, \quad P(\emptyset) = 0.$$

$$\forall A, B \in \Sigma, A \cap B = \emptyset: P(A \cup B) = P(A) + P(B),$$

$$\forall A_k \in \Sigma, k \in \mathbb{N}, k \neq k' \in \mathbb{N}, A_k \cap A_{k'} = \emptyset: P\left(\bigcup_{k \in \mathbb{N}} A_k\right) = \sum_{k \in \mathbb{N}} P(A_k).$$

7.1.2 Смысл вероятностного пространства*

Обсудим смысл введенных выше понятий. Мы имеем пространство элементарных событий Λ , однако может оказаться, что некоторые из этих событий имеют нулевую вероятность, но конечная вероятность может быть приписана некоторым диапозонам пространства Λ . Это типичная ситуация для непрерывного распределения вероятностей.

По этой причине, помимо пространства элементарных событий Λ вводится множество событий Σ , для которых определено значение вероятности. События можно совмещать (пересекать, на языке теории множеств) и объединять. Причём объединять можно как конечные, так и счётные наборы событий. Допустимость таких операций заложена в определение Σ .

Мера P — это и есть вероятность. Она ставит в соответствие событиям числа от 0 до 1, причём при объединении (конечном или счётном) непересекающихся (взаимно исключающих) событий их вероятности складываются.

7.1.3 Усреднение (интегрирование) по мере*

Функция на вероятностном пространстве называется *случайной величиной*

$$A: \Lambda \rightarrow \mathbb{R}.$$

С помощью вероятностной меры P мы можем определить интеграл по пространству Λ , который задаёт среднее соответствующей случайной величины:

$$\langle A \rangle = \int_{\Lambda} A(\lambda) P(d\lambda).$$

застыла в наивном классическом детерминизме, не усвоив даже классической вероятности. См. 2.5.2 «Ересь аналитического детерминизма и теория возмущений (ф)».

При этом мы можем понимать это выражение как предел интегральных сумм (интеграл Лебега), в которых $P(d\lambda)$ — мера («длина») бесконечно короткого интервала:

$$P(d\lambda) = P((\lambda, \lambda + d\lambda]).$$

Такой интеграл (если мы умеем брать обычные интегралы по Λ) может быть записан как сумма по элементарным событиям с ненулевой вероятностью и интеграл с некоторым весом $\varrho(\lambda)$ по непрерывной части распределения вероятностей:

$$\int_{\Lambda} A(\lambda) P(d\lambda) = \sum_{\lambda \in \Lambda_1} A(\lambda) P(\{\lambda\}) + \int_{\Lambda_2} A(\lambda) \varrho(\lambda) d\lambda.$$

Читатель уже знакомый с квантовой механикой может легко узнать здесь дискретный спектр Λ_1 и непрерывный спектр Λ_2 . Множества состоящие из одной точки имеют ненулевую вероятность, если эта точка принадлежит Λ_2 .

7.1.4 Вероятностные пространства в квантовой механике (Φ^*)

В квантовой механике вероятностное пространство сопоставляется каждому процессу измерения. При этом оно зависит не только от текущего состояния системы (волновой функции ψ или матрицы плотности $\hat{\rho}$), но и от измеряемой наблюдаемой $\hat{A}$.

Для каждой наблюдаемой мы можем решить спектральную задачу и получить набор собственных чисел Λ , который является пространством элементарных событий, при измерении данной наблюдаемой. Пространство Σ порождается (получается с помощью пересечения и счётного объединения) из всевозможных открытых и замкнутых интервалов на $\Lambda \subset \mathbb{R}$.

Также при решении спектральной задачи мы получаем набор проекторов на собственные подпространства, соответствующие каждому из собственных чисел λ . Точнее (особенно при наличии непрерывного спектра) говорить не о наборе проекторов, а о *проекторнозначной мере* $\hat{P}$ (см. раздел 5.3.1), которая сопоставляет каждому «хорошему» подмножеству $L \in \Sigma$ проектор на объединение собственных пространств для всех $\lambda \in L$.

Вероятностная мера P (уже без шляпки!) получается усреднением $\hat{P}$ по квантовому состоянию (ψ или ρ):

$$P(L) = \langle \psi | \hat{P}(L) | \psi \rangle \quad \text{или} \quad P(L) = \text{tr}(\hat{P}(L) \hat{\rho}).$$

Среднее (совпадающее с квантовым средним) определяется как интеграл от собственного числа по этой вероятностной мере:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= \int_{\Lambda} \lambda P(d\lambda) = \int_{\Lambda} \lambda \langle \psi | \hat{P}(d\lambda) | \psi \rangle, \\ \langle \hat{A} \rangle_{\rho} &= \text{tr}(\hat{A} \hat{\rho}) = \int_{\Lambda} \lambda P(d\lambda) = \int_{\Lambda} \lambda \text{tr}(\hat{P}(d\lambda) \hat{\rho}). \end{aligned}$$

Принципиально важно, что вероятностные пространства возникающие в квантовой механике зависят от измеряемой величины. Как следует из нарушения неравенства Белла, определить вероятностное пространство без использования измеряемой величины в рамках локальной теории невозможно.

7.2 Соотношения неопределённостей

7.2.1 Соотношения неопределённостей и (анти)коммутаторы

Для пары величин, описываемых некоммутирующими эрмитовыми операторами $\hat{A}$ и $\hat{B}$, невозможно задать общий базис собственных функций, т.е. базис состояний, в каждом из которых обе величины однозначно определены. Это накладывает принципиальные ограничения на одновременную измеримость $\hat{A}$ и $\hat{B}$.

Соотношение неопределённостей позволяет охарактеризовать эти ограничения количественно через среднеквадратичные отклонения.

Исследуем величину следующего вида:

$$X = \langle (\delta A)^2 \rangle \langle (\delta B)^2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle \langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 \rangle.$$

Пусть $|\psi\rangle$ — некоторое произвольное нормированное на единицу состояние.

Определим для данного $|\psi\rangle$ смещённые операторы:

$$\hat{A}_0 = \hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle, \quad \hat{B}_0 = \hat{B} - \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle.$$

Для коммутаторов $([\cdot, \cdot])$ и антикоммутаторов $([\cdot, \cdot]_+)$ мы можем написать следующие очевидные соотношения:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= i\hat{C} \neq 0, & \hat{C} &= \hat{C}^\dagger, \\ [\hat{A}_0, \hat{B}_0] &= \hat{A}_0\hat{B}_0 - \hat{B}_0\hat{A}_0 = [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \\ [\hat{A}_0, \hat{B}_0]_+ &= \hat{A}_0\hat{B}_0 + \hat{B}_0\hat{A}_0 = \hat{D}_0, & [\hat{A}, \hat{B}]_+ &= \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = \hat{D}, \\ \langle \psi | \hat{D}_0 | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{D} | \psi \rangle - 2\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Теперь X расписывается как произведение скалярных квадратов, для которого существует оценка снизу через скалярное произведение:³

$$X = \langle \psi | \hat{A}_0^2 | \psi \rangle \langle \psi | \hat{B}_0^2 | \psi \rangle = \langle \hat{A}_0 \psi | \hat{A}_0 \psi \rangle \langle \hat{B}_0 \psi | \hat{B}_0 \psi \rangle \geq |\langle \hat{A}_0 \psi | \hat{B}_0 \psi \rangle|^2 = |\langle \psi | \hat{A}_0 \hat{B}_0 | \psi \rangle|^2.$$

Произведение операторов расписывается через коммутатор и антикоммутатор:

$$\hat{A}_0 \hat{B}_0 = \frac{1}{2}([\hat{A}_0, \hat{B}_0] + [\hat{A}_0 \hat{B}_0]_+) = \frac{1}{2}(\hat{D}_0 + i\hat{C}).$$

$$\langle \psi | \hat{A}_0 \hat{B}_0 | \psi \rangle = \langle \psi | \frac{1}{2}(\hat{D}_0 + i\hat{C}) | \psi \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle \psi | \hat{D}_0 | \psi \rangle + i\langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle \right).$$

Поскольку операторы $\hat{C}$ и $\hat{D}_0$ эрмитовы, средние от них вещественны.

$$X \geq |\langle \psi | \hat{A}_0 \hat{B}_0 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{4} \left| \langle \psi | \hat{D}_0 | \psi \rangle + i\langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle \right|^2 = \frac{1}{4} \left(\langle \psi | \hat{D}_0 | \psi \rangle^2 + \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle^2 \right)$$

Соотношение

$$X \geq \frac{1}{4} \left(\langle \psi | \hat{D}_0 | \psi \rangle^2 + \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle^2 \right), \text{ т.е. } \langle (\delta A)^2 \rangle \langle (\delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle [\hat{A}_0, \hat{B}_0]_+ \rangle^2 + \frac{1}{4} \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2. \quad (7.1)$$

мы будем называть *обобщённым соотношением неопределённостей*.

³Мы применяем *неравенство Коши-Буняковского*, согласно которому $|\langle \psi | \phi \rangle| \leq \|\psi\| \cdot \|\phi\|$, причём неравенство превращается в равенство тогда и только тогда, когда ψ и ϕ коллинеарны.

Обычно используют более слабое *соотношение неопределённостей*

$$X \geq \frac{1}{4} \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle^2, \quad \text{т.е.} \quad \langle (\delta A)^2 \rangle \langle (\delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2. \quad (7.2)$$

Для пары из оператора координаты и соответствующей компоненты импульса $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, и мы получаем

$$\langle (\delta x)^2 \rangle \langle (\delta p)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \hbar^2.$$

Обобщённое соотношение неопределённостей (7.1) обычно переписывается через *коэффициент корреляции*

$$r = \frac{\frac{1}{2} \langle [A_0, B_0]_+ \rangle}{\sqrt{\langle (\delta A)^2 \rangle \langle (\delta B)^2 \rangle}} = \frac{\frac{1}{2} \langle [A, B]_+ \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle}{\sqrt{\langle (\delta A)^2 \rangle \langle (\delta B)^2 \rangle}}.$$

Перенеся антикоммутатор в левую часть неравенства и выразив его через r , выводим обобщённое соотношение неопределённостей в виде, первоначально полученном Робертсоном и Шрёдингером в 1930 году:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle \langle (\delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \frac{\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2}{1 - r^2}. \quad (7.3)$$

7.2.2 Так что же мы посчитали? (ф)

Так что же мы посчитали? Каков физический смысл полученных соотношений неопределённостей?

Во-первых мы более аккуратно, с учётом всех числовых констант, уточнили и обобщили выводы раздела 2.7.3 «Преобразование Фурье и соотношения неопределённостей». Т.е. связали между собой среднеквадратичную ширину волновых пакетов по переменным $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Тем самым мы получили ограничение на то, какие вообще бывают состояния, без рассмотрения какого-либо измерения.

Во-вторых мы ответили на вопрос об экспериментальных неопределённостях, но эти неопределённости соответствуют *иному* случаю, чем случай микроскопа Гайзенберга.

Рассматривая микроскоп Гайзенберга мы исследовали случай *последовательного измерения* координаты и импульса для одной и той же системы и оценивали разброс результатов. Т.е. мы рассматривали ансамбль одинаковых систем в одинаковом начальном состоянии, над каждой из которых выполняется *последовательно* измерение координаты *и* импульса.

Здесь мы оцениваем квантово-механический разброс (среднеквадратичные отклонения) наблюдаемых $\hat{A}$ и $\hat{B}$ для одного и того же состояния. Это соответствует тому, что мы рассматриваем ансамбль одинаковых систем в одинаковом начальном состоянии, над каждой из которых выполняется измерение $\hat{A}$ *или* $\hat{B}$ (например, измерение координаты *или* импульса). Т.е. над каждой системой выполняется измерение только одной из двух некоммутирующих величин, и одно измерение «не мешает» (не изменяет состояние) для другого, поскольку другое измерение производится над другой (или заново приготовленной) системой.

7.2.3 Когерентные состояния

Наводящие соображения*

Исследуем, при каких условиях обобщённое соотношение неопределённостей (7.1) и обычное соотношение неопределённостей (7.2) могут обращаться в равен-

ства.

Для того, чтобы обобщённое соотношение неопределённостей (7.1) стало равенством необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие

$$\langle \hat{A}_0 \psi | \hat{A}_0 \psi \rangle \langle \hat{B}_0 \psi | \hat{B}_0 \psi \rangle = \left| \langle \hat{A}_0 \psi | \hat{B}_0 \psi \rangle \right|^2,$$

что равносильно тому, что векторы $\hat{A}_0|\psi\rangle$ и $\hat{B}_0|\psi\rangle$ были пропорциональны друг другу.

Таким образом, необходимое и достаточное условие обращения обобщённого соотношения неопределённостей в равенство

$$(\alpha \hat{A}_0 + \beta \hat{B}_0)|\psi\rangle = 0, \quad \Leftrightarrow \quad (\alpha \hat{A} + \beta \hat{B})|\psi\rangle = Z|\psi\rangle. \quad (7.4)$$

Состояния (7.4) мы будем называть *обобщёнными когерентными состояниями для пары операторов $\hat{A}$, $\hat{B}$* .

Для того, чтобы обычное соотношение неопределённостей обратилось в равенство, в дополнение к (7.4) следует потребовать обнуления среднего от антикоммутиатора:

$$\langle \psi | [\hat{A}_0, \hat{B}_0]_+ | \psi \rangle = 0.$$

$$(\alpha \hat{A}_0 + \beta \hat{B}_0)|\psi\rangle = 0 \Rightarrow (\alpha \hat{A}_0 + \beta \hat{B}_0)^2|\psi\rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi | \alpha^2 \hat{A}_0^2 + \beta^2 \hat{B}_0^2 + \alpha\beta[\hat{A}_0, \hat{B}_0]_+ | \psi \rangle = 0.$$

Получаем, что следующие выражения должны быть равны нулю

$$\alpha^2 \langle \hat{A}_0^2 \rangle + \beta^2 \langle \hat{B}_0^2 \rangle = -\alpha\beta \langle [\hat{A}_0, \hat{B}_0]_+ \rangle = 0.$$

$\langle \hat{A}_0^2 \rangle$ и $\langle \hat{B}_0^2 \rangle$ неотрицательны, если они отличны от нуля, то

$$\frac{\alpha^2}{\beta^2} = -\frac{\langle \hat{B}_0^2 \rangle}{\langle \hat{A}_0^2 \rangle}.$$

Таким образом, отношение коэффициентов оказывается чисто мнимым:

$$\frac{\alpha}{\beta} = i\gamma_0 = \pm i \sqrt{\frac{\langle \hat{B}_0^2 \rangle}{\langle \hat{A}_0^2 \rangle}}, \quad \gamma_0 \in \mathbb{R}.$$

Подставив в уравнение (7.4), получаем (далее мы не будем использовать уравнение (7.5), нам лишь надо было угадать вид уравнения на ψ)

$$(i\gamma_0 \hat{A}_0 + \hat{B}_0)|\psi\rangle = 0, \quad \gamma_0 = \pm \sqrt{\frac{\langle \hat{B}_0^2 \rangle}{\langle \hat{A}_0^2 \rangle}}. \quad (7.5)$$

Однако пока не ясно насколько важна формула для γ_0 .

Уравнение когерентных состояний

Рассмотрим произвольное состояние вида

$$|\chi\rangle = (i\gamma \hat{A}_0 + \hat{B}_0)|\psi\rangle, \quad \gamma \in \mathbb{R}.$$

$$0 \leq \langle \chi | \chi \rangle = \langle \psi | (-i\gamma \hat{A}_0 + \hat{B}_0)(i\gamma \hat{A}_0 + \hat{B}_0) | \psi \rangle = \langle \psi | \gamma^2 \hat{A}_0^2 - i\gamma[\hat{A}_0, \hat{B}_0] + \hat{B}_0^2 | \psi \rangle.$$

Таким образом, для любого вещественного γ

$$\gamma^2 \langle \hat{A}_0^2 \rangle + \gamma \langle \hat{C} \rangle + \langle \hat{B}_0^2 \rangle \geq 0.$$

Квадратный трёхчлен в левой части неравенства имеет следующие корни:

$$\gamma_{1,2} = \frac{-\langle \hat{C} \rangle \pm \sqrt{\langle \hat{C} \rangle^2 - 4\langle \hat{A}_0^2 \rangle \langle \hat{B}_0^2 \rangle}}{2\langle \hat{A}_0^2 \rangle}.$$

Из того, что неравенство выполняется для всех вещественных γ следует, что эти корни либо комплексные, либо совпадающие, условием чего является неположительность подкоренного выражения, т.е. соотношение неопределённости:

$$\langle \hat{C} \rangle^2 - 4\langle \hat{A}_0^2 \rangle \langle \hat{B}_0^2 \rangle \leq 0.$$

Таким образом, мы ещё раз вывели соотношение неопределённости.

Если $(i\gamma\hat{A}_0 + \hat{B}_0)|\psi\rangle = 0$, то это автоматически означает, что $\gamma = \gamma_1 = \gamma_2$,⁴ т.е. соотношение неопределённости обращается в равенство:

$$(i\gamma\hat{A}_0 + \hat{B}_0)|\psi\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (i\gamma\hat{A} + \hat{B})|\psi\rangle = Z|\psi\rangle, \quad Z \in \mathbb{C}, \quad \gamma \in \mathbb{R}. \quad (7.6)$$

Состояния (7.6) мы будем называть *когерентными состояниями для пары операторов $\hat{A}$, $\hat{B}$* . Такие состояния оказываются собственными состояниями неэрмитовых операторов вида $i\gamma\hat{A} + \hat{B}$.

Вопрос о существовании когерентных состояний для той или иной пары операторов мы оставляем открытым. Для пары операторов координата-импульс мы ещё вернёмся к нему, в процессе изучения гармонического осциллятора.

7.2.4 Соотношения неопределённости время-энергия

... время — это то, что измеряется часами.

Г. Бонди «Гипотезы и мифы в физической теории»

С точки зрения преобразования Фурье пара переменных время-частота должна вести себя также, как пара переменных координата-волновое число. Или, если умножить частоту и волновое число на постоянную Планка, то пара время-энергия должна быть аналогична паре координата-импульс.

Эту же аналогию можно ожидать исходя из специальной теории относительности, в которой время — дополнительная координата, энергия — компонента 4-мерного импульса по времени, частота — компонента 4-мерного волнового вектора по времени.

Однако рассматриваемая нами (гамильтонова) формулировка квантовой механики предполагает выделение времени из числа пространственно-временных координат. В рассматриваемом формализме время, в отличие от пространственных координат, — не наблюдаемая (эрмитов оператор), а некоторый *числовой* параметр. Пространственные координаты проквантовались (стали операторами), а время осталось классическим (числовым параметром).

Описание времени как числового параметра не позволяет описать процесс его измерения. «Время — это то, что измеряется часами» (см. эпиграф к данному

⁴Мы избавились от отдельного условия на γ_0 .

разделу). То есть измерение времени — это измерение состояния часов, а соответствующая наблюдаемая («физическое время»), например, — *координата стрелки часов*.

Оператор «физического времени» $\hat{\tau}$ должен удовлетворять условию⁵

$$\frac{d\hat{\tau}}{dt} = 1 \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{\tau}, \hat{H}] = i\hbar. \quad (7.7)$$

Соотношение (7.7) можно заменить более слабым соотношением, представляющим его ограничение на интересующее нас подпространство состояний:

$$\frac{d\langle\hat{\tau}\rangle}{dt} = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \langle[\hat{\tau}, \hat{H}]\rangle = i\hbar. \quad (7.8)$$

Соотношение неопределённостей для пары операторов $\hat{\tau}$ - $\hat{H}$ записывается стандартным образом (7.2):

$$\langle(\delta\tau)^2\rangle\langle(\delta E)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (7.9)$$

Как и другие соотношения неопределённости, соотношение время-энергия может интерпретироваться по-разному.

Так что же мы посчитали? (ф)

Введя оператор «физического времени» мы тем самым предположили, что рассматриваемая квантовая система содержит в своём составе часы.

Можно было бы обсудить допустимость включения микро- и макро-часов в состав квантовой системы с точки зрения различных интерпретаций квантовой механики (такое обсуждение было бы практически тождественно обсуждению возможности включения в квантовую систему наблюдателя), однако такие рассуждения лишь уводят в сторону от главного вопроса: «Неопределённость какой именно энергии мы обсуждаем?»

Если часы входят в квантовую систему в качестве отдельной подсистемы, слабо взаимодействующей с остальными степенями свободы, то мы можем выделить из суммарного гамильтониана $\hat{H}$ гамильтониан часов $\hat{H}_\text{ч}$, гамильтониан оставшейся части $\hat{H}_0$ и их взаимодействие $\hat{V}$:

$$\hat{H} = \hat{H}_\text{ч} + \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad [\hat{\tau}, \hat{H}_\text{ч}] = i\hbar, \quad [\hat{\tau}, \hat{H}_0] = 0, \quad [\hat{\tau}, \hat{V}] = 0,$$

⁵ Данное замечание предназначено исключительно тем читателям, которые знакомы с ковариантными и контравариантными векторами применительно к специальной теории относительности. Векторы и ковекторы в данном случае следует понимать по отношению к линейным преобразованиям координат.

Если «сократить» уравнение Шрёдингера $\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$ на волновую функцию, то мы получим для гамильтониана выражение, аналогичное выражению для импульса с противоположным знаком: $\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$. Формальное вычисление коммутатора $[t, i\hbar\frac{\partial}{\partial t}] = -i\hbar$ даёт противоположный (по сравнению с коммутатором координата-импульс) знак. Как это совместить с $[\hat{\tau}, \hat{H}] = +i\hbar$? Дело в том, что канонические коммутационные соотношения пишутся для обобщённых координат и импульсов. Обобщённые импульсы в теоретической механике $p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha}$ следует считать компонентами *ковариантного* вектора. Однако 4-вектор энергии-импульса с компонентами $p^i = (E, p^x, p^y, p^z)$ — это контравариантный вектор. Таким образом, соответствие коммутатора время-энергия коммутатору координата-импульс должно иметь место только после того, как у всех компонентов импульса (включая энергию) будут с помощью метрики Минковского опущены индексы. $p_i = (E, -p^x, -p^y, -p^z) = i\hbar\nabla_i$. Действительно, компоненты оператора набла образуют ковариантный вектор.

Таким образом, неопределённость энергии системы оказывается на самом деле неопределённостью энергии часов.

Таким образом, соотношение неопределённостей время-энергия (7.9) применимо не просто к системе, *включающей часы*, а к системе, которая *сама является часами*.

Если система не является часами (Ф)

Если квантовая система не является часами, то вместо «часовой стрелки» можно использовать любые зависящие от времени процессы. На малых временах любая несохраняющаяся наблюдаемая может выступать в роли «физического времени». Для не зависящей явно от времени наблюдаемой $\hat{A}$ имеем

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{H}], \quad \langle(\delta A)^2\rangle\langle(\delta E)^2\rangle \geq \frac{1}{4}\langle i[\hat{A}, \hat{H}]\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle^2. \quad (7.10)$$

Если теперь учесть скорость хода «часов» $\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \rangle$, то получаем

$$\underbrace{\langle(\delta t)^2\rangle\langle(\delta E)^2\rangle}_{\frac{\langle(\delta A)^2\rangle}{\left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle^2}} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (7.11)$$

Полученное соотношение может интерпретировано, как связь характерного времени эволюции системы с неопределённостью её энергии.

Время жизни и ширина уровня (Ф)

Важный случай применения соотношения неопределённостей время-энергия (7.9) — связь времени жизни и ширины энергетического уровня для квазистационарного состояния.

Квазистационарное состояние на малых временах ведёт себя как стационарное состояние, но его амплитуда экспоненциально уменьшается со временем (см. 13.5.6 «Квазистационарные состояния в квазиклассике»). Примеры квазистационарных состояний: ядро радиоактивного атома (со временем распадается), атом в возбуждённом состоянии (со временем излучает фотон и переходит в состояние с меньшей энергией) и т.п.

Закон радиоактивного распада имеет вид

$$\langle \hat{n} \rangle = n_0 e^{-\frac{t}{\tau_0}}. \quad (7.12)$$

где $\hat{n}$ — оператор числа нераспавшихся квазистационарных систем, а τ_0 — время жизни. Начальное число нераспавшихся систем $n_0 = 1$.

Среднее время жизни квазистационарного состояния и средний квадрат времени жизни вычисляются исходя из (7.12)

$$\langle t_0 \rangle = \frac{1}{\tau_0} \int_0^\infty t e^{-\frac{t}{\tau_0}} dt = \tau_0, \quad \langle t_0^2 \rangle = \frac{1}{\tau_0} \int_0^\infty t^2 e^{-\frac{t}{\tau_0}} dt = 2\tau_0^2.$$

Таким образом

$$\langle \delta t_0^2 \rangle = \langle t_0^2 \rangle - \langle t_0 \rangle^2 = \tau_0^2 \quad \Rightarrow \quad \langle \delta E^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4\tau_0^2} = \left(\frac{\hbar}{2\tau_0} \right)^2.$$

Минимальную неопределённость энергии $\frac{\hbar}{2\tau_0}$ в этом случае следует трактовать как ширину уровня энергии

$$\delta E_0 = \frac{\hbar}{2\tau_0}. \quad (7.13)$$

Действительно, колебание с экспоненциально затухающей амплитудой не может иметь строго определённую частоту.

Квазистационарное состояние — это очень интересный пример, т.к. в нём система является часами: время может измеряться по тому, какая доля ансамбля систем в квазистационарных состояниях распалась.

Простейшие (и грубейшие) часы такого типа определяют распалось ли единственная система, или ещё нет. Конечно, такие «часы» дают нам лишь два возможных «положения стрелки». Естественно откалибровать эти часы следующим образом:

$$\langle \hat{n} \rangle = 1, \quad \tau = 0;$$

$$\langle \hat{n} \rangle = 0, \quad \tau = \tau_0.$$

Тогда среднее время показываемое часами

$$\langle \hat{\tau} \rangle = \tau_0(1 - e^{-\frac{t}{\tau_0}}).$$

Мы видим, что $\frac{d\langle \hat{\tau} \rangle}{dt} = e^{-\frac{t}{\tau_0}}$, т.е. часы удовлетворяют условию (7.8) только в точке 0, с характерным временем ухода τ_0 .

Мы можем построить более точные часы из n_0 систем в квазистационарных состояниях. Поскольку спектр оператора числа систем $\hat{n}$ всё равно будет ограничен (собственные числа от 0 до n_0 с шагом 1) такие часы по-прежнему смогут измерять только ограниченные интервалы времени, но длина шкалы будет расти как $\ln n_0$.

Длительность измерения и точность определения энергии (ф)

Наиболее употребляемая интерпретация соотношения неопределённостей время-энергия — связь длительности измерения энергии и его точности.

Приведённые выше рассуждения рассматривали идеальное *мгновенное* квантово-механическое измерение. Моделирование реального процесса квантового наблюдения будет также обсуждаться ниже в разделе 8.1 «Моделирование измерительного прибора*».

(фф*) Пусть измеряемая квантовая система («*микросистема*») описывается гамильтонианом $\hat{H}_0$, а измерение состоит во взаимодействии системы с часами, описываемыми гамильтонианом $\hat{H}_\text{ч}$. До начала измерения обе подсистемы (микросистема и часы) имеют определённую энергию и не взаимодействуют. В некоторый момент времени t_0 часы включают взаимодействие $\hat{V}_0$ с микросистемой. Соответствующая добавка к гамильтониану

$$\hat{V} = \hat{V}_0 \delta(\hat{\tau} - t_0).$$

Неопределённость времени взаимодействия составляет δt . После окончания измерения неопределённость энергии часов — δE .

Поскольку начальные энергии часов и микросистемы были неопределены, неопределённость энергии микросистемы также составляет δE . В качестве длительности взаимодействия часов и микросистемы следует взять δt .

Если начальные неопределённости энергий микросистемы и часов отличны от нуля, но конечная неопределённость энергии возрастет. Также за счёт неидеальности часов может возрасти неопределённость длительности взаимодействия.

Таким образом, мы показали, что соотношение неопределённостей время-энергия (7.9) может интерпретироваться как связь длительности и точности для измерения энергии, при условии, что измерительный прибор (мы включили его в часы) вместе с микросистемой может быть описан квантовой механикой.

В данном разделе мы описывали незамкнутую квантовую систему, путём расширения её до замкнутой. При этом следует отметить, что описание незамкнутых квантовых систем — сложная проблема, которую многие физики вообще выводят за пределы стандартной квантовой механики (см. 9.3.2 «Новая копенгагенская» интерпретация (ф)).

7.3 Измерение без взаимодействия*

Познание начинается с удивления.

Аристотель W

Измерение в квантовой механике происходит не только тогда, когда датчик щёлкнул, обнаружив частицу, но и тогда, когда датчик не щёлкнул (отрицательный результат измерения). Частица при этом беспрепятственно пролетела мимо датчика, но измерение всё равно произошло и волновая функция частицы изменилась. Это уже отмечалось в разделе 3.1.4 (см. рис.3.4).

Таким образом, мы получаем, что измерение может менять состояние (состояние — другое имя волновой функции) частицы даже если частица не взаимодействовала с прибором. Здесь важно, что хотя частица не провзаимодействовала с прибором, она потенциально могла это сделать. То есть не произошедшие, но потенциально возможные события оказывают влияние на развитие системы.⁶

К числу таких явлений относится дифракция в оптике, если учитывать, что электромагнитная волна переносится дискретными фотонами. При дифракции на каком-либо препятствии дифракционная картина образуется теми фотонами, которые пролетели мимо препятствия и никак с ним не взаимодействовали. То, что при

⁶Если когда-нибудь будет создана такая наука как *квантовая история*, то расхожая фраза «История не имеет сослагательного наклонения» должна оказаться грубо неверной, потому что в квантовой теории не произошедшие события («в сослагательном наклонении») обнуляют в волновой функции кусок, отвечающий за возможность такого события. Можно привести такую грубую гуманитарную аналогию: если вопрос был поставлен на голосование (измерение) перед людьми не имеющими чёткой позиции (чьё решение вероятно) и предложение провалилось, то сразу обнулилась вероятность проваленного решения, при немедленном повторном голосовании. Другими словами, если человека не имеющего чёткой точки зрения по какому-либо вопросу (находящегося в суперпозиции различных точек зрения) заставить высказаться (провести измерение его точки зрения), то сразу после измерения у него будет точка зрения, соответствующая тому, что он высказал, однако со временем эта точка зрения будет эволюционировать. В качестве развития аналогии можно попытаться найти также гуманитарный аналог фазы, например воздействия, действующие на мнение человека одинаково по отдельности, совместно могут как усиливать друг друга так и взаимно гасить, в зависимости от разности фаз. (Метод гашения идей путём вложения их в гнилые уста специально для этой цели выращенных деятелей достаточно распространён в современной политике.) Данную аналогию, как почти все аналогии, не следует воспринимать *слишком* серьёзно.

этом вместо обычной тени образуется дифракционная картина (в частности внесение препятствия усиливает яркость некоторых областей, например пятна Пуассона), означает, что фотоны не поглощённые препятствием ведут себя иначе чем в его отсутствие.

Многие эксперименты, демонстрирующие эффекты измерения без взаимодействия можно ставить со светом. При этом отличие от обычных опытов на дифракцию и интерференцию будет состоять в следующем:

- вместо обычных источников света используются источники, испускающие отдельные фотоны;
- интерпретация не в терминах амплитуд полей и потоков энергии, а в терминах амплитуд вероятности и потоков частиц.

Следует отметить, что все обычные источники света достаточно слабы, чтобы можно было пренебречь нелинейными эффектами, т.е. чтобы фотоны взаимодействовали с установкой по одному. Поэтому обычные эксперименты по волновой оптике при взгляде с квантовой точки зрения могут выглядеть весьма загадочно и поучительно. Однако ослабление источника света может быть полезно, чтобы наглядно прояснить одночастичную природу оптических эффектов.⁷

Последующие разделы 7.3.1 «Эксперимент Пенроуза с бомбами (Φ^*)», 7.4 «Квантовый эффект Зенона» описывают невозможные с классической точки зрения эффекты измерения без взаимодействия, которые могут быть реализованы на эксперименте как оптические эффекты.

7.3.1 Эксперимент Пенроуза с бомбами (Φ^*)

Под влиянием соотношения неопределённости многие считают, что квантовая механика предоставляет меньше возможностей для измерений, чем классическая. Однако на самом деле ситуация интереснее: квантовая механика запрещает некоторые измерения, которые позволяет классическая физика, но одновременно позволяет измерения невозможные в классике.

Интересный эксперимент, демонстрирующий осуществимость классически невозможных измерений был предложен Роджером Пенроузом.

Интерферометр Маха-Цандера на рис.7.2, состоящий из двух полупрозрачных зеркал (вероятность отражения — $\frac{1}{2}$) и двух обычных зеркал, при правильной юстировке ведёт себя следующим образом:⁸

- 1-е полупрозрачное зеркало расщепляет входящий в него фотон ψ_0 в суперпозицию двух волновых пакетов $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + i\psi_2)$, каждый из которых проходит по своей траектории,

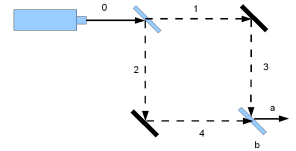


Рис. 7.2: Интерферометр Маха-Цандера выпускает фотоны только по одному направлению из двух возможных.

⁷Само по себе ослабление источника до уровня, когда в импульсе окажется менее одного фотона недостаточно для создания однофотонного источника. Простое ослабление светового импульса светофильтрами даст нам состояние, точное число фотонов в котором не определено, причём не определено в квантовом смысле, а не в классическом: импульс описывается как суперпозиция состояний с разным числом фотонов.

⁸Каждое отражение доставляет фазовый множитель i . Фазовые множители, связанные с распространением волнового пакета внутри интерферометра полагаем равными (результат юстировки), в результате чего их можно отбросить.

- два обычных зеркала направляют волновые пакеты на 2-е полупрозрачное зеркало, преобразуя их в состояние $\frac{1}{\sqrt{2}}(i\psi_3 - \psi_4)$,
- 2-е полупрозрачное зеркало собирает из двух волновых пакетов снова один $-\psi_a$, который выходит вправо.

В результате вошедший в интерферометр фотон всегда выходит вправо в состояние ψ_a и никогда вниз в состояние ψ_b .

При этом важно, что фотон внутри интерферометра находится в суперпозиции двух состояний и мы в принципе не можем определить по какому плечу он прошёл. Внесение в систему измерительного прибора, способного определить куда пошёл фотон разрушает интерференцию и фотон с равной вероятностью попадает как в состояние ψ_a , так и ψ_b . К такому эффекту приводит, например, перекрытие одного из плеч, однако ниже мы рассмотрим более изощрённую схему.

Представим себе набор бомб с очень чувствительным взрывателем, который способен сработать от толчка одного фотона. Однако некоторые бомбы неисправны и энергии фотона недостаточно для возбуждения их взрывателя.

На рис.7.3 одно из непрозрачных зеркал закреплено на носу неисправной бомбы. В этом случае интерферометр работает по-прежнему: сколько бы фотонов в него не входило все выходят в состояние ψ_a .

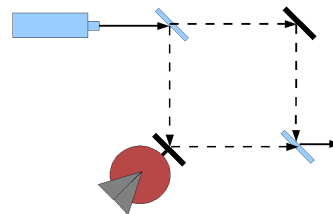


Рис. 7.3: Интерферометр Маха-Цандера с неисправной бомбой работает по-прежнему.

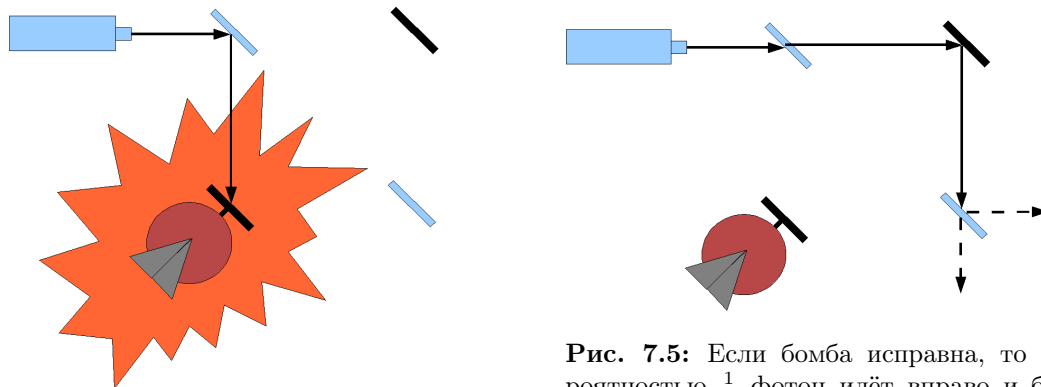


Рис. 7.4: Если бомба исправна, то с вероятностью $\frac{1}{2}$ фотон идёт вниз и бомба взрывается.

Рис. 7.5: Если бомба исправна, то с вероятностью $\frac{1}{2}$ фотон идёт вправо и бомба не взрывается. Тем не менее разрушается интерференция и фотон может выйти как вправо, так и вниз.

Исправную бомбу можно рассматривать как измерительный прибор, детектирующий наличие фотона в нижнем плече интерферометра (плечо 2-4).

Если бомба детектирует фотон, то бомба взрывается, и волновой пакет из верхнего плеча (плечо 1-3) исчезает. Это изображено на рис.7.4.

Если бомба не детектирует фотон, то имеет место измерение без взаимодействия. В результате исчезает волновой пакет в нижнем плече интерферометра, интерференция разрушается и фотон может выйти из интерферометра как вправо, так и вниз.

Таким образом, если мы запускаем один фотон в интерферометр с исправной бомбой, то возможны следующие исходы:

- с вероятностью $\frac{1}{2}$ бомба взрывается и мы узнаём, что она была исправна,
- с вероятностью $\frac{1}{4}$ бомба не взрывается фотон и выходит вправо (в состояние ψ_a) и мы не знаем исправна ли бомба.
- с вероятностью $\frac{1}{4}$ бомба не взрывается фотон и выходит вниз (в состояние ψ_b) и мы узнаём, что бомба исправна, не взорвав её при этом.

Таким образом, если нам дали большое количество бомб, срабатывающих от одного фотона, то в классическом случае мы не можем отобрать некоторое количество заведомо исправных бомб не взорвав их при этом. В квантовом случае описываемая схема позволяет, тратя по одному фотону на бомбу, взорвать только половину исправных бомб, и совершить чудо: выделить четверть исправных бомб не взорвав их при этом.

Испытывая бомбы по несколько раз можно приблизить долю отобранных (выявленных без взрыва исправных) бомб к $\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{4}\right)^n = \frac{1}{3}$, а долю взорванных — к $\frac{2}{3}$. Меняя коэффициенты отражения полупрозрачных зеркал можно приблизить долю отобранных бомб к $\frac{1}{2}$.

Другие способы измерения без взаимодействия позволяют:

- сделать долю взорванных бомб сколь угодно малой,
- сделать долю невыявленных исправных бомб сколь угодно малой,
- сделать долю исправных бомб, выявленных без взрыва, сколь угодно близкой к 1.

7.4 Квантовый эффект Зенона (Парадокс незакипающего чайника)**

ДВИЖЕНИЕ.

Движенья нет, сказал мудрец брадатый.
Другой смолчал и стал пред ним ходить.
Сильнее бы не мог он возразить;
Хвалили все ответ замысловатый.
Но, господа, забавный случай сей
Другой пример на память мне приводит:
Ведь каждый день пред нами солнце ходит,
Однако ж прав упрямый Галилей.

А.С.Пушкин



Рис. 7.6: Портрет Зенона с сайта «Элементы» (http://elementy.ru/trefil/zeno_paradox) и бюст какого-то Зенона. Автору не вполне ясно, почему авторы учебников по философии уверены, что это «тот самый Зенон».

7.4.1 При чём здесь Зенон?

Квантовое измерение, в отличие от классического, всегда влияет на состояние измеряемой системы. Одним из наиболее ярких проявлений этого влияния является квантовый эффект Зенона, в русской литературе также именуемый *парадоксом*

незакипающего чайника. При этом особенно интересно то, что измерение может осуществляться без взаимодействия.

«Мудрец брадатый» из пушкинского стихотворения — Зенон Элейский⁹ известен поколениям школьников как один из самых больших чудаков древней Греции, утверждавший что движение невозможно и придумывавший в доказательство этой глупости различные смешные парадоксы (*апории Зенона*). Над этими парадоксами бывает очень весело посмеяться на лекции глядя на них с недоступных старику-Зенону высот математического анализа и классической механики. Однако в квантовой механике некоторые рассуждения Зенона внезапно приобретают физический смысл, более того, соответствующие физические эффекты наблюдаются экспериментально.

В апории «стрела» невозможность движения доказывается примерно следующим образом: *летящая стрела в каждый момент времени где-то находится/покоится, но стрела не может одновременно лететь и покоиться, а значит движение невозможно*. Невозможности движения это рассуждение, конечно, не доказывает, но оно доказывает невозможность движения, когда это движение каждый момент времени точно измеряют: *если очень точно измерить положение летящей частицы, то её волновая функция схлопнется в очень узкий волновой пакет, для которого неопределённость координаты мала, а неопределённость импульса очень велика, после этого летела частица, или покоилась будет уже не важно*. Более того, *если повторять измерение очень часто*, так, чтобы волновой пакет не успел расплыться и сдвинуться, то измерение скомпенсирует эволюцию волновой функции и частица каждый раз будет обнаруживаться в одном и том же месте (т.е. *перестанет двигаться*).

Таким образом квантовый эффект Зенона состоит в замораживании (или замедлении) эволюции системы, подвергающейся частым и точным измерениям.

Впервые квантовый эффект Зенона был предсказан в 1958 году советским физиком Леонидом Александровичем Халфиным.¹⁰ Имя Зенона эффекту дали Байдянат Мизра и Джордж Сударшан в 1978 году. Эффект для вероятности переходов между атомными уровнями был экспериментально подтверждён в 1989 году¹¹.

Рассмотрим квантовый эффект Зенона на простейшем примере. Пусть эволюция квантовой системы описывается как вращение вектора состояния в заданной плоскости с постоянной угловой скоростью $\omega = \frac{\delta E}{\hbar}$. Это соответствует тому, что система находится в суперпозиции двух стационарных состояний с различной на δE энергией, причём амплитуды обоих стационарных состояний одинаковы по модулю. (Плоскость вращения будет, разумеется, комплексной, но подбором фазовых множителей и нулевого уровня энергии её можно сделать обычной вещественной евклидовой плоскостью.)

⁹Считается, что Зенон из Элеи (*Zήνων*) жил в период ок. 490 до н. э. — ок. 430 до н. э. Его работы известны только в пересказе: в изложении Аристотеля и по комментариям к нему Симпликия. (Кстати, «Симпликий» = «Простак» — имя весьма подозрительное.) По всей видимости мы уже никогда не сможем узнать, что в точности писал сам Зенон, и существовал ли он вообще (или, например, был выдуман Аристотелем). Однако достаточно ли принципиальна эта невозможность для того, чтобы надо было принимать во внимание интерференцию различных вариантов прошлого, содержащих (или не содержащих) различных Зенонов Элейских (см. рис. 7.6) не ясно.

¹⁰Халфин Л.А.// ДАН СССР 1957. т.115. С.277; ЖЭТФ. 1958. т.33. С. 1371; Квантовая теория распада физических систем: Автореферат диссертации ... канд. физ.-мат. наук.— ФИАН СССР, 1960.

¹¹Science. November 1989. V. 246. P. 888

Пусть плоскость вращения натянута на ортонормированные состояния Ψ и Φ , тогда, если в нулевой момент времени волновая функция равнялась Ψ , в момент времени δt имеем

$$\psi(\delta t) = \Psi \cos(\omega \delta t) + \Phi \sin(\omega \delta t).$$

Если теперь провести измерение отвечающее на вопрос «Находится ли система в состоянии Ψ ?» то вероятность ответа «да» и скачка в состояние Ψ составит $\cos^2(\omega \delta t)$, а вероятность ответа «нет» и скачка в состояние Φ составит $\sin^2(\omega \delta t)$. Для $\omega \delta t \ll 1$ имеем

$$\begin{aligned} p_{\text{да}} &= \cos^2(\omega \delta t) \approx \left(1 - \frac{(\omega \delta t)^2}{2}\right)^2 \approx 1 - (\omega \delta t)^2, \\ p_{\text{нет}} &= \sin^2(\omega \delta t) \approx (\omega \delta t)^2. \end{aligned}$$

Важно, что $p_{\text{нет}}$ оказывается квадратично по времени. Из этого следует, что если мы на конечном времени t проделаем n измерений интервал между которыми $\delta t = \frac{t}{n}$, то суммарная вероятность получения ответа «нет» ведёт себя как

$$P_{\text{нет}} \approx n \cdot p_{\text{нет}} \approx n \cdot \left(\omega \frac{t}{n}\right)^2 = \frac{(\omega t)^2}{n} \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Таким образом, чем чаще мы подвергаем систему измерению «Не ушла ли система из исходного состояния Ψ ?», тем ближе к единице вероятность того, что система осталась в исходном состоянии. Достаточно частыми измерениями мы можем удержать систему в исходном состоянии сколь угодно долго со сколь угодно малой вероятностью случайного скачка в другое состояние,¹² что и даёт нам *эффект Зенона*.

Эффект Зенона может осуществляться путём измерения без взаимодействия, если вместо наличия системы в состоянии Ψ проверять наличие системы в состоянии Φ . Система в состоянии Φ с вероятностью близкой к 1 не будет обнаружена, но это несостоявшееся обнаружение всё равно повлияет на состояние системы.

Рассмотрим оптическую реализацию эффекта Зенона. Некоторые среды, состоящие из несимметричных молекул вращают плоскость поляризации проходящего через них света, т.е. если по такой среде распространяется линейно поляризованный свет, то направление поляризации поворачивается на угол пропорциональный пройденному пути.¹³ Таким образом для линейно поляризованного фотона, распространяющегося по среде плоскость поляризации поворачивается как на рисунке 7.7 (только теперь оси координат можно обозначить просто как x и y).

Помещённый в среду поляризатор производит измерение поляризации каждого фотона и пропускает только те фотоны, которые поляризованы вдоль оси поляризатора. Для прошедших через поляризатор фотонов измерение можно считать прошедшим без взаимодействия (с фотоном «ничего не случилось»).

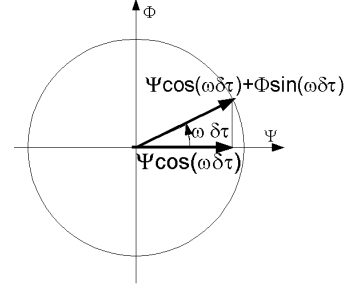


Рис. 7.7: Поворот состояния в плоскости (Ψ, Φ) за малое время δt на угол $\omega \delta t$ и проекция на ось Ψ при «удачном» измерении.

¹²Для всякого времени $t > 0$ и вероятности $p_0 > 0$ найдётся такое число измерений n , что за время t система останется в состоянии Ψ с вероятностью большей чем $1 - p_0$.

¹³Этот эффект можно трактовать как разную скорость распространения волн с круговой поляризацией по и против часовой стрелки.

Оптический эффект Зенона состоит в том, что если мы ставим *одинаково ориентированные* поляризаторы внутри среды всё чаще и чаще, то фотон с вероятностью сколь угодно близкой к единице пройдет через сколь угодно толстую среду не изменив направления поляризации.¹⁴

Следует заметить, что с помощью эффекта Зенона можно не только «замораживать» эволюцию системы, но и вести эту эволюцию в произвольным образом (если суметь придумать подходящие процедуры измерений). Мы можем слегка модифицировать эксперимент и измерять «находится ли система в состоянии $\Phi(t)$?» Тогда каждый раз измерение будет проецировать состояние системы на новое направление $\Phi(t)$ (состояние $\Phi(t)$ нормировано на единицу и дифференцируемо по времени). Если измерения происходят достаточно часто, а $\Phi(t)$ меняется со временем не слишком быстро, то с вероятностью сколь угодно близкой к единице после очередного измерения система будет оказываться как раз в состоянии $\Phi(t)$. Таким образом мы можем задать руками состояние как функцию от времени и «железной рукой» заставить систему следовать именно этому пути (с точностью до фазовых множителей). Такую разновидность эффекта Зенона принято называть *эффектом Антизенона*.

Оптический эффект Антизенона может быть продемонстрирован ещё проще, чем эффект Зенона, без помощи вращающей поляризацию среды. Линейно поляризованный свет в пустоте (или в воздухе) сохраняет направление поляризации. Однако, если мы поставим на его пути стопку поляризаторов, в которой ось каждого последующего повернута на малый угол $\delta\varphi$, то для идеальных поляризаторов с вероятностью сколь угодно близкой к единице фотон пройдет без поглощения всю стопку, послушно поворачивая направление поляризации вдоль осей поляризаторов.

7.4.2 Теорема Халфина

Рассмотрение квантового эффекта Зенона в общем случае полностью аналогично рассмотренному выше двумерному случаю, т.к. квантовая эволюция в течение малого времени происходит в двумерном подпространстве, натянутом на векторы $|\psi\rangle$ и $|d\psi\rangle = \frac{\hat{H}}{i\hbar} dt |\psi\rangle$.

Пусть в начальный момент времени система находится в нормированном состоянии $|\psi_0\rangle$ ($\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1$), спустя время dt система переходит в состояние

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + |d\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{\hat{H}}{i\hbar} dt |\psi_0\rangle.$$

В силу эрмитовости гамильтониана $\hat{H}$, состояние $|\psi\rangle$ является нормированным с точностью до второго порядка по dt :

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi_0|(1 - \frac{\hat{H}}{i\hbar} dt)(1 + \frac{\hat{H}}{i\hbar} dt)|\psi_0\rangle = 1 + \frac{dt^2}{\hbar^2} \langle\hat{H}^2\rangle.$$

Пусть в момент времени dt происходит измерение, призванное определить, ушла ли система из исходного состояния $|\psi_0\rangle$. Вероятность того, что система ушла из состояния $|\psi_0\rangle$ равна вероятности того, что система будет обнаружена в состоянии $|d\psi\rangle$, полученном из $|d\psi\rangle$ проекцией на подпространство ортогональное к $|\psi_0\rangle$

$$|d\psi_\perp\rangle = (\hat{1} - |\psi_0\rangle\langle\psi_0|)|d\psi\rangle = \frac{dt}{i\hbar}(\hat{H} - \langle\hat{H}\rangle)|\psi_0\rangle.$$

¹⁴Здесь, разумеется, мы пренебрегаем возможным поглощением и отражением на поляризаторов фотонов с «правильной» поляризацией. Также мы пренебрегаем толщиной поляризаторов.

Состояние $|d\psi_\perp\rangle$ нормировано не на единицу, а на вероятность, это следует из того, что оно получается проекцией на подпространство ортогональное $|\psi_0\rangle$ нормированного (в линейном по dt порядке) на 1 состояния $|\psi\rangle$. Таким образом, вероятность p_- того, что система ушла из состояния $|\psi_0\rangle$ задаётся как

$$p_-(dt) = \langle d\psi_\perp | d\psi_\perp \rangle = \langle \psi | d\psi_\perp \rangle = \frac{dt^2}{\hbar^2} (\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2).$$

Если задать $dt = \frac{t_0}{N}$, то вероятность того, что система уйдёт из состояния $|\psi_0\rangle$ за время t_0 , если за это время было сделано N измерений с интервалом dt можно сделать сколь угодно малой

$$P_-(t_0) = N \cdot \frac{dt^2}{\hbar^2} (\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2) = \frac{t_0^2}{N\hbar^2} (\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2) \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty.$$

Таким образом, мы доказали наличие квантового эффекта Зенона для измерений проверяющих уход системы из одномерного подпространства при выполнении достаточного условия конечности $\langle \hat{H} \rangle$ и $\langle \hat{H}^2 \rangle$.

7.5 Квантовая (не)локальность

Квантовая механика *в некотором смысле нелокальна*, поскольку она допускает мгновенное воздействие на состояние системы на расстоянии. Однако это воздействие устроено так, что обнаружить его можно не раньше, чем удастся переговорить с его организатором. Таким образом, квантовая механика *в некотором смысле локальна*. И эта локальность позволяет состыковать квантовую механику со специальной теорией относительности, в которой постулируется максимальная скорость распространения взаимодействия.

7.5.1 Запутанные состояния (Φ^*)

Пусть (сложная) квантовая система состоит из двух подсистем. Тогда волновая функция системы ψ может быть записана как функция от двух наборов аргументов: наблюдаемые первой подсистемы x_1 и наблюдаемые второй подсистемы x_2

$$\psi(x_1, x_2), \quad \psi \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2.$$

Для смешанного состояния аналогично записывается матрица плотности:

$$\rho(x_1, x_2; x'_1, x'_2), \quad \hat{\rho} \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_1^* \otimes \mathcal{H}_2^*.$$

Запутанными состояниями сложной квантовой системы называются состояния, которые не могут быть представлены как произведение состояний подсистем. Т.е. для чистого состояния

$$\psi(x_1, x_2) \neq \psi_1(x_1) \cdot \psi_2(x_2),$$

а для смешанного состояния

$$\rho(x_1, x_2; x'_1, x'_2) \neq \rho_1(x_1; x'_1) \cdot \rho_2(x_2; x'_2).$$

В русской литературе существует разнобой в терминах, обозначающих запутанные состояния. Такие состояния могут называть: *запутанные состояния*, *перепутанные состояния*, *зацепленные состояния*. В английском языке используется один термин *entangled states*.

Также незапутанное состояние может называться *факторизуемым состоянием* (т.е. разложимым на множители), а запутанное — *нефакторизуемым состоянием*.

В данной книге в эти выражения используются в следующем смысле:

- *запутанное состояние* — состояние сложной системы, которое не представимо как произведение состояний при данном разбиении на подсистемы;
- *нефакторизуемое состояние* — состояние сложной системы, которое не представимо как произведение состояний при произвольном разбиении на подсистемы;
- *зацепленное состояние* — состояние подсистемы, входящей в сложную систему в запутанном (при выделении данной подсистемы) состоянии.

Является ли данное состояние запутанным зависит от того, как сложная система разбита на подсистемы.

Для системы в запутанном состоянии состояния подсистем *зацеплены* (*квантово коррелированы*) друг с другом. В этом случае мы не можем определить состояния подсистем через волновые функции или матрицы плотности так, чтобы по состояниям подсистем можно было восстановить состояние сложной системы (см. 4.8.2 «Матрица плотности для подсистемы*»).

Если в запутанном состоянии зацеплены состояния подсистем, которые удалены друг от друга в пространстве, то такие запутанные состояния называются *нелокальными состояниями*.

7.5.2 Зацепленные состояния при селективном измерении (Φ^*)

Если измерению подвергается подсистема, входящая в некоторую сложную систему, то оператор $\hat{A}_1 \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1^*$, действующий на состояние подсистемы, следует заменить на оператор $\hat{A}_{1+2} = \hat{A}_1 \otimes \hat{1}_2$, где $\hat{1}_2 \in \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_2^*$ — единичный оператор, действующий на остальную часть сложной системы. Аналогичный вид имеют и проекторы переводящие состояние до измерения, в состояние после измерения при определённом исходе:

$$\hat{P}_{1+2} = \hat{P}_1 \otimes \hat{1}_2.$$

Если состояния подсистем незацеплены, то состояние системы представимо в виде произведения состояний подсистем $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle$, и после измерения состояние второй подсистемы не изменяется:

$$(\hat{P}_1 \otimes \hat{1}_2)|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle = (\hat{P}_1|\psi_1\rangle)(\hat{1}_2|\psi_2\rangle) = (\hat{P}_1|\psi_1\rangle)|\psi_2\rangle.$$

В этом случае, если производить измерения над второй подсистемой, то вероятности исходов не будут зависеть от того, что было ранее сделано с первой подсистемой.

Однако, если состояния подсистем зацеплены, то результат измерения над второй подсистемой может зависеть от того, что ранее происходило с первой. Пусть, например, исходное состояние имело вид $|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + |\psi'_1\rangle|\psi'_2\rangle$, тогда

$$\begin{aligned} (\hat{P}_1 \otimes \hat{1}_2)(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + |\psi'_1\rangle|\psi'_2\rangle) &= (\hat{P}_1 \otimes \hat{1}_2)|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + (\hat{P}_1 \otimes \hat{1}_2)|\psi'_1\rangle|\psi'_2\rangle = \\ &= (\hat{P}_1|\psi_1\rangle)|\psi_2\rangle + (\hat{P}_1|\psi'_1\rangle)|\psi'_2\rangle. \end{aligned}$$

Если векторы $\hat{P}_1|\psi_1\rangle$ и $\hat{P}_1|\psi'_1\rangle$ параллельны (например, если проектор $\hat{P}_1$ является проектором на одномерное пространство $\hat{P}_1 = |\phi_1\rangle\langle\phi_1|$), то

$$\hat{P}_1|\psi_1\rangle = c|\phi_1\rangle, \quad c = \langle\phi_1|\psi_1\rangle, \quad \hat{P}_1|\psi'_1\rangle = c'|\phi_1\rangle, \quad c' = \langle\phi_1|\psi'_1\rangle.$$

В этом случае после измерения состояние «распутывается»:

$$(\hat{P}_1 \otimes \hat{I}_2)(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + |\psi'_1\rangle|\psi'_2\rangle) = |\phi_1\rangle(c|\psi_2\rangle + c'|\psi'_2\rangle).$$

Амплитуды c и c' , с которыми состояния $|\psi_2\rangle$ и $|\psi'_2\rangle$ входят в суперпозицию, зависят от того, в каком состоянии $|\phi_1\rangle$ оказалась после измерения подсистема-1. Состояние $|\phi_1\rangle$ является собственным состоянием оператора наблюдаемой, которая измерялась для подсистемы-1. И хотя наблюдатель-1 не может влиять на квантовые вероятности исходов данного конкретного измерения, он может выбрать какую именно наблюдаемую мерить. Результат его выбора после измерения *мгновенно* отразится на состоянии подсистемы-2. В этом состоит *нелокальность* квантовой механики.



Рис. 7.8: Кадры из фильма «Высокий блондин в чёрном ботинке» (второй кадр дан в зеркальном отражении, для соответствия мысленному эксперименту).

Если бы наблюдатель-1 всё время измерял один и тот же оператор, то квантовая нелокальность была бы полностью эквивалентна классической «нелокальности» возникающей тогда, когда мы обнаружив, что надели на правую ногу чёрный ботинок, а на левую коричневый, мгновенно определяем, что дома остался левый чёрный ботинок и правый коричневый (см. рис. 7.8). В классической физике мы не можем обнаружить ботинок в состоянии $\frac{\text{чёрный}+\text{коричневый}}{\sqrt{2}}$ или $\frac{\text{коричневый}-\text{чёрный}}{\sqrt{2}}$, но в квантовой физике спин электрона может быть направлен $\frac{\text{вверх}+\text{вниз}}{\sqrt{2}} = \text{вправо}$ или $\frac{\text{вниз}-\text{вверх}}{\sqrt{2}} = \text{влево}$ (см. (7.14)).

Как мы увидим далее, квантовая нелокальность не может быть использована для передачи со сверхсветовой скоростью какой-либо информации. Чтобы эту нелокальность обнаружить, наблюдатели 1 и 2 должны провести серию измерений над запутанными состояниями и убедиться, что их результаты скоррелированы между собой. Однако результаты каждого наблюдателя в отдельности никаких странностей не проявляют. (См. следующие разделы)

Например, если мы имеем перепутанное состояние двух спинов, отвечающее суммарному спину 0

$$\frac{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle}{2} = \frac{|\rightarrow\rangle|\leftarrow\rangle - |\leftarrow\rangle|\rightarrow\rangle}{2},$$

где

$$|\rightarrow\rangle = \frac{|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\leftarrow\rangle = \frac{|\downarrow\rangle - |\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (7.14)$$

то обнаружение 1-й частицы в состоянии спин вверх $|\uparrow\rangle$ или спин вниз $|\downarrow\rangle$, спин вправо $|\rightarrow\rangle$ или спин влево $|\leftarrow\rangle$ автоматически переводит 2-ю частицу в состояние с противоположным направлением спина. Наблюдатель-1 может при этом выбрать будет ли он измерять проекцию спина на ось вверх-вниз (и обнаружит $|\uparrow\rangle$ или $|\downarrow\rangle$), или на ось вправо-влево (и обнаружит $|\rightarrow\rangle$ или $|\leftarrow\rangle$), хотя и не может предсказать результат выбранного измерения.

7.5.3 Зацепленные состояния при неселективном измерении (ф*)

Выше мы увидели, что измерение, совершаемое наблюдателем-1 над одной подсистемой запутанной системы, может мгновенно влиять на состояние другой подсистемы. Мы рассматривали это измерение как селективное, т.е. предполагали, что его результат известен наблюдателю-2, который экспериментирует со второй частью системы. Однако наблюдатель-2 не может знать волновую функцию своей собственной подсистемы-2, до тех пор пока ему не сообщили результаты измерения наблюдателя-1, а до тех пор он может говорить лишь о вероятности той или иной волновой функции подсистемы-2.

Таким образом, если экспериментаторы вместе с подсистемами удалены друг от друга, то результаты наблюдателя-1 сразу после измерения не известны наблюдателю-2, а значит измерение над подсистемой-1 с точки зрения наблюдателя-2 следует рассматривать как неселективное и описывать состояния подсистем в помощью матриц плотности.

$$\hat{\rho}_1 = \text{tr}_2 \hat{\rho}, \quad \rho_1(x_1; x_2) = \int dy \rho(x_1, y; x_2, y).$$

При вычислении частичного следа на результат влияют только диагональные по переменным интегрирования y компоненты матрицы полной матрицы плотности.

При неселективном измерении наблюдаемой величины $a(y)$ (коммутирующей (одновременно измеримой) с y и описывающей подсистему-2) в матрице плотности обнуляются все компоненты $\rho(x_1, y_1; x_2, y_2)$ для которых $a(y_1) \neq a(y_2)$:

$$\rho_{\text{после}}(x_1, y_1; x_2, y_2) = \rho(x_1, y_1; x_2, y_2) \cdot \delta_{a(y_1), a(y_2)}$$

Диагональные по y компоненты матрицы плотности при этом не меняются, поэтому не меняется матрица плотности для подсистемы-1.

Какую бы наблюдаемую $\hat{A}$ для подсистемы-2 мы не измеряли мы можем выбрать в качестве y набор наблюдаемых, коммутирующих с $\hat{A}$ и представить наблюдаемую в виде функции $a(y)$.

Таким образом, никакое *неселективное* наблюдение, выполненное над подсистемой-2 не может изменить состояния (матрицу плотности) подсистемы-1 и наоборот. В этом состоит *локальность* квантовой механики.

Как мы только что убедились, описанная выше *нелокальность* квантовой механики проявляется только для селективных измерений, а значит она не может привести к мгновенной передаче информации на расстоянии и не противоречит со специальной теории относительности.

7.5.4 Классические измерения (ф*)

Почти все результаты, которые были получены для селективных и неселективных измерений выше, можно повторить и для классических измерений.

Состояния классической системы, состоящей из двух подсистем мы можем описать совместным распределением вероятностей $\varrho(x, y)$, где наборы наблюдаемых x и y описывают первую и вторую подсистемы соответственно.

Состояние ϱ является коррелированным (аналог запутанного), если оно не может быть представлено как произведение распределений для отдельных подсистем:

$$\varrho(x, y) \neq \varrho_1(x) \cdot \varrho_2(y).$$

Если над подсистемой-2 совершается селективное измерение и в результате установлено, что $y \in W$ (W — область с ненулевым объёмом), то состояние системы в целом умножится на характеристическую функцию (см. (3.10)) множества W :

$$\varrho_{\text{после}}(x, y) = \varrho(x, y) \cdot I_W(y).$$

При точном измерении y показавшем, что $y = y_0$ распределение надо аналогично умножить на δ -функцию:

$$\varrho_{\text{после}}(x, y) = \varrho(x, y) \cdot \delta(y - y_0).$$

При таком измерении новое распределение уже оказывается некоррелированным (т.е. представляется как произведение независимых распределений для подсистемы-1 $\varrho(x, y_0)$ и подсистемы-2 $\delta(y - y_0)$).

Распределение для подсистемы-1 получается интегрированием по переменным подсистемы-2. Таким образом до измерения мы имеем

$$\varrho_1(x) = \int dy \varrho(x, y), \quad (7.15)$$

а после селективного измерения

$$\varrho_{1\text{после}}(x) = \varrho(x, y_0)$$

или

$$\varrho_{1\text{после}}(x) = \int_W dy \varrho(x, y).$$

Таким образом, селективное измерение, выполненное над подсистемой-2 мгновенно изменило распределение вероятностей для подсистемы-1.

Если же измерение над подсистемой-1 является неселективным, то распределение вероятностей для подсистемы-2 неизвестно, и мы должны усреднить это распределение по всем возможным y , что снова, как и до измерения даёт (7.15). Т.е. неселективное измерение выполненное над одной подсистемой, в классической теории не может изменить распределение вероятностей для другой подсистемы.

Таким образом, все рассуждения о селективных и неселективных измерениях систем в запутанных состояниях переносятся из квантовой теории в классическую за одним принципиальным исключением: в классической теории любые наблюдаемые считаются одновременно измеримыми (вспомним ещё раз ботинок Пьера Ришара рис. 7.8). Все мгновенные изменения классических состояний могут интерпретироваться как *изменение нашего знания о системе*.

7.5.5 Относительные состояния (Φ^*)

Корреляции между состояниями подсистем возможны не только в квантовой теории, но и в классической теории вероятностей, там для описания корреляций могут использоваться условные вероятности: вероятности измерения для одной подсистемы, при условии, что измерение для другой подсистемы дало определённый результат. Таким образом, состояние (распределение вероятностей) для сложной системы описывается совместным распределением вероятностей

$$\varrho(x, y),$$

где x и y нумеруют возможные чистые состояния подсистемы-1 и подсистемы-2. Условное ненормированное распределение вероятностей для подсистемы-1, при условии, что измерение для подсистемы-2 дало $y = y_0$ получается фиксированием значения второго аргумента:

$$\varrho_{y_0}(x) = \varrho(x, y_0). \quad (7.16)$$

Аналогично условному распределению вероятности, для квантовых подсистем в зацепленном состоянии Х. Эверетт III ввёл *относительное состояние* — состояние в котором оказывается подсистема-1, при условии что подсистема-2 была найдена в определённом состоянии. Чистое состояние сложной системы описывается заданием совместной волновой функции (совместных амплитуд вероятности)

$$\psi(x, y),$$

где x и y (полные наборы независимых наблюдаемых для подсистем-1 и 2) нумеруют базисные чистые состояния подсистемы-1 и подсистемы-2.

Относительная ненормированная волновая функция (*относительное состояние*) задаёт *условные амплитуды вероятности* для подсистемы-1, при условии что измерение для подсистемы-2 дало $y = y_0$. Относительное состояние получается фиксированием значения второго аргумента:

$$\psi_{y_0}(x) = \psi(x, y_0). \quad (7.17)$$

Оно задаёт состояние подсистемы-1, при условии, что над подсистемой-2 было проведено измерение, которое дало определённый результат $y = y_0$.

В выражении *относительное состояние* слово *относительное* употребляется в смысле отчасти аналогичным, используемому в теории относительности: состояние подсистемы-1, *относительно состояния* $y = y_0$ подсистемы-2. Если подсистема-2 выступает в роли наблюдателя, то мы получаем *состояние системы относительно состояния наблюдателя* (т.е. задание состояния наблюдателя аналогично заданию системы отсчёта в специальной теории относительности¹⁵). В частности, если известна унитарная эволюция сложной системы $\psi(x, y; t)$, и мы задали определённую временную эволюцию $y = y_0(t)$ состояния наблюдателя (подсистемы-2), то можно записать соответствующую ей временную эволюцию относительного состояния подсистемы-1:

$$\psi_{y_0(t)}(x; t) = \psi(x, y_0(t); t).$$

Если бы наблюдатель (подсистема-2) мог задавать свою собственную эволюцию произвольным образом, или/т.е. если бы он мог производить сам над самими собой измерения с желаемым произвольно заданным исходом, то он мог бы тем самым управлять эволюцией квантовой системы (подсистема-1), с которой он взаимодействует (см. 9.3.9 «Активное сознание (фф*)»).

Мы можем записать относительное состояние (7.17) с помощью оператора проекции на подпространство $y = y_0$ для подсистемы-2:

$$\hat{P}_{y_0} = \hat{1}_1 \otimes |y_0\rangle\langle y_0|. \quad (7.18)$$

¹⁵В некоторых русских переводах статьи “*Relative State*” *Formulation of Quantum Mechanics*, Hugh Everett, III, Reviews of Modern Physics, V. 29, N. 3, 1957 относительные состояния переводятся как *соотнесённые*. Такой перевод следует считать неправильным, т.к. он не демонстрирует той идейной связи с теорией относительности, которая послужила основой работы, и которую Эверетт стремился отразить в заголовке.

Здесь $\hat{1}_1$ — единичный оператор для подсистемы-1, а $|y_0\rangle\langle y_0|$ — проектор на состояние $y = y_0$ для подсистемы-2.

$$|\psi_{y_0}\rangle \otimes |y_0\rangle = \hat{P}_{y_0}|\psi\rangle \Rightarrow \underbrace{|\psi_{y_0}\rangle}_{\text{подсистема-1}} = \underbrace{\langle y_0|}_{\text{подсистема-2}} \underbrace{|\psi\rangle}_{\text{система 1+2}}. \quad (7.19)$$

Обратите внимание, что поскольку $|y_0\rangle$ описывает подсистему-2, а $|\psi\rangle$ — сложную систему из подсистем 1 и 2, скобка $\langle y_0|\psi\rangle$ даёт не число, а состояние подсистемы-1.

Формула (7.19) уже по существу не использует разложение рассматриваемого состояния $|\psi\rangle$ по базису, т.е. того, какие именно наборы наблюдаемых мы выбрали в качестве аргументов волновой функции. Мы можем переписать (7.19) как геометрическую (не зависящую от выбора базиса) формулу для состояния относительно произвольного состояния $|\phi\rangle$ подсистемы-2:

$$|\psi_{\phi_0}\rangle \otimes |\phi_0\rangle = \underbrace{(\hat{1}_1 \otimes |\phi_0\rangle\langle\phi_0|)}_{\hat{P}_{\phi_0}} |\psi\rangle \Rightarrow |\psi_{\phi_0}\rangle = \langle\phi_0|\psi\rangle. \quad (7.20)$$

Зная относительные состояния $|\psi_{\phi_0}\rangle$ подсистемы-1, относительно всех возможных состояний $|\phi_0\rangle$ подсистемы-2 мы можем восстановить состояние $|\psi\rangle$ сложной системы. При этом мы можем забыть о редукции волновой функции при измерении, если мы включили наблюдателя в сложную систему в духе многомировой интерпретации (9.3.7 «Многомировая интерпретация Эверетта (фф)»).

Использование относительных состояний также полезно для понимания при моделировании измерительного прибора с точки зрения квантовой механики (8.1 «Моделирование измерительного прибора*»).

Относительные состояния были введены Эвереттом для того, чтобы обосновать возможность применения квантовой механики к Вселенной в целом, как к замкнутой квантовой системе. Это прямо связано с проблемой квантования общей теории относительности (созданием квантовой теории гравитации). При этом наблюдаемое нами состояние Вселенной интерпретируется как относительное состояние для данного состояния наблюдателя (одно из многих возможных=сосуществующих).

7.5.6 Неравенство Белла и его нарушение (ф**)

Как замечательно, что мы столкнулись с парадоксом.
Теперь у нас есть надежда на продвижение!

Нильс Бор W

История неравенства Белла



Рис. 7.9: Джон Стюарт Белл (1928–1990). <http://www.s9.com/Biography/Bell-John-Stewart>

Неравенство Белла было введено Джоном Беллом в 1964 году при анализе мысленного эксперимента Эйнштейна-Подольского-Розена, предложенного в 1935 году.

Неравенство Белла представляет собой необходимое условие того, что три случайных величины с заданными корреляциями между собой могут быть одновременно реализованы в рамках классической теории вероятностей.

Подобная задача ставится без какого-либо упоминания квантовой механики. И, естественно, математики занимались ею и до 1964 года. Как пишет А.Ю. Хренников, неравенства Белла были первоначально получены на сотню лет раньше Джорджем Булем, а общее решение для системы n случайных величин было получено Н.Н. Воробьёвым в 1962 году.

Таким образом, заслуга Белла состоит не в выводе неравенства, а в его применении к интерпретации квантовой механики.

Вывод неравенства Белла

Пусть имеются три случайных величины a, b, c , которые могут принимать значения ± 1 . Величины a, b, c не зависят друг от друга, а зависят от некоторой случайной переменной λ .

Мы будем обозначать угловыми скобками классическое усреднение, которое может быть записано как интеграл по вероятностной мере $P(d\lambda)$ по вероятностному пространству Λ (этот интеграл может быть на самом деле взвешенной суммой, или комбинацией суммы и интеграла):

$$\langle A \rangle = \int_{\Lambda} A(\lambda) P(d\lambda).$$

Тогда с учётом линейности классического среднего, используя что $a^2 \equiv 1$, получаем

$$|\langle ab \rangle - \langle bc \rangle| = |\underbrace{\langle (a - c) b \rangle}_{\times a^2}| = |\underbrace{\langle (1 - ac) ab \rangle}_{\geq 0}| \leq \langle 1 - ac \rangle = 1 - \langle ac \rangle.$$

Таким образом, неравенство Буля-Белла имеет вид

$$|\langle ab \rangle - \langle bc \rangle| \leq 1 - \langle ac \rangle. \quad (7.21)$$



Рис. 7.11: Воробьёв Николай Николаевич (1925–1995).

[<http://emi.nw.ru>]

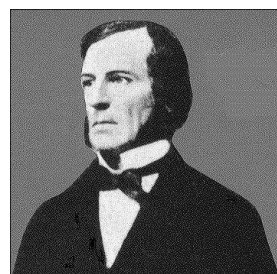


Рис. 7.10: Джордж Буль (1815–1864). W

Заменив c на $-c$ можно записать другую (эквивалентную) форму того же неравенства:

$$|\langle ab \rangle + \langle bc \rangle| \leq 1 + \langle ac \rangle. \quad (7.22)$$

Смысл неравенства Белла

Представим себе, что есть некоторый классический случайный процесс: переменная λ принимает различные значения из вероятностного пространства Λ , причём вероятность того, что $\lambda \in L \subset \Lambda$ задаётся как вероятностная мера $0 \leq P(L) \leq 1$.

Однако мы не наблюдаем величину λ непосредственно, вместо этого мы можем по своему усмотрению измерять две величины из набора $a(\lambda)$, $b(\lambda)$, $c(\lambda)$, причём все величины могут принимать только значения ± 1 .

При этом выбор пары измеряемых величин мы делаем независимо от выпавшего λ . Например пара измеряемых величин выбирается уже после того, как генератор случайных событий (рулетка, карты, кости, броуновское движение, дробовой шум) выдали конкретную точку λ (чтобы человек управляющий генератором ничего в нём не подкрутил), но до того, как у нас есть возможность что-то узнать о выпавшем варианте (чтобы мы тоже не могли учесть λ при выборе пары измерений).

Много раз генерируя случайные значения λ с одинаковым распределением вероятности P , мы с необходимостью должны получить корреляторы $\langle ab \rangle$, $\langle bc \rangle$, $\langle ac \rangle$ удовлетворяющие неравенству Буля-Белла.

И хотя каждый раз мы измеряем только две величины из трёх, третья каждый раз тоже принимает какое-то определённое, хотя и не известное значение (разумеется, в *классическом* случае). Таким образом, существует 8 возможных комбинаций значений для a , b и c . Каждой из этих комбинаций мы можем приписать неотрицательную вероятность

$$P(a, b, c) \geq 0, \quad \sum_{a, b, c \in \{-1, +1\}} P(a, b, c) = 1.$$

Корреляторы могут быть выражены через вероятности, например,

$$\langle ab \rangle = \sum_{c \in \{-1, +1\}} P(+, +, c) + P(-, -, c) - P(+, -, c) - P(-, +, c).$$

И если бы вдруг оказалось, что неравенство Белла нарушено, мы не смогли бы подобрать 8 неотрицательных вероятностей $P(a, b, c)$, что неизбежно означало бы нарушение процедуры: не иначе человек, управляющий генератором случайных событий знает о том, какие именно величины мы решили измерять, и подкручивает свой генератор в соответствии с этим.¹⁶

Неравенство Белла и скрытые параметры

В квантовой механике вероятностное пространство задаётся не только состоянием системы, но и выбором измеряемой величины, т.е. по существу выбором измерительной установки. В связи с этим у нас нет оснований ожидать, что неравенство Белла будет выполняться для некоммутирующих наблюдаемых, которые не могут быть измерены одновременно.

¹⁶Где мой канделябр!? :)

Тем не менее, если неравенство Белла выполняется для некоммутирующих наблюдаемых, это оставляет надежду, что можно придумать некоторый скрытый параметр λ (который и параметризует элементарные события, по которым мы интегрируем), такой, что все наблюдаемые однозначно выражаются через этот параметр. В этом случае удалось бы придумать единое распределение вероятностей для λ (общее вероятностное пространство) для взаимоисключающих измерений. Единое вероятностное пространство означало бы, что все квантовые вероятности и неопределённости сводятся к классической теории вероятности и, подобно классическим вероятностям, могут быть объяснены тем, что мы не знаем точного состояния системы, которое в этом случае задавалось бы уже не волновой функцией, а набором скрытых параметров.

Однако при измерении двух некоммутирующих переменных состояние системы меняется после первого измерения, что оказывает влияние на второе. Чтобы обойти эту сложность мы измеряем *две некоммутирующие переменные* почти одновременно (разность времён меньше, чем расстояние делённое на скорость света) *на двух установках удалённых друг от друга*. Конечно, квантовая теория учит, что квантовое состояние изменяется мгновенно, но если квантовая теория — лишь приближённая теория к теории с локальными скрытыми переменными, то это мгновенное влияние на расстоянии следует считать нефизическим, тем более, что даже квантовая теория обладает своего рода локальностью, которая не допускает сверхсветовой передачи информации.

Если продемонстрировать, что квантовая механика позволяет нарушать неравенство Белла для некоммутирующих переменных, то это будет означать, что квантовая механика принципиально отличается от любой локальной (без мгновенного дальнего действия) классической (в том числе классической вероятностной) теории. Более того, экспериментальная проверка нарушения неравенств Белла будет экспериментом, способным опровергнуть все локальные классические теории разом.

Корреляции для спинов*

Этот раздел предполагает знакомство читателя со спиновыми волновыми функциями и операторами для спина $\frac{1}{2}$.

Для построения в рамках квантовой механики контрпримера к неравенству Белла мы используем систему из двух спинов $\frac{1}{2}$, находящихся в состоянии с нулевым полным моментом:

$$|\psi\rangle = \frac{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Здесь $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ — одночастичные состояния спин вверх и спин вниз. Это состояние переходит в себя при любых поворотах.

Такие состояния называют ЭПР-состояниями. Они появляются при описании парадокса Эйнштейна-Подольского-Розена в формулировке Давида Боба. *Возможность нарушения неравенства Белла для такого состояния является выделенной Беллом математической сущностью парадокса ЭПР.*

Измеряться будут удвоенные проекции спина одной из частиц на различные направления (они как раз могут принимать значения ± 1 , как и надо по условиям неравенства Белла).

Если провести измерение проекции спина одной из частиц (пусть это будет первая частица) на ось z (или на любую другую ось, т.к. все направления для этого состояния равноправны!), то с равной вероятностью $\frac{1}{2}$ проекция будет равна $\pm \frac{1}{2}$.

После такого измерения проекции спинов обеих частиц будут определены однозначно, причём их знаки всегда будут противоположны.

Таким образом, измерение проекции спина первой частицы с равным успехом можно проводить как над самой первой частицей, так и над второй частицей: состояния после измерения для обоих случаев совпадают, а измеренные числа пересчитываются друг в друга заменой знака.

Пусть второе измерение определяет проекцию спина первой частицы на ось, повернутую на угол θ по отношению к оси, использованной при первом измерении. Если первое измерение проводилось для оси z , а второе — для оси повернутой на угол θ вокруг оси x , то базисные одночастичные состояния для первого и второго измерений

$$|\psi_{1+}\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_{1-}\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix};$$

$$|\psi_{2+}\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\psi_{2-}\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Таким образом, последовательные измерения удвоенных проекций спина первой частицы на оси, составляющие угол θ дают значения $\pm 1, \pm 1$ со следующими вероятностями:

$$P(+, +, \theta) = \frac{1}{2} |\langle \psi_{1+} | \psi_{2+} \rangle|^2 = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}, \quad P(+, -, \theta) = \frac{1}{2} |\langle \psi_{1+} | \psi_{2-} \rangle|^2 = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2},$$

$$P(-, +, \theta) = \frac{1}{2} |\langle \psi_{1-} | \psi_{2+} \rangle|^2 = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad P(-, -, \theta) = \frac{1}{2} |\langle \psi_{1-} | \psi_{2-} \rangle|^2 = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}.$$

Таким образом коррелятор для проекций на указанные оси составляет

$$\langle ab \rangle = P(+, +, \theta) - P(-, +, \theta) - P(+, -, \theta) + P(-, -, \theta) = \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} = \cos \theta.$$

Этот результат можно записать так:

$$\langle (\vec{\sigma}, \mathbf{n}) (\vec{\sigma}, \mathbf{n}') \rangle = (\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \cos(\angle \mathbf{n} \mathbf{n}'), \quad |\mathbf{n}| = |\mathbf{n}'| = 1. \quad (7.23)$$

Нарушение неравенства Белла в квантовой механике

Покажем, что направления осей, для которых измеряются удвоенные проекции спина могут быть выбраны так, что корреляции (7.23) будут нарушать неравенство Белла (7.22).

Выберем три оси, отвечающие измерениям a , b и c лежащими в одной плоскости под углом $\frac{2\pi}{3}$ друг к другу. Все три пары осей равноправны и мы получаем

$$\langle ab \rangle = \langle bc \rangle = \langle ac \rangle = \cos \frac{2\pi}{3} = -\frac{1}{2}.$$

При подстановке в неравенство Белла (7.22) получаем противоречие:

$$\underbrace{|\langle ab \rangle|}_{-\frac{1}{2}} + \underbrace{|\langle bc \rangle|}_{-\frac{1}{2}} \leq 1 + \underbrace{|\langle ac \rangle|}_{-\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad 1 \leq \frac{1}{2}.$$

Таким образом, действительно, с классической локальной точки зрения поведение квантовых коррелированных систем может быть парадоксальным, и парадокс ЭПР действительно является парадоксом. Впрочем, физики последовательно

придерживающиеся неклассического и/или нелокального взгляда на мир могут не видеть здесь парадокса.

Ещё раз отметим, что каждый раз при измерении пары величин измерения осуществляются над разными частицами практически одновременно (чтобы разность времен была недостаточна для путешествия сигнала со скоростью света), но результат всегда пересчитывается для первой частицы. Реально для набора статистики нам понадобится проводить не 3, а по крайней мере 4 разных измерения. Например, измерения a каждый раз проводится над первой частицей, измерение b — над второй, а измерение c — над второй или первой в зависимости от того, в паре с каким измерением оно выполняется.

Нарушение неравенства Белла на эксперименте

Нарушение неравенств Белла было экспериментально проверено А. Аспектом в 1982 году. От описанной выше схемы эксперимент Аспекта отличался использование фотонов вместо электронов, что математически эквивалентно, т.к. фотоны также имеют две независимых поляризации.¹⁷

Более существенно то, что большая часть фотонов в эксперименте Аспекта не регистрировалась детекторами. Таким образом, реально наблюдаемые пробежали не 2 значения ± 1 , отвечающих двум поляризациям фотона/электрона, а три значения: добавлялся 0, отвечающий потере фотона. Если предположить, что потеря фотона может коррелировать с его поляризацией, то можно построить такой набор классических вероятностей для каждой из комбинаций трёх исходов, которая позволит воспроизвести экспериментальные корреляции.

Таким образом, эксперимент Аспекта подтверждает нарушение неравенств Белла только в предположении независимости события регистрации фотона от его поляризации.

Теоретически это означает, что эксперимент Аспекта не полностью закрывает возможность построения локальной теории скрытых параметров, хотя и сильно ограничивает свойства таких теорий.



Рис. 7.12: Алан Аспект.

7.6 Теорема о невозможности клонирования квантового состояния**

Теорема о невозможности клонирования квантового состояния утверждает, что невозможно имея квантовую систему в некотором произвольном неизвестном состоянии ψ , приготовить две системы в том же состоянии ψ .

Однако, если состояние ψ известно, то мы можем приготовить в этом состоянии произвольное число систем, причём нам даже не нужна исходная система-образец в этом состоянии.

Приготовление системы подразумевает возможность произвольного чередования любых измерений с унитарной эволюцией под действием произвольных гамильтонианов с отбором систем по результатам измерений. Эти три процедуры

¹⁷Т.к. спин фотонов не $\frac{1}{2}$, а 1, углы между направлениями анализаторов для фотонов надо поделить на 2.

позволяют также описать приготовление процесс которого зависит от результатов промежуточных измерений.

Если не нормировать волновые функции на единицу, то процесс приготовления системы сводится к последовательному действию на исходное состояние (здесь $|\phi_0\rangle$ — состояние окружения)

$$|\Psi_0\rangle = |\psi\rangle|\phi_0\rangle$$

различных унитарных операторов и проекторов, произведение которых даёт некоторый линейный оператор $\hat{K}$.

Линейность оператора, $\hat{K}$ приготовления состояния подсказывает идею доказательства:

Начальное состояние $|\Psi_0\rangle$ линейно по $|\psi\rangle$, следовательно конечное состояние $|\Psi_1\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle|\phi_1\rangle$ также должно быть линейно по ψ , что, вероятно, невозможно.

Рассмотрим два линейно независимых состояния ψ_1 и ψ_2 , и предположим, что мы можем клонировать и эти состояния, и их сумму $\psi_1 + \psi_2$ с помощью одного оператора $\hat{K}$.

Для ψ_1 и ψ_2 получаем

$$\begin{aligned}\hat{K}|\psi_1\rangle|\phi_0\rangle &= |\psi_1\rangle|\psi_1\rangle|\phi_1\rangle \\ \hat{K}|\psi_2\rangle|\phi_0\rangle &= |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle|\phi_2\rangle.\end{aligned}$$

Для $\psi_1 + \psi_2$ в силу линейности $\hat{K}$

$$\hat{K}|\psi_1 + \psi_2\rangle|\phi_0\rangle = |\psi_1\rangle|\psi_1\rangle|\phi_1\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle|\phi_2\rangle + |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle 0 + |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle 0.$$

С другой стороны, если состояние $\psi_1 + \psi_2$ клонируется тем же оператором $\hat{K}$

$$\begin{aligned}\hat{K}|\psi_1 + \psi_2\rangle|\phi_0\rangle &= |\psi_1 + \psi_2\rangle|\psi_1 + \psi_2\rangle|\phi_{1+2}\rangle = \\ &= |\psi_1\rangle|\psi_1\rangle|\phi_{1+2}\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle|\phi_{1+2}\rangle + |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle|\phi_{1+2}\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle|\phi_{1+2}\rangle.\end{aligned}$$

Из линейной независимости ψ_1 и ψ_2 следует линейная независимость их тензорных произведений

$$|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle, \quad |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle, \quad |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle, \quad |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle.$$

В силу этого, сравнивая два выражения для $\hat{K}|\psi_1 + \psi_2\rangle|\phi_0\rangle$ получаем, приравнявая последние тензорные множители при одинаковых первых двух:

$$\begin{aligned}|\phi_{1+2}\rangle &= |\phi_1\rangle, \\ |\phi_{1+2}\rangle &= |\phi_2\rangle, \\ |\phi_{1+2}\rangle &= 0, \\ |\phi_{1+2}\rangle &= 0.\end{aligned}$$

Таким образом, мы не можем клонировать с помощью одного и того же оператора $\hat{K}$ даже состояния из двумерного линейного подпространства, натянутого на ψ_1 и ψ_2 . Случай же одномерного подпространства интереса не представляет, поскольку знание одномерного подпространства означает знание состояния (с точностью до множителя).

Если бы можно было бы клонировать некоторое состояние системы, то мы могли бы совершая различные измерения для разных «клонов» полностью (с точностью до общего множителя) определить волновую функцию системы, однако

в силу теоремы о невозможности клонирования *произвольная* волновая функция единичной системы оказывается недоступна измерению.

Невозможность клонирования также означает невозможность «подсмотреть» унитарную эволюцию системы не прерывая её. В частности это накладывает ряд принципиальных ограничений на работу с квантовым компьютером (невозможность «следить» за процессом вычислений, невозможность полностью использовать квантовый параллелизм и т.д.).

7.6.1 Смысл невозможности клонирования (ф*)

Теорема о невозможности клонирования квантового состояния гласит, что имея некоторую систему в *неизвестном* (*произвольном*) квантовом состоянии мы не можем приготовить две системы (или более) в таком же состоянии. Разумеется, *если мы знаем* в каком состоянии система, то мы в принципе можем приготовить сколь угодно много систем в таком же состоянии.

Чтобы понять, какие физико-философские последствия имеет теорема о невозможности клонирования, давайте предположим противное: представим себе, что у нас есть некоторое *клонирующее устройство*, осуществляющее клонирование квантового состояния, и изучим, к каким последствиям это может привести.

Многokrатно измеряя для системы в одинаковом состоянии какой-либо полный набор совместных наблюдаемых n мы можем (благодаря *клонирующему устройству*) набрать статистику и получить распределение вероятностей всевозможных исходов измерения, т.е. определить функцию $p_n = |\psi_n|^2$ для данного базиса.

Это пока не позволяет определить саму волновую функцию, т.к. мы пока знаем только модули амплитуд $|\psi_n|$, но не фазы $\arg(\psi_n)$. Однако обладая *клонирующим устройством* мы можем набрать статистику для нескольких разных полных наборов наблюдаемых, и получить распределения вероятностей для различных базисов.

Неизмеримость волновой функции (ф*)

Совокупность распределений вероятности для всевозможных наборов наблюдаемых называется *квантовой томограммой*.¹⁸ Квантовая томограмма позволяет полностью определить исходное неизвестное состояние (с точностью до физически незначащего общего фазового множителя). По существу квантовая томограмма — иное представление состояния квантовой системы.

Таким образом, клонирующее устройство позволило бы нам измерять на эксперименте квантовую томограмму, т.е. квантовое состояние (волновую функцию) единичной системы.

Без клонирующего устройства, обладая единичной системой в неизвестном состоянии, наибольшее что мы можем сделать — один раз измерить какой-либо полный набор совместных наблюдаемых. При этом мы полностью уничтожим исходное состояние системы: состояние спроецируется на собственное подпространство, отвечающее найденным значениям измеренных наблюдаемых. Единственное, что мы можем достоверно сказать про исходное состояние, что и до измерения его проекция на данное подпространство была отлична от нуля.

¹⁸На самом деле для задания квантовой томограммы нам даже не нужны распределения вероятностей для *всех* возможных полных наборов наблюдаемых. Например для одиночной частицы на прямой достаточно задать распределения по всевозможным комбинациям $\alpha x + \beta p$, а для одиночного спина $\frac{1}{2}$ — распределения по проекциям спина на всевозможные направления. Более подробно квантовая томография будет обсуждена в другом разделе.

Возьмём простейший случай, когда система представляет собой *квантовый бит* (*кубит* — система с двумерным пространством состояний), например спин электрона, или поляризацию фотона. Квантовый бит, в отличие от классического, может помимо базисных состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ принимать их произвольные линейные комбинации $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Даже после фиксации нормировки и фазы у нас остаётся бесконечно большое множество состояний, параметризуемое отношением $\frac{\beta}{\alpha}$. Для параметризации отношения $\frac{\beta}{\alpha}$ (одно комплексное число или два вещественных) нам потребуется бесконечно много двоичных цифр, т.е. бесконечно много классических битов.

Любое количество классических битов мы могли бы извлечь из одного квантового бита, если бы у нас было клонирующее устройство.

В реальности (без клонирующего устройства) мы можем извлечь из одного квантового бита только один бит классической информации.

Невозможность квантовой телепатии (ф*)

Итак, клонирующее устройство позволило бы измерять волновую функцию. К чему бы это привело? Мы могли бы передавать информацию на расстоянии со сколь угодно большой скоростью! При этом грубо нарушались бы принципы специальной теории относительности.

Пусть у нас есть два кубита (спина) в запутанном состоянии

$$|I\rangle = \frac{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|\rightarrow\rangle|\leftarrow\rangle - |\leftarrow\rangle|\rightarrow\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Здесь мы использовали два одночастичных базиса: спин вверх-вниз и спин вправо-влево. Связаны между собой эти базисы следующими соотношениями:

$$|\rightarrow\rangle = \frac{|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\leftarrow\rangle = \frac{|\downarrow\rangle - |\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Пусть первый кубит находится в распоряжении Алисы, а второй — в распоряжении Бориса. Если Алиса измеряет свой кубит в базисе вверх-вниз или в базисе вправо-влево. Кубит Бориса *мгновенно* попадает в состояние того же базиса с ориентацией противоположной измеренной Алисой:

$$\text{измерение } \updownarrow: |I\rangle \longrightarrow |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle \text{ или } |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle,$$

$$\text{измерение } \leftrightarrow: |I\rangle \longrightarrow |\rightarrow\rangle|\leftarrow\rangle \text{ или } |\leftarrow\rangle|\rightarrow\rangle.$$

Если у Бориса есть клонирующее устройство, то он может клонировать свой кубит и измерить в каком состоянии он находится. Если кубит Бориса в состоянии $|\uparrow\rangle$ или $|\downarrow\rangle$, то это значит, что Алиса использовала базис вверх-вниз. Если кубит Бориса в состоянии $|\leftarrow\rangle$ или $|\rightarrow\rangle$, то это значит, что Алиса использовала базис влево-вправо. Таким образом, если почти на полпути между Алисой и Борисом расположен источник, который испускает к ним запутанные кубиты, которые прибывают к Алисе чуть раньше, чем к Борису, то Алиса может практически мгновенно передавать Борису информацию, кодируя её выбором базиса (вверх-вниз — 1, влево-вправо — 0).

Если у Бориса нет клонирующего устройства, то у него нет возможности узнать угадал ли он базис, который использовала Алиса. Если Борис использует тот же базис, то он будет всегда получать другое направление спина, чем Алиса.

Корреспонденты при этом получают две цепочки случайных значений $\uparrow, \downarrow$, так что каждому значению Алисы соответствует противоположное Бориса. Однако Алиса не может влиять на то, выпадет ли ей при очередном измерении $\uparrow$ или $\downarrow$ ¹⁹, таким образом она не может передать информацию. Если же используются разные базисы, то результаты измерений корреспондентов оказываются и вовсе никак не связаны. Возможны промежуточные ситуации, при использовании других базисов, но в любом случае (см. 7.5.3 «Зацепленные состояния при неселективном измерении (Φ^*)») Алиса не может передать Борису информацию, производя любые манипуляции над своей частью запутанной системы.

Другое доказательство невозможности клонирования (Φ^*)

Рассуждения предыдущего раздела можно рассматривать не только как вывод следствий из теоремы о невозможности клонирования квантового состояния, но и как альтернативное доказательство этой теоремы. В разделе 7.6 «Теорема о невозможности клонирования квантового состояния» при доказательстве использовалось описание результата измерения с помощью проекционного постулата. Однако проекционный постулат в квантовой механике «на плохом счету»: многие физики смотрят на него как на некоторое довольно сомнительное приближение, в отличие от унитарной эволюции и формул для расчёта вероятностей. В предыдущем разделе мы привели иное доказательство невозможности клонирования квантового состояния, не используя проекционный постулат, заменив его предположением о невозможности квантовой телепатии.

7.7 Квантовая телепортация**

Квантовая телепортация — эффект переноса квантового состояния с одного объекта на другой без непосредственного взаимодействия. В процессе квантовой телепортации осуществляется измерение, но сам по себе результат этого измерения не позволяет определить передающееся квантовое состояние, однако позволяет определить, какому воздействию должен подвергнуться второй объект, чтобы очутиться в состоянии, в котором ранее пребывал первый.

Рассмотрим простейший случай квантовой телепортации, при котором телепортируется спиновое состояние одного квантового бита. Квантовый бит, q -бит или кубит — система, для которой в данных условиях существенны лишь два линейно ортогональных состояния, например частица со спином $\frac{1}{2}$ (спин вверх и спин вниз), фотон (две ортогональные поляризации), два близких (или вырожденных) энергетических уровня какой-либо молекулы и т.п. Два ортонормированных состояния кубита обозначим как

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

В процессе квантовой телепортации участвуют три кубита — исходный (1-й), вспомогательный (2-й) и конечный (3-й), а также два макроскопических экспериментатора, которых следуя криптографической традиции мы будем называть Алиса и Борис (он же Боб в иностранной литературе), и классическая линия связи между ними.

¹⁹Обсуждение этого см. в разделах 8.2.2 «Жёсткость» формулы для вероятностей», 9.3.9 «Активное сознание».

В начале эксперимента исходный кубит находится в некотором неизвестном состоянии

$$|\phi_0\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

Конечный и вспомогательный кубит находятся в запутанном ЭПР-состоянии.

$$|\Psi_1\rangle = \frac{|1\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Здесь 1-й множитель соответствует вспомогательному кубиту, а 2-й — конечному. Таким образом, состояние всех трёх кубитов описывается волновой функцией

$$|\Phi_0\rangle = |\phi_0\rangle|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(|1\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle).$$

Множители расположены в порядке номеров кубитов.

Предполагается, что 1-й и 2-й кубит находятся в распоряжении Алисы, а 3-й в распоряжении Бориса. 2-й и 3-й кубиты находятся в запутанном состоянии (когда-то раньше они были приведены в это состояние). Например, Борис мог до начала эксперимента (даже до того, как 1-й кубит попал в состояние $|\phi_0\rangle$) приготовить кубиты 2, 3 и отдать 2-й Алисе.

Алиса совершает измерение над двумя имеющимися у неё кубитами. Измеряется физическая величина, соответствующая двухчастичному оператору

$$\hat{A} = \sum_{n=1}^4 n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|,$$

где состояния $|\Psi_n\rangle$ образуют ортонормированный базис двухчастичных запутанных состояний (одно из них — $|\Psi_1\rangle$ — нам уже встречалось):

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= \frac{|1\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\Psi_2\rangle &= \frac{|1\rangle|0\rangle + |0\rangle|1\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\Psi_3\rangle &= \frac{|1\rangle|1\rangle - |0\rangle|0\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\Psi_4\rangle &= \frac{|1\rangle|1\rangle + |0\rangle|0\rangle}{\sqrt{2}}, \end{aligned}$$

$$\langle\Psi_n|\Psi_m\rangle = \delta_{nm}.$$

Оператор $\hat{A}$ — двухчастичный. Чтобы указать, какие именно частицы измеряются мы можем выписать его трёхчастичный вариант, написав тензорное произведение с одночастичным единичным оператором

$$\hat{A}_{12} = \hat{A} \otimes \hat{1}.$$

Оператор $\hat{A}_{12}$ действует на первые две частицы как оператор $\hat{A}$, а состояние третьей не изменяет.

Собственные функции оператора $\hat{A}_{12}$ имеют вид

$$\hat{A}_{12}|\Phi_{n\varphi}\rangle = n|\Phi_{n\varphi}\rangle, \quad |\Phi_{n\varphi}\rangle = |\Psi_n\rangle|\varphi\rangle, \quad n \in \{1, 2, 3, 4\},$$

где $|\varphi\rangle$ — произвольная одночастичная волновая функция.

Измеряя $\hat{A}_{12}$ мы определяем число $n \in \{1, 2, 3, 4\}$, при этом состояние системы после измерения принимает вид $|\Phi_{n\varphi}\rangle$.

$$\begin{aligned} |\Phi_0\rangle &= |\phi_0\rangle|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(|1\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|0\rangle|1\rangle|0\rangle - \alpha|0\rangle|0\rangle|1\rangle + \beta|1\rangle|1\rangle|0\rangle - \beta|1\rangle|0\rangle|1\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha\frac{|\Psi_2\rangle - |\Psi_1\rangle}{\sqrt{2}}|0\rangle - \alpha\frac{|\Psi_4\rangle - |\Psi_3\rangle}{\sqrt{2}}|1\rangle + \beta\frac{|\Psi_4\rangle + |\Psi_3\rangle}{\sqrt{2}}|0\rangle - \beta\frac{|\Psi_2\rangle + |\Psi_1\rangle}{\sqrt{2}}|1\rangle\right) = \\ &= \frac{1}{2}(|\Psi_1\rangle[-\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle] + |\Psi_2\rangle[\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle] + |\Psi_3\rangle[\beta|0\rangle + \alpha|1\rangle] + |\Psi_4\rangle[\beta|0\rangle - \alpha|1\rangle]) \end{aligned}$$

Таким образом, исходное состояние $|\Phi_0\rangle$ разлагается на собственные состояния оператора $\hat{A}_{12}$ следующим образом

$$|\Phi_0\rangle = \sum_{n=1}^4 \frac{1}{2} |\Psi_n\rangle |\varphi_n\rangle$$

Здесь

$$\begin{aligned} |\varphi_1\rangle &= -\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} -\alpha \\ -\beta \end{pmatrix}, \\ |\varphi_2\rangle &= \alpha|0\rangle - \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix}, \\ |\varphi_3\rangle &= \beta|0\rangle + \alpha|1\rangle = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix}, \\ |\varphi_4\rangle &= \beta|0\rangle - \alpha|1\rangle = \begin{pmatrix} \beta \\ -\alpha \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

После измерения $\hat{A}_{12}$ частицы 1 и 2 с равной вероятностью $\frac{1}{4} = (\frac{1}{2})^2$ попадают в одно из состояний $|\Psi_n\rangle$, а частица 3 в соответствующее состояние $|\varphi_n\rangle$. Каждое из состояний $|\varphi_n\rangle$ содержит оба числа α и β , и оно может быть превращено в исходное состояние $|\phi_0\rangle$ с помощью соответствующего унитарного оператора:

$$|\phi_0\rangle = \hat{U}_n |\varphi_n\rangle,$$

где

$$\begin{aligned} \hat{U}_1 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -\hat{E}, \quad \hat{U}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_z, \\ \hat{U}_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_x, \quad \hat{U}_4 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -i\hat{\sigma}_y. \end{aligned}$$

Эти четыре матрицы выражаются через матрицы Паули и единичную матрицу.

Поскольку состояние всё равно определяется с точностью до фазового множителя мы можем не обращать внимания на фазовые множители в формулах для унитарных операторов $\hat{U}_n$.

Если кубиты реализованы как частицы со спином $\frac{1}{2}$, то, с точностью до фазовых множителей, матрицы $\hat{U}_n$ для $n \in \{2, 3, 4\}$ совпадают с операторами поворота на

угол π вокруг осей z , x и y соответственно. Такие повороты можно реализовать накладывая на определённое время магнитное поле вдоль соответствующей оси координат. В случае $n = 1$ третья частица сразу оказывается в состоянии $|\phi_0\rangle$ с точностью до знака.

Заметим, что если исходный кубит, который подвергается телепортации, находился в зацепленном состоянии с другими системами, то телепортация переносит зацепленность на 3й кубит, а 1-й кубит остаётся зацепленным только со вторым. Благодаря этому, систему квантовых кубитов в запутанном состоянии можно телепортировать в несколько приёмов, передавая за раз по одному кубиту.

Квантовая телепортация одного кубита (спинового состояния фотона) была успешно осуществлена на эксперименте с вероятностью $\frac{1}{4}$: на эксперименте пока удалось осуществить измерение отличающее первый исход измерения (состояние $|\Psi_1\rangle$) от остальных трёх, но не различить оставшиеся три состояния между собой. Таким образом, телепортацию удавалось осуществить только в случае $n = 1$.

Глава 8

Место теории измерений

Квантовая теория измерений описывает взаимодействие квантовой системы с измерительным прибором. Теория измерений строится на основе постулатов, которые не выводятся из квантовой теории замкнутых квантовых систем, тем не менее, теорию измерений исследуют с точки зрения квантовой механики. При этом могут ставиться следующие вопросы:

- Согласована ли теория измерений с теорией замкнутых систем?
- Как можно модифицировать теорию измерений?
- Может ли теория измерений быть выведена из теории замкнутых систем?
- Можно ли модифицировать теорию замкнутых систем так, чтобы она включила в себя теорию измерений?

Эта глава в существенной степени перекликается с главой 9 «На грани физики и философии (фф*)», поскольку философские споры вокруг квантовой теории в существенной степени связаны с пониманием процесса измерения. Различие между этими главами состоит в том, что здесь больше физики, а там — философии. Те рассуждения, которые приводят к конкретным физическим выводам, а не просто к удивлению и философскому озарению были помещены сюда, а нестрогие рассуждения о реальности, сознании и познании — в следующую главу.

Некоторые исторически связанные рассуждения оказались разнесены по двум главам. Введённое Эвереттом понятие относительного состояния и моделирование измерительного прибора по фон Нейману имеют смысл при любой интерпретации квантовой механики. Однако мотивированные этими построениями многомировая интерпретация Эверетта и «абстрактное Я» фон Неймана уже не физика, а философия физики.

8.1 Моделирование измерительного прибора*

Сам процесс измерения, который обычно рассматривается в соответствии с проекционным постулатом как мгновенный процесс, иногда сам становится предметом изучения с точки зрения квантовой механики. При этом вводится модель измерительного прибора (точнее его микроскопической части), который описывается как квантовая система. В волновую функцию вводятся дополнительные переменные, описывающие прибор, а в гамильтониан включаются дополнительные члены описывающие сам прибор и его взаимодействие с микрообъектом.

Однако такое моделирование само по себе не способно объяснить, что такое измерение над квантовой системой: процесс взаимодействия квантовой системы и микроприбора описывается как унитарная эволюция, а проекционный постулат снова проявляется уже при рассмотрении считывания показаний прибора (измерении положения «стрелки»).

Таким образом, моделирование измерительного прибора сдвигает границу между системой и наблюдателем, рассматривая прибор не как часть наблюдателя, а как часть квантовой системы. Вопрос о природе процесса измерения при этом остаётся открытым.

Последовательное применение такого метода демонстрирует, что квантовая механика позволяет по-разному проводить границу между системой и наблюдателем (часто кроме «системы» и «наблюдателя» выделяют ещё и «среду»). В «систему» иногда включается даже часть организма самого наблюдателя, но здесь мы уже вступаем в область *интерпретаций квантовой механики*, которые мы обсудим подробнее в главе 9 «На грани физики и философии (фф*)».

8.1.1 Измерительный прибор по фон Нейману**

Простейшая модель процесса измерения была рассмотрена фон Нейманом в книге «Математические основы квантовой механики». Рассматривается система, состоящая из двух одномерных квантовых частиц, одна из которых (m) — измеряемая система, а другая (M) — стрелка прибора. Наблюдатель хочет измерить координату частицы q , но непосредственно наблюдает только координату стрелки Q . Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hat{P}^2}{2M} + \alpha \hat{q} \hat{P}.$$

Здесь маленькими буквами обозначаются параметры и наблюдаемые, относящиеся к частице, а большими — к стрелке.

Параметр α определяет силу взаимодействия. Мы считаем, что в начальный момент времени взаимодействие выключено ($\alpha|_{t<0} = 0$), потом на протяжении времени T взаимодействие включено ($\alpha|_{t \in [0, T]} = \frac{1}{\tau}$), после чего — снова выключено ($\alpha|_{t>0} = 0$).

Сразу после выключения взаимодействия наблюдатель производит над стрелкой идеальное определение координаты Q .

Будем считать, что массы m и M достаточно велики, чтобы за время T (при заданном начальном состоянии) можно было пренебречь кинетической энергией частицы и стрелки.

Оператор эволюции за время взаимодействия в координатном представлении можно переписать как

$$\hat{U}_T = e^{-\frac{iT}{\hbar} \hat{q} \hat{P}} = e^{-\frac{T}{\tau} \hat{q} \frac{\partial}{\partial Q}}.$$

Таким образом, эволюция сводится к сдвигу координаты стрелки на расстояние $\frac{T}{\tau} q$, пропорциональное координате частицы q .¹

Если начальное состояние системы факторизуемо $\Phi_0(q, Q) = \psi_0(q) \phi_0(Q)$, то после взаимодействия получается перепутанное состояние

$$\Phi_1(q, Q) = \hat{U}_T \Phi_0(q, Q) = \Phi_0(q, Q - \frac{T}{\tau} q) = \psi_0(q) \phi_0(Q - \frac{T}{\tau} q).$$

¹В импульсном представлении получаем другой взгляд на процесс: $\hat{U}_T = e^{-\frac{iT}{\hbar} \hat{q} \hat{P}} = e^{\frac{T}{\tau} P \frac{\partial}{\partial p}}$, что соответствует сдвигу импульса частицы на величину $-\frac{T}{\tau} P$, пропорциональную импульсу стрелки.

После обнаружения стрелки в точке Q_0 (т.е. обнаружения стрелки в состоянии $\delta(Q - Q_0)$) частица оказывается в состоянии

$$\psi_1(q) = \psi_0(q) \phi_0(Q_0 - \frac{T}{\tau} q),$$

а система в состоянии

$$\Phi_2(q, Q) = \hat{P}_{Q_0} \Phi_1 = \psi_0(q) \phi_0(Q - \frac{T}{\tau} q) \delta(Q - Q_0),$$

с плотностью вероятности (скалярное произведение не возводится в квадрат, т.к. состояние Φ_2 нормировано на плотность вероятности)

$$\begin{aligned} w_1(Q_0) = \langle \Phi_2 | \Phi_1 \rangle &= \int dq dQ [\psi_0(q) \phi_0(Q - \frac{T}{\tau} q) \delta(Q - Q_0)]^* \psi_0(q) \phi_0(Q - \frac{T}{\tau} q) = \\ &= \int dq |\psi_0(q) \phi_0(Q_0 - \frac{T}{\tau} q)|^2 = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle. \end{aligned}$$

Если начальное распределение вероятности для стрелки ($w_0(Q) = |\phi(Q)|^2$) было достаточно узко и локализовано около нуля, то конечное состояние частицы умножается на $\phi_0(Q_0 - \frac{T}{\tau} q)$ — узкий всплеск локализованный около измеренного значения координаты q , которое равно

$$q_0 = Q_0 \frac{\tau}{T}.$$

В пределе когда $\lim_{\tau \rightarrow 0} \phi_0(Q) = \delta(Q)$ мы получаем идеальное измерение величины с непрерывным спектром.

Можно рассмотреть более реалистичную процедуру обнаружения стрелки в чистом состоянии $\phi_1(Q) = f(Q_0 - Q)$. После такого измерения система попадает в факторизуемое состояние

$$|\phi_1\rangle \langle \phi_1 | \Phi_1\rangle,$$

а частица в состоянии

$$|\psi_{2f}\rangle = \langle \phi_1 | \Phi_1 \rangle.$$

Такое состояние можно назвать *относительным состоянием* частицы, относительно состояния $|\psi_1\rangle$ стрелки (см. (7.20) в 7.5.5 «Относительные состояния (ϕ^*)»).

Поскольку ϕ_1 — одночастичное состояние, а Φ_1 — двухчастичное, их скалярное произведение даёт не число, а одночастичное состояние.

$$\psi_{2f}(q) = \int dQ f^*(Q_0 - Q) \psi_0(q) \phi_0(Q - \frac{T}{\tau} q) = \left[\int dQ f^*(Q_0 - Q) \phi_0(Q - \frac{T}{\tau} q) \right] \psi_0(q).$$

$$\psi_{2f}(q) = F(q) \psi_0(q), \quad F(q) = \int dQ f^*(Q_0 - Q) \phi_0(Q - \frac{T}{\tau} q). \quad (8.1)$$

Таким образом, исходная волновая функция частицы в результате измерения умножается на *свёртку*² $\phi_0(\bullet - \frac{T}{\tau} q)$ и f^* .

²Свёртка $(f * g)$ двух функций f и g определяется соотношением

$$(f * g)(t) = \int_{\mathbb{R}} f(\tau) g(t - \tau) d\tau.$$

Например, при свёртке двух гауссовых пакетов

$$\phi_a = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}} \cdot e^{-\frac{Q^2}{2a^2}}, \quad \phi_b = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi b^2}} \cdot e^{-\frac{Q^2}{2b^2}}$$

шириной a и b получаем гауссов пакет шириной $c = \sqrt{a^2 + b^2}$

$$\sqrt[4]{\frac{4\pi a^2 b^2}{a^2 + b^2}} \phi_c = \sqrt{\frac{2ab}{a^2 + b^2}} \cdot e^{-\frac{Q^2}{2(a^2 + b^2)}} = \sqrt[4]{\frac{4\pi a^2 b^2}{a^2 + b^2}} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi(a^2 + b^2)}} \cdot e^{-\frac{Q^2}{2(a^2 + b^2)}}.$$

Если, f задаётся прямоугольным импульсом,

$$f(Q - Q_0) = \frac{1}{2\delta Q} \begin{cases} 1, & |Q - Q_0| \leq \delta Q \\ 0, & |Q - Q_0| > \delta Q \end{cases},$$

а ϕ_0 — гауссовым пакетом

$$\phi_0 = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}} \cdot e^{-\frac{Q^2}{2a^2}},$$

то в результате мы получаем сглаженный «почти прямоугольный» импульс шириной $2\delta Q$ с размытыми краями (a — ширина размытия), локализованный около точки Q_0 :

$$F(q) = \frac{1}{2\delta Q} \int_{-\delta Q}^{+\delta Q} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}} \cdot e^{-\frac{(Q - Q_0 - \frac{T}{\tau} q)^2}{2a^2}} dQ.$$

Ранее (уравнение (3.9) в разделе 3.1.4 «Распределения вероятностей и волновые функции при измерении») мы уже постулировали, что при измерении волновая функция умножается на прямоугольный импульс (характеристическую функцию), который «вырезает» из неё часть, соответствующую диапазону, в который попала измеренная величина. Теперь, путём анализа квантового процесса измерения с точки зрения квантовой механики, мы получили обобщение этого правила, которое допускает замену прямоугольного импульса на сглаженный импульс, либо на волновую функцию общего вида.³

Мы сдвинули границу между системой и наблюдателем, включив в систему «стрелку» прибора. Взаимодействие системы и стрелки мы рассмотрели в рамках унитарной квантовой механики (с помощью оператора эволюции). Однако результат измерения положения стрелки наблюдателем мы снова были вынуждены постулировать, как неунитарный процесс, не описываемый унитарной квантовой механикой.

Таким образом, мы «вывели» проекционный постулат для системы, но в качестве исходного положения использовали аналогичный проекционный постулат, но уже для стрелки прибора. Тем не менее, новый проекционный постулат имеет более общий вид, чем исходный. Теперь волновая функция получаемая при взаимоисключающих результатах измерения может быть уже не ортогональной. Однако по прежнему конечная волновая функция линейна по начальной.

³Замена характеристической функции на функцию $\mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ общего вида соответствует замене обычного множества, *нечётким множеством* (*fuzzy set*), когда для точек определяется не принадлежность/непринадлежность к множеству, а вероятность принадлежности. Впрочем, классические нечёткие множества не позволяют описать умножение на волновую функцию произвольного вида, а значит уместнее рассматривать *квантовые (нечёткие) множества*, для попадания точек в которые задаётся не вероятность, а амплитуда вероятности.

8.2 Возможна ли иная теория измерений? (фф)

Прежде всего следует отметить, что теория измерений состоит из двух частей:

- *формула для вероятности* определённого исхода измерения,
- *формула для волновой функции* после измерения с определённым исходом (*проекционный постулат*).

Статус этих двух частей теории измерений в рамках квантовой механики различен.

Формула для вероятностей едва ли может быть модифицирована. По всей видимости она столь же фундаментальна, как унитарная эволюция. Единственность этой формулы была выведена при определённых предположениях Эвереттом (см. раздел 8.2.1 «Эвереттовский “вывод” теории измерений»). Ниже мы продемонстрируем «жесткость» этой формулы с точки зрения отсутствия релятивистских парадоксов.

Проекционный постулат является естественным приближением. Мы можем рассматривать модифицированные теории измерений, в которых проекционный постулат изменён (см. правило (8.1) в разделе 8.1.1 «Измерительный прибор по фон Нейману**»), или в выводится из иных постулатов. (Если эти «иные постулаты» представляются кому-то более естественными.)

Помимо фундаментальных аспектов теории следует помнить и о простой корректности её применения: при анализе конкретного эксперимента надо аккуратно исследовать, *какие именно физические величины мы мерим на самом деле*.

8.2.1 Эвереттовский «вывод» теории измерений (фф*)

Если строить теорию измерений опираясь только на те понятия, которые уже были введены для описания эволюции замкнутой системы (линейное пространство чистых состояний, на котором задано скалярное произведение), то формула для вероятностей фиксируется однозначно при некоторых разумных (по крайней мере пока) предположениях.

Такого рода вывод был проделан Х. Эвереттом. Мы обобщим этот вывод и сформулируем в виде теоремы явно оговорив условия, которые были опущены Эвереттом.

Теорема Эверетта. Вероятность исходу измерения может быть приписана единственным способом

$$p_{\phi\psi} = \frac{|\langle\phi|\psi\rangle|^2}{\|\psi\|^2\|\phi\|^2} = \frac{\langle\psi|\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle}, \quad (8.2)$$

при условии, что

- Вероятность исхода $p_{\phi\psi} \in [0, 1]$ определяется только векторами состояния до измерения $|\psi\rangle$ и после измерения $|\phi\rangle$, причём состояния определяются с точностью до ненулевого множителя.
- Зависимость вероятности от состояний непрерывна.
- Вероятность инвариантна относительно произвольных унитарных преобразований пространства состояний.

- $p_{\psi\psi} = 1$.
- Суммарная вероятность равна 1, т.е. если дан максимальный набор взаимоисключающих чистых состояний $|\phi_i\rangle$ (ортогональный базис), то суммарная вероятность равна 1:

$$\sum_i p_{\phi_i\psi} = 1.$$

- Размерность пространства состояний не меньше 3.

Доказательство.

Поскольку состояния определены с точностью до ненулевого множителя, мы можем перейти к рассмотрению векторов состояний $|\tilde{\psi}\rangle$, $|\tilde{\phi}\rangle$, $|\tilde{\phi}_i\rangle$ нормированных на единицу. Более того, мы можем считать, что скалярное произведение $\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle$ вещественно и неотрицательно, т.е. $\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle = |\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle|$. Поскольку формула не должна зависеть от унитарных преобразований, искомая вероятность $p_{\phi\psi} = p_{\tilde{\phi}\tilde{\psi}}$ должна выражаться через скалярное произведение $\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle$, т.е.

$$p_{\phi\psi} = g(|\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle|^2) = g\left(\frac{\langle\psi|\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle}\right).$$

Для суммарной вероятности получаем

$$\sum_i g(|\langle\tilde{\phi}_i|\tilde{\psi}\rangle|^2) = 1 = \|\tilde{\psi}\|^2 = \sum_i \underbrace{|\langle\tilde{\phi}_i|\tilde{\psi}\rangle|^2}_{g_0(|\langle\tilde{\phi}_i|\tilde{\psi}\rangle|^2)}.$$

Ясно, что функция $g_0(|\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle|^2) = |\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle|^2$ удовлетворяет этому условию.

Заметим, что $g(0) = 0$, т.к. выбрав $|\phi_1\rangle = |\psi\rangle$ мы получаем

$$1 = \underbrace{1}_{g(1)} + \sum_{i \neq 1} g(0).$$

Покажем, что функция g единственна.

Мы всегда можем выбрать векторы $|\phi_i\rangle$ так, чтобы $|\psi\rangle$ принадлежал плоскости, натянутой на $|\phi_1\rangle$ и $|\phi_2\rangle$. Отсюда получаем, что

$$g(x) + g(1-x) = 1, \quad x = |\langle\phi_1|\psi\rangle|^2 \in [0, 1].$$

Отсюда $g(\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}$.

Мы всегда можем выбрать векторы $|\phi_i\rangle$ так, чтобы $|\psi\rangle$ принадлежал пространству, натянутому на $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$ и $|\phi_3\rangle$. Пусть $|\langle\phi_3|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}$. Отсюда получаем, что

$$g(x) + g(\frac{1}{2} - x) + \frac{1}{2} = 1, \quad x = |\langle\phi_1|\psi\rangle|^2 \in [0, \frac{1}{2}].$$

Отсюда $g(\frac{1}{4}) = \frac{1}{4}$.

$$\underbrace{g(\frac{1}{4}) + g(\frac{3}{4})}_{\frac{1}{4}} = 1 \Rightarrow g(\frac{3}{4}) = \frac{3}{4}.$$

Аналогично беря значение $|\langle\phi_3|\psi\rangle|^2$ в уже установленных точках мы можем показать, что

$$g\left(\frac{k}{2^n}\right) = \frac{k}{2^n}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad k = 0, 1, \dots, 2^n.$$

Это множество точек плотно на отрезке $[0, 1]$. Из непрерывности функции g заключаем, что $g(x) = x$, $x \in [0, 1]$.

Обсуждение.

Мы доказали теорему Эверетта используя весьма общие и естественные предположения. Если мы «верим в квантовую механику», т.е. если мы считаем, что разработанная для описания замкнутых систем унитарная квантовая механика в самом деле позволяет описать Вселенную вокруг нас, и нам не требуется вводить в теорию никаких новых ингредиентов, то теорема должна нас убедить, что никаких других формул для квантовой вероятности в принципе не может быть.

Однако в названии этого раздела слово «вывод» было взято в кавычки. Дело в том, что у нас нет достаточных оснований полагать, что процесс измерения описывается на языке унитарной квантовой механики, без введения дополнительных структур. Например, если процесс измерения характеризуется не только начальным и конечным состоянием системы, но и какими-то выделенными состояниями, характеризующими измерительную установку, то приведённое доказательство теоремы уже не работает (квантовая механика при этом могла бы даже оставаться унитарной). Тем более теорема не должна работать, если мы рассмотрим какое-либо нелинейное обобщение квантовой теории.

8.2.2 «Жёсткость» формулы для вероятностей (фф)

Можем ли мы тем или иным способом (см. например, раздел 9.3.9 «Активное сознание») управлять квантовыми случайностями, или хотя бы изменить квантовые вероятности по сравнению со стандартной формулой $|\psi_n|^2$?

Продemonстрируем на примере измерения системы (кубита), имеющей два базисных состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$, что управление вероятностями привело бы к возможности передавать информацию на расстоянии со сколь угодно большой скоростью, грубо нарушая постулаты специальной теории относительности.

Пусть наш кубит находится в состоянии зацепленном с другим кубитом:

$$|\Psi\rangle = \frac{|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (8.3)$$

Пусть первый кубит находится у Алисы, а второй у Бориса.

Алиса измеряет состояние своего кубита в базисе $|0\rangle, |1\rangle$. При этом кубит Бориса оказывается в том же состоянии, что и кубит Алисы:

$$|\Psi\rangle \longrightarrow |0\rangle|0\rangle \text{ или } |1\rangle|1\rangle.$$

Таким образом, управляя результатом своего измерения Алиса тем самым управляет результатом измерения, которое чуть позже производит Борис над своим кубитом.

Мы видим что, если почти на полпути между Алисой и Борисом есть источник запутанных кубитов, которые прилетают к Алисе чуть-чуть раньше, то Алиса может передавать Борису информацию на любое расстояние со сколь угодно малой задержкой! Для такой передачи не надо даже полностью управлять результатом измерения, достаточно лишь чуть-чуть сдвинуть вероятность в желаемую сторону, тогда повторив передачу несколько раз удастся передать Борису любое сообщение, закодирав его состояниями $|0\rangle$ и $|1\rangle$. А если сделать преобразование Лоренца, то окажется, что управляя вероятностями Алиса может передавать информацию не только со сверхсветовой скоростью, но и в прошлое.

Полученные противоречия со специальной теорией относительности позволяют сделать заключение, что квантовая формула для вероятностей является очень «жёстким» элементом квантовой теории. Попытки её модифицировать наверняка приведут к проблемам с причинностью (причина позже следствия). Соответствующая *Теорема о квантовой телепатии* доказывается ниже в разделе 8.2.3.

8.2.3 Теорема о квантовой телепатии (фф*)

Выше в разделе 8.2.2 «Жёсткость» формулы для вероятностей (фф)» мы показали, как отклонение от стандартных квантовых вероятностей для состояний определённого вида (8.3) позволяет осуществлять *квантовую телепатию* — сколь угодно быструю передачу информации посредством квантовых запутанных систем. Квантовая телепатия грубо противоречит специальной теории относительности, а следовательно её наличие оказывается проблемой для теории.

Обобщив эти рассуждения докажем (на физическом уровне строгости),

Теорему о квантовой телепатии:

Если для некоторой системы возможно проведение измерения, удовлетворяющего проекционному постулату, но нарушающему формулу для вероятностей, то можно построить запутанное состояние этой системы и двухуровневой системы (кубита), позволяющее осуществлять квантовую телепатию.

Пусть состояние системы, для которой мы можем нарушать правило вероятностей (осуществлять *неправильное измерение*) описывается некоторой волновой функцией $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Наблюдаемой величине $\hat{A}$, для которой мы можем осуществить наше неправильное измерение соответствует набор проекторов $\hat{P}_n$ на собственные подпространства $\mathcal{H}_n$. Мы имеем два распределения вероятностей по n : p'_n соответствует неправильному измерению, а p_n — правильному. Определим проектор $\hat{P}_+$ и соответствующее подпространство $\mathcal{H}_+$:

$$\hat{P}_+ = \sum_{n:p'_n > p_n} \hat{P}_n, \quad \mathcal{H}_+ = \bigoplus_{n:p'_n > p_n} \mathcal{H}_n = \hat{P}_+ \mathcal{H},$$

$$\hat{P}_- = \hat{1} - \hat{P}_+, \quad \mathcal{H}_- = \hat{P}_- \mathcal{H}.$$

Также мы можем определить вероятности p'_+ и p_+ отвечающие неправильному и правильному измерениям:

$$p'_+ = 1 - p'_- = \sum_{n:p'_n > p_n} p'_n, \quad p_+ = 1 - p_- = \sum_{n:p'_n > p_n} p_n.$$

Мы можем разложить наше состояние $|\psi\rangle$ на сумму двух членов:

$$|\psi\rangle = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle, \quad |\psi_+\rangle = \hat{P}_+ |\psi\rangle, \quad |\psi_-\rangle = \hat{P}_- |\psi\rangle.$$

Построим теперь следующее запутанное состояние:

$$|\Psi\rangle = |\psi_+\rangle|1\rangle + |\psi_-\rangle|0\rangle.$$

Наша исходная система находится в распоряжении Алисы, а кубит — в распоряжении Бориса.

При при неправильном измерении Алисой величины $\hat{A}$ кубит попадает в состояние $|1\rangle$ с вероятностью p'_+ и в состояние $|0\rangle$ с вероятностью p'_- . С этими же

вероятностями Борис обнаружит 1 или 0, производя (обычное) измерение своего кубита.

Если Борис делает измерение своего кубита раньше Алисы, то он получает 1 или 0 уже с другими вероятностями p_+ и p_- .

Располагая достаточным запасом систем в состоянии $|\Psi\rangle$ Алиса и Борис могут проводить измерения сразу над несколькими экземплярами системы. Борис при этом вычисляет вероятность получения 1 или 0 и определяет, сделал ли он свои измерения раньше Алисы (вероятность p_+ для 1) или позже Алисы (вероятность $p'_+ > p_+$ для 1).

Таким образом Алиса может передавать Борису информацию (осуществлять квантовую телепатию) измеряя (неправильным измерением) или не измеряя величину $\hat{A}$ в заранее оговоренные моменты времени для большого набора заранее подготовленных систем в состоянии $|\Psi\rangle$.

Грубое противоречие со специальной теорией относительности проявляется здесь и в другом результате: с помощью неправильного измерения Алиса и Борис могут ввести абсолютное понятие одновременности, что запрещено СТО.

8.2.4 «Мягкость» проекционного постулата (фф)

В отличие от формулы для вероятности проекционный постулат легко допускает различные модификации.

Например, если мы стартуем с обычного проекционного постулата, а потом объявим «волновой функцией после измерения» не ту волновую функцию, что получается сразу после измерения, а волновую функцию спустя малое время δt , то волновые функции полученные проекцией на собственные подпространства подвергнутся за это время «повороту» (действию унитарного оператора) $\hat{U}_{\delta t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t}$. Такой «поворот» пока не слишком интересен: он повернул собственные подпространства одного эрмитового оператора, превратив их в собственные подпространства другого эрмитового оператора. Такая модификация проекционного постулата всего лишь утверждает, что надо брать вероятности для одного эрмитового оператора, а собственные пространства — для другого эрмитового оператора, получаемого из первого унитарным преобразованием.

Легко получить и более сложные модификации. Пусть гамильтониан после измерения зависит от результата измерения. В этом случае каждое собственное подпространство «доворачивается» с помощью своего оператора эволюции $\hat{U}_{\delta t, n} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_n\delta t}$, где n — результат измерения. Теперь исходно ортогональные подпространства, на которые спроецировалась первоначальная волновая функция повернулись по-разному и перестали быть ортогональными. Таким образом, эти подпространства уже не являются собственными подпространствами какого-либо эрмитового оператора.

Мы можем формализовать эти модификации проекционного постулата, или придумывать и другие версии.

Впрочем, (см. также 8.1 «Моделирование измерительного прибора*») большинство таких модификаций в некотором смысле сводится к обычному проекционному постулату, путём различного проведения границы между прибором и объектом, перепутывания чистого измерения и унитарной эволюции, размытия момента измерения (непрерывное измерение) и т.п.⁴

⁴Однако поручиться, что это *всегда* так автор не берётся.

8.3 Декогеренция (фф)

Более подробное рассмотрение взаимодействия наблюдателя и прибора, включает в себя неконтролируемое взаимодействие прибора и среды (термостата). В результате микросистема, прибор и среда попадают в зацепленное состояние, и хотя состояние системы в целом (микросистема+прибор+среда) остаётся чистым (могло бы описываться волновой функцией), при описании только подсистемы микросистема+прибор мы должны применять язык смешанных состояний (матриц плотности). Этот процесс называют *декогеренцией*.

Доказывается, что матрица плотности, получаемая при описании прибора взаимодействующего со средой оказывается неотличимой от матрицы плотности, возникающей при неселективном измерении (стремится к диагональному виду в базисе конечных состояний). Многие авторы делают из этого вывод, что теория декогеренции позволяет вывести проекционный постулат теории квантовых измерений. Часто декогеренция рассматривается как альтернатива многомировой интерпретации квантовой механики, т.е. как *интерпретация квантовой механики с точки зрения декогеренции*. К преимуществу декогеренции перед прочими интерпретациями относят развитый математический аппарат, который в приложении к физическим задачам позволяет говорить о том, что декогеренция не просто интерпретирует ранее постулированные классиками принципы квантовой механики, но и позволяет их уточнять (ведь матрица плотности при декогеренции диагонализует лишь в пределе) и делать нетривиальные теоретические предсказания.

Однако рассмотрение процесса декогеренции прибора со средой на самом деле не позволяет вывести проекционный постулат, который относится к селективному измерению. Декогеренция описывает как различные исходы измерения отделяются друг от друга (как матрица плотности в базисе конечных состояний становится почти диагональной), но не объясняет как из всех возможных исходов измерения выбирается один.

Некоторые авторы при рассмотрении процесса декогеренции включают в систему (наряду с прибором) также наблюдателя. Они получают, что подсистема микросистема+прибор+наблюдатель описываются матрицей плотности близкой к диагональной, и делают вывод, что ими описан процесс редукции квантового состояния (выведен проекционный постулат). Однако это снова описание неселективного измерения, не объясняющее, как и почему из возможных альтернатив остаётся одна.

По существу рассмотрение декогеренции с участием наблюдателя следует рассматривать в рамках многомировой интерпретации квантовой механики (9.3.7 «Многомировая интерпретация Эверетта (фф)»), поскольку результат декогеренции описывает одновременное сосуществование всех возможных исходов измерения, а также предполагает возможность применения унитарной квантовой механики к Вселенной в целом. С этой точки зрения декогеренция не конкурирует с многомировой интерпретацией, а поддерживает и дополняет её.

Глава 9

На грани физики и философии (фф*)

Не читайте эту главу, особенно если вам предстоит сдача экзамена по квантовой механике. Если вы всё же решитесь её прочитать, то автор снимает с себя всякую ответственность за ваше психическое здоровье, а также за оценку полученную на экзамене. Если, вопреки совету, вы всё же заинтересовались интерпретациями квантовой механики, то избегайте обсуждать прочитанное с экзаменатором во время экзамена по теоретической физике. Впрочем, если вам предстоит сдача экзамена и/или реферата по философии, данная глава может оказаться полезной, особенно если вы также найдёте время для прочтения книги В.И. Ленина «Материализм и эмпириокритицизм».

М.Г. Иванов

Интерпретации квантовой находятся на грани физики и философии. Это приводит к тому, что здесь как и в философии большую роль играет субъективный взгляд исследователя: в одинаковые термины может вкладываться различный (порой существенно различный) смысл. *Автор не может гарантировать, что его изложение тех или иных интерпретаций и парадоксов квантовой механики в точности соответствует тому, как их понимали те физики, с чьим именем эти построения связаны. Автор излагает только своё понимание проблемы.*

9.1 Загадки и парадоксы квантовой механики (ф*)

— Все страньше и страньше! — вскричала Алиса. От изумления она совсем забыла, как нужно говорить.

Льюис Кэрролл, «Приключения Алисы в стране чудес»

В основаниях квантовой механике есть ряд загадок и парадоксов, связанных с пониманием процесса измерения. Загадочность проявляется также и в том, что разные физики считают парадоксами то, что для других представляется совершенно естественной особенностью теории, порой даже не заслуживающей упоминания.

9.1.1 Мышь Эйнштейна (Ф*)

— Гхе-гхе! — откашлялась с важным видом Мышь. — Все готовы? Тогда начнем.

Льюис Кэрролл, «Приключения Алисы в стране чудес»

Если квантовая теория верна, то Вселенная, как большая система элементарных частиц тоже должна описываться волновой функцией (спорное утверждение, см. раздел 9.3.2). Однако волновая функция меняется при наблюдении. Так неужели любая мышь сидящая тихонько где-то в уголке и наблюдающая окружающий мир меняет Вселенную?! Этот мысленный эксперимент называется «Мышь Эйнштейна».

Этот парадокс разрешается легче всего, причём разными способами, хотя его решения и порождают новые вопросы:

- Мы не имеем права писать волновую функцию Вселенной в целом, т.к. у нас для всей Вселенной нет внешнего наблюдателя. (Копенгагенская интерпретация) (Возражение, с которым не согласится сторонник эвереттовской интерпретации, для которого волновая функция существует вне зависимости от наблюдателя.)
- Наблюдатель в квантовой механике не должен быть составной частью системы, а значит если мы рассматриваем процесс наблюдения Вселенной Мышью, то волновую функцию следует писать для всей Вселенной, за исключением данной Мыши. Тогда Мышь наблюдая Вселенную действительно её изменяет.
- Мышь и Вселенная слишком тесно взаимодействуют. Таким образом измерение как бы происходит постоянно. Вместо волновой функции Вселенную с точки зрения Мыши следует описывать матрицей плотности. А матрица плотности уже содержит обычные (классические) вероятности к которым мы привыкли и в которых парадоксов нет. (Но это объяснение не говорит, как из разных альтернатив при измерении остаётся одна.)
- Матрица плотности для Вселенной предполагает усреднение по состояниям Мыши, но Мышь-то знает (хотя бы приблизительно) в каком она состоянии, а значит усреднять по всем состояниям Мыши нельзя, а надо всё-таки описывать Вселенную волновой функцией.
- Мы не имеем права писать «волновую функцию Вселенной» (и даже Вселенной за вычетом Мыши), т.к. Вселенная макроскопический объект. (Копенгагенская интерпретация)

9.1.2 Кот Шрёдингера (Ф*)

Другой мысленный эксперимент — «Кот Шрёдингера» показывает, какие трудности мы испытаем если попытаемся описать макроскопического наблюдателя (Кота) с точки зрения квантовой теории. Конечно, не все наблюдения сопряжены с таким риском, которому подвергается Кот, но существо парадокса от этого не меняется: система включающая наблюдателя оказывается в суперпозиции макроскопически различных состояний, в которых наблюдатель должен наблюдать существенно разные события.

Эксперимент «Кот Шрёдингера» был предложен Э. Шрёдингером в статье «Сегодняшнее положение дел в квантовой механике»¹, посвящённой обсуждению парадокса ЭПР. В этой же статье был введён термин или *запутанность*², означающий состояние, при котором волновая функция квантовой системы не может быть описана как произведение отдельных множителей. В экспериментах «Кот Шрёдингера» и 9.1.3 «Друг Вигнера» наглядно демонстрируется, как запутанность постепенно охватывает всю систему.

Итак, представим себе экспериментальную установку — «коробку» хорошо изолирующуюся от окружающего мира (чтобы на достаточно больших временах её состояние можно было описывать уравнением Шрёдингера). В коробку в начале помещается Кот, а также «адская машинка», устройство которой разные авторы описывают по-разному. Задача машинки — за время эксперимента убить или не убить Кота, причём решение должно быть принято квантово-случайным образом. Например Кот убивается (пулей, ядом, бомбой или как-либо иначе), если за время эксперимента распался единичный атом радиоактивного вещества, или если единичный фотон прошёл через полупрозрачное зеркало.

Для определённости рассмотрим ход эксперимента для «адской машинки» принимающую решение по судьбе единичного фотона и разбивающей или не разбивающей колбу с ядом. (Мы опускаем лишние детали, описывая лишь принципиальную схему.)

1. Источник испускает единичный фотон, который летит к полупрозрачному зеркалу (в состоянии $|\text{фотон}\rangle$). Примем этот момент за начало эксперимента. Колба в это время цела (в состоянии $|\text{колба}_0\rangle$), а Кот жив (в состоянии $|\text{жив}\rangle$). Такое состояние системы (мы его обозначим как $|\text{КОТ}_0\rangle$) описывается как

$$|\text{фотон}\rangle|\text{колба}_0\rangle|\text{жив}\rangle = |\text{КОТ}_0\rangle$$

2. Фотон попадает на полупрозрачное зеркало, после чего попадает в суперпозицию двух состояний $|\text{фотон}_0\rangle$ и $|\text{фотон}_1\rangle$, одно из которых отразилось от зеркала, а другое прошло сквозь зеркало. Всё остальное в коробке пока по-прежнему.

$$\frac{|\text{фотон}_0\rangle + |\text{фотон}_1\rangle}{\sqrt{2}} |\text{колба}_0\rangle |\text{жив}\rangle$$

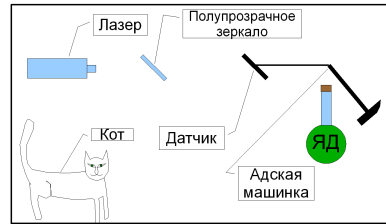


Рис. 9.1: Установка для проведения мысленного эксперимента «Кот Шрёдингера».

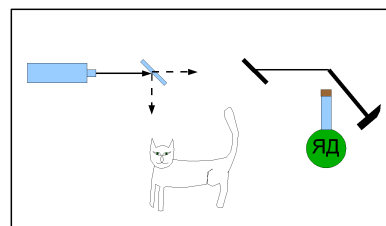


Рис. 9.2: Фотон расщепляется зеркалом...

¹E. Schrödinger: «Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik», Naturwissenschaften, **48**, 807, **49**, 823, **50**, 844 (November 1935).

²По-немецки: Verschränkung, по-английски: entanglement.

Ничего необратимого пока не произошло. Если бы вместо датчиков на пути $|\text{фотон}_0\rangle$ и $|\text{фотон}_1\rangle$ стояли зеркала, отклоняющие их на второе полупрозрачное зеркало, то с помощью такого интерферометра (должным образом настроенного) фотон снова можно «собрать» в состояние $|\text{фотон}_2\rangle$, в котором его положение собрано в одной маленькой области пространства, а не размазано между двумя удалёнными областями. См. рис.9.3.

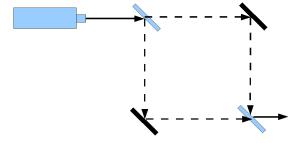


Рис. 9.3: Интерферометр Маха-Цандера может снова собрать фотон в один волновой пакет.

3. Состояние $|\text{фотон}_1\rangle$ запускает датчик, который разбивает колбу с синильной кислотой (переводит её в разбитое состояние $|\text{колба}_1\rangle$). Состояние $|\text{фотон}_0\rangle$ летит дальше. Состояния фотона и колбы зацеплены.

$$\frac{|\text{фотон}_0\rangle|\text{колба}_0\rangle + |\text{фотон}_1\rangle|\text{колба}_1\rangle}{\sqrt{2}} |\text{жив}\rangle$$

4. Разбитая колба (в состоянии $|\text{колба}_1\rangle$) убивает Кота (переводит его в состояние $|\text{мёртв}\rangle$). Целая колба (в состоянии $|\text{колба}_0\rangle$) Кота не трогает. Теперь зацеплены состояния не только фотона и колбы, но и Кота.

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\text{фотон}_0\rangle|\text{колба}_0\rangle|\text{жив}\rangle + |\text{фотон}_1\rangle|\text{колба}_1\rangle|\text{мёртв}\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\text{ЖИВ}\rangle + |\text{МЁРТВ}\rangle)$$

5. Экспериментатор готовится открыть коробку. Он рассчитал, что состояние коробки — суперпозиция двух состояний, в одном из которых Кот жив, а в другом — мёртв. Он недоумевает, как Кот (объект макроскопический, и даже почти разумный) мог оказаться в таком странном состоянии. Что же ощущает Кот, который в буквальном смысле «ни жив, ни мёртв»?

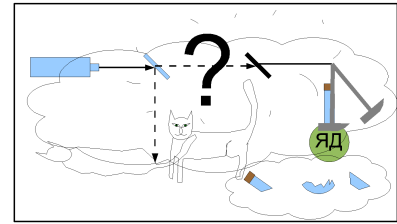


Рис. 9.4: Суперпозиция двух макроскопически различных состояний?

6. Экспериментатор (предварительно одев противогаз) открыл коробку и произвёл измерение, устанавливающее состояние Кота. С равными вероятностями $\frac{1}{2}$ в коробке обнаруживается одно из двух состояний

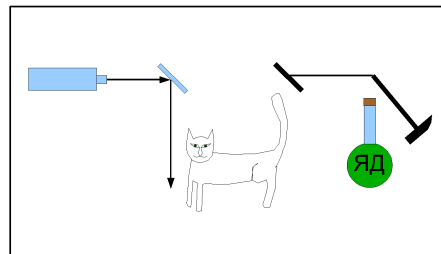


Рис. 9.5: Состояние $|\text{ЖИВ}\rangle$ (Кот жив).

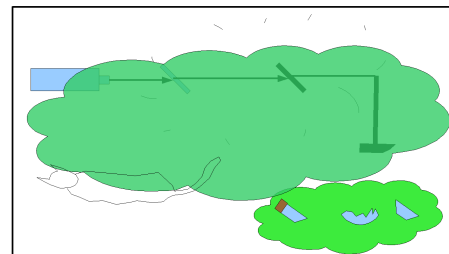


Рис. 9.6: Состояние $|\text{МЁРТВ}\rangle$ (Кот мёртв).

$$|\text{ЖИВ}\rangle = |\text{фотон}_0\rangle|\text{колба}_0\rangle|\text{жив}\rangle,$$

или

$$|\text{МЁРТВ}\rangle = |\text{фотон}_1\rangle|\text{колба}_1\rangle|\text{мёртв}\rangle.$$

Таким образом, измерение снова расцепило состояния фотона, колбы и Кота.

Результат эксперимента не содержит ничего квантового, кроме вероятности, но как быть, со странными состояниями, возникающими при его квантовомеханическом описанием?

Конечно, с точки зрения копенгагенской интерпретации макроскопическую систему, включающую колбу и кота нельзя описывать волновой функцией, но где граница микро- и макро-миров? Один «раздвоившийся» фотон мы можем рассматривать квантовомеханически, а «раздвоившегося» Кота уже нет. Почему?

Мы можем объяснить это и не отказываясь от квантовомеханического описания Кота. Раздвоившийся фотон мы обязаны рассматривать квантовомеханически, т.к. мы можем с помощью интерферометра привести оба состояния, составляющие суперпозицию в одно состояние, в котором будет уже принципиально невозможно различить каким образом фотон туда попал. С Котом сложнее. Чтобы проявить его квантовомеханические свойства нам надо привести состояния $|\text{ЖИВ}\rangle$ и $|\text{МЁРТВ}\rangle$ к в точности одному квантовому состоянию $|\text{КОТ}'\rangle$ (точнее здесь надо говорить о состоянии всего содержимого коробки). Причём не должно быть даже теоретической возможности определить, через какое из двух возможных промежуточных состояний Кот попал в конечное состояние $|\text{КОТ}'\rangle$. Конечно, экспериментатор может убить живого Кота, но чтобы проявились квантовые эффекты это надо сделать так, чтобы по-разному убитый Кот был в точности в одном мёртвом состоянии, и даже сам экспериментатор не должен знать (и не должен иметь возможность узнать), каким именно образом Кот погиб. Так что строить интерферометры на котах существенно сложнее, чем на фотонах.³

9.1.3 Друг Вигнера (Φ^*)

В эксперименте с Котом Шрёдингера присутствуют два макроскопических наблюдателя, один из которых экспериментатор, а другой — Кот.

Вопрос о том, что квантовая механика может нам предложить, для случая, когда один эксперимент наблюдают несколько наблюдателей развивает мысленный эксперимент «Друг Вигнера».

Почему Вигнер и его Друг, вместе ставящие эксперимент наблюдают одни и те же результаты? Почему каждый из них не может редуцировать волновую функцию по-своему и получить разные результаты опыта?

Для рассмотрения эксперимента «Друг Вигнера» нам придётся включить в квантовую систему по крайней мере одного наблюдателя из двух. Пусть, например, Вигнер и Друг вместе ставят опыт «Кот Шрёдингера», причём в открытую коробку первым заглядывает Друг. Включим друга в состав системы, которая описывается волновой функцией, а Вигнера будем рассматривать как наблюдателя. Тогда мы можем записать начальную волновую функцию системы так:

$$|\cdot\rangle|\text{КОТ}_0\rangle$$

После того, как «адская машинка» в коробке сработала или не сработала $|\text{КОТ}_0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|\text{ЖИВ}\rangle + |\text{МЁРТВ}\rangle)$ и система в целом (включая Друга) описывается как

$$|\cdot\rangle \frac{|\text{ЖИВ}\rangle + |\text{МЁРТВ}\rangle}{\sqrt{2}}.$$

³Хотя, и в описываемом эксперименте может быть квантовая неопределённость в том, когда именно фотон был испущен. Так что время смерти Кота в может быть определено только с конечной точностью, предел которой накладывает квантовая механика поскольку, строго говоря, один и тот же Кот погиб в различные моменты времени.

Друг наблюдающий живого Кота переходит из состояния $|\vdash\rangle$ в радостное состояние $|\smile\rangle$, а друг наблюдающий мёртвого Кота в грустное состояние $|\frown\rangle$. Таким образом система в целом переходит в запутанное состояние

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\smile\rangle|\text{ЖИВ}\rangle + |\frown\rangle|\text{МЁРТВ}\rangle). \quad (9.1)$$

Второй наблюдатель («Вигнер»), проводящий измерение над системой обнаруживает с равной вероятностью $\frac{1}{2}$ одно из двух классически допустимых состояний⁴

$$|\smile\rangle|\text{ЖИВ}\rangle,$$

или

$$|\frown\rangle|\text{МЁРТВ}\rangle.$$

Таким образом, обнаружение живого Кота однозначно влечёт за собой нахождение Друга в радостном состоянии $|\smile\rangle$, а обнаружение мёртвого кота — нахождение Друга в грустном состоянии $|\frown\rangle$.

Мы можем развить наши рассуждения, включив обоих наблюдателей в состав системы, описываемой волновой функцией. При этом следует также позвать третьего наблюдателя, внешнего по отношению к системе (с его точки зрения будет писаться волновая функция).

Теперь последовательность состояний выглядит так.

1. В начале эксперимента:

$$|\vdash_2\rangle|\vdash_1\rangle|\text{КОТ}_0\rangle$$

2. Перед открыванием коробки:

$$|\vdash_2\rangle|\vdash_1\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}(|\text{ЖИВ}\rangle + |\text{МЁРТВ}\rangle)$$

3. После того, как в коробку заглянул Друг и вовлекается в квантовое зацепление с Котом:

$$|\vdash_2\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}(|\smile_1\rangle|\text{ЖИВ}\rangle + |\frown_1\rangle|\text{МЁРТВ}\rangle)$$

4. После того, как в коробку заглянул второй наблюдатель он тоже вовлекается в квантовое зацепление наряду с Другом и Котом:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\smile_2\rangle|\smile_1\rangle|\text{ЖИВ}\rangle + |\frown_2\rangle|\frown_1\rangle|\text{МЁРТВ}\rangle)$$

Таким образом третий наблюдатель всегда обнаруживает первых двух либо в состоянии $|\smile_2\rangle|\smile_1\rangle$, либо в состоянии $|\frown_2\rangle|\frown_1\rangle$, т.е. в полном согласии относительно того, жив или мёртв Кот.

⁴Мы можем разложить состояние (9.1) и по другим базисам, но для них будет очень трудно придумать процедуру измерения.

9.2 Как неправильно понимать квантовую механику? (фф)

Эксперт — это человек, который совершил все возможные ошибки в некотором узком поле.

Нильс Бор W

Учась правильно понимать квантовую механику полезно также знать основные способы её неправильного понимания. В данном случае мы говорим о напрашивающихся по своему самоочевидных интерпретациях квантовой механики, которые тем не менее, противоречат эксперименту. Эти интерпретации заслуживают того, чтобы с ними познакомиться и не только как с «типичными ошибками». «Неправильные» интерпретации часто создавались глубокими мыслителями, и идеи некоторых из них можно развить до последовательного взгляда, не противоречащего наблюдательным данным.

9.2.1 Частица как волновой пакет (фф)

Квантовая механика (унитарная эволюция) одной частицы выглядит как классическая теория поля, для поля волновой функции данной частицы. Возникает соблазн объяснить корпускулярно-волновой дуализм просто отождествив частицу с волновым пакетом. Волновой пакет может быть локализован в достаточно узкой области как по пространственным координатам, так и по импульсу и его поведение на не слишком больших временах напоминает поведение частицы.

Для студентов знакомых с нелинейной теорией поля соблазн ещё сильнее: нелинейная теория может допускать нерасплывающиеся волновые пакеты — *солитоны*. Конечно, квантовая механика линейна, но опыт классической физики учит нас, что линейная теория обычно оказывается лишь приближением более точной нелинейной теории...

Однако такой прямолинейный подход оказывается неверным сразу по нескольким причинам:

- многочастичная волновая функция задаётся не в обычном трёхмерном пространстве, а в $3N$ -мерном конфигурационном пространстве;
- ширина волнового пакета не может быть отождествлена с размером частицы:
 - сколь угодно узкий волновой пакет для большинства гамильтонианов расплывается за конечное время до макроскопической ширины;
 - вне зависимости от ширины волнового пакета измерение обнаруживает одну и ту же частицу (почти точечную);
 - волновой пакет может расщепляться на несколько частей, удалённых друг от друга на макроскопические расстояния, но при этом эксперимент обнаруживает только одну частицу;
- линейность квантовой механики (принцип суперпозиции) подтверждена с очень высокой точностью.

Впрочем, представление о частице, как о волновом пакете возрождается *на новом уровне* при переходе к квантовой теории поля (КТП). При переходе от многочастичных нерелятивистских уравнений Шрёдингера к релятивистским уравнениям Дирака или Клейна-Фока-Гордона волновая функция на конфигурационном пространстве заменяется квантовым полем, заданном в обычном трёхмерном пространстве (как одночастичная волновая функция). Причём квантовое поле может быть нелинейным, а значит могут возникать и солитонные (нерасплывающиеся) волновые пакеты. Однако квантовое поле — не волновая функция. Теперь волновая функция описывает состояние не частиц, а поля, соответствующее полю конфигурационное пространство оказывается и вовсе бесконечномерным. Состоянию, содержащему отдельные частицы, действительно могут соответствовать волновые пакеты, но размеры этих пакетов по-прежнему никак не связаны с размерами частицы. В КТП мы действительно можем пытаться описать частицы как солитоны, но линейности квантовой эволюции (линейной суперпозиции) это не отменяет, и положение частицы-солитона может в свою очередь описываться волновым пакетом, размазанным по пространству произвольным образом.

9.2.2 «Теория» квантового заговора (фф)

Бог изощрён, но не злонамерен.

А. Эйнштейн W

Может бы, Господь всё-таки злонамерен.

А. Эйнштейн W

Квантовая частица в различных экспериментах может проявлять волновые и/или корпускулярные свойства, причём проявления тех или иных свойств зависят от устройства экспериментальной установки. «Теория» квантового заговора (также «теория заговора в применении к физической реальности») предполагает, что частица каким-то образом заранее узнаёт о том, как устроена измерительная установка и ведёт себя соответствующим образом, превращаясь в волну или корпускулу, в зависимости от того, какие свойства есть возможность проявить.

Конечно, рассуждения о квантовом заговоре звучат совершенно дико, однако на фоне других диких квантовых представлений, которые тем не менее получили экспериментальное подтверждение, теория заговора выглядит вполне заурядно.

«Теория» квантового заговора сама по себе не является физической теорией, более того, при последовательном применении такая «теория», подобно «теории бога» способна объяснить что угодно, но не способна ничего предсказать. Поэтому для того, чтобы ставить эксперимент по проверке теории заговора её следует дополнить какими-то предположениями о том, как именно частица подсматривает за экспериментатором.

Квантовый заговор и эксперимент с отложенным выбором (фф)

Если предположить, что частица принимает решение о том, быть ей волной или корпускулой в момент вылета из источника, то появляется возможность экспериментальной проверки. Если быстро (уже после того, как частица вылетела)

изменить конструкцию установки, то можно надеяться, что частица не успеет обернуться из волны в корпускулу или наоборот. Для того, чтобы предыдущая частица не подсказала следующей конструкцию установки, конструкция должна меняться случайным образом для каждой новой частицы.

Такой эксперимент, предложенный в 1978 году Джоном Уилером, был назван экспериментом с отложенным выбором⁵ и был позднее реализован.⁶

Понятно, что эксперимент не закрывает возможностей построения более изощрённых теорий квантового заговора.

Квантовый заговор и «социология материи» (фф)

В апрельском номере журнала «Успехи физических наук» за 2001 год в рубрике «Письма в редакцию» под общим заголовком «Отклики читателей на статью М.Б. Менского “Квантовая механика: новые эксперименты, новые приложения и новые формулировки старых вопросов”» была помещена подборка коротких статей об интерпретациях квантовой механики, представляющая собой ценный источник примеров того, как не надо понимать квантовую механику. Среди этих заметок была статья Рауля Нахмансона, представляющая теория квантового заговора в концентрированном виде.⁷

В статье предлагается, что элементарные частицы представляют собой разумные существа, способные обмениваться информацией со сверхсветовой скоростью и за счёт этого «дурачить» экспериментатора, сговорившись следовать предсказаниям квантовой теории. Автором используются даже слова «цивилизация частиц».

Любопытно, что при этом автором предлагаются вполне осуществимые эксперименты по проверке предлагаемой гипотезы. Предлагается установить с частицами контакт (или хотя бы выработать у них условный рефлекс), общаясь с ними с помощью азбуки Морзе (или другого двоичного кода). Экспериментатор передаёт информацию частице предлагая ей проходить через пластинки разной толщины, а частица передаёт информацию экспериментатору выбирая отразиться от полупрозрачного зеркала, или пройти насквозь.

⁵Wheeler J.A. In Mathematical Foundations of Quantum Mechanics. Edited by A.R. Marlow. New York: Academic Press, Pp. 948, 1978. Ссылка взята из книги Дж. Гринштейн и А. Зайонц «Квантовый вызов», Глава 2 «Фотоны», отсюда же взята и следующая ссылка

⁶Hellmuth T., Walter H., Zajonc A. and Schleich W. Delayed-choice experiments in quantum interference. Phys. Rev. A. Vol. 35. Pp. 2532–2541, 1987.

Alley C.O., Jakubowicz O., Steggerda C.A. and Wickes W.C. A delayed random choice quantummechanic experiment with light quanta. Proceedings of the International Symposium on the Foundations of Quantum Mechanics — Tokyo. Edited by S. Kamefuchi. Physics Society of Japan. Pp. 158–164, 1983.

⁷Р.С. Нахмансон «Физическая интерпретация квантовой механики» УФН, т. 7, №4, стр. 441–444. Как показал поиск по интернету, данная публикация не является первоапрельской шуткой. Р.С. Нахмансон на протяжении многих лет последовательно развивает свою интерпретацию квантовой механики как «социологии материи».

9.2.3 «Смерть реальности» и парадокс ЭПР(фф)

«Материя исчезает» — это значит исчезает тот предел, до которого мы знали материю до сих пор, наше знание идёт глубже; исчезают такие свойства материи, которые казались раньше абсолютными, неизменными, первоначальными (непроницаемость, инерция, масса и т.п.) и которые теперь обнаруживаются, как относительные, присущие только некоторым состояниям материи. Ибо *единственное* «свойство» материи, с признанием которого был связан философский материализм, есть свойство *быть объективной реальностью*, существовать вне нашего сознания.

В.И. Ленин, «Материализм и эмпириокритицизм», глава V
«Новейшая революция в естествознании и философский идеализм»

Современные разговоры про «смерть реальности» в квантовой механике берут своё начало от знаменитой статьи ЭПР — Эйнштейна-Подольского-Розена 1935 года.⁸ Всё началось со следующей фразы:

Если мы можем, без какого бы то ни было возмущения системы, предсказать с достоверностью (т.е. с вероятностью, равной единице) значение некоторой физической величины, то существует элемент физической реальности, соответствующий этой физической величине.

Далее в статье в качестве измерения «без какого бы то ни было возмущения системы» понимается измерение выполняемое не на прямую над интересующим экспериментатора объектом, а над другим объектом, состояние которого зацеплено (скоррелировано) с состоянием исследуемого объекта. Такое измерение действительно считалось бы выполненным «без какого бы то ни было возмущения системы» в классической физике, но в квантовой теории такое измерение изменяет волновую функцию системы (общую волновую функцию обоих подсистем) и не может считаться невозмущающим.

Слова «предсказать с достоверностью (т.е. с вероятностью, равной единице)» при этом читаются как «предсказать после проведения измерения».

Как было показано в статье ЭПР, и во многих последующих теоретических и экспериментальных работах, в квантовой механике не всякой измеряемой можно приписать «элемент реальности» в указанном выше смысле, причём эксперименты согласуются с предсказаниями квантовой механики, а не с классическими представлениями о локальности и причинности: действительно, измерение, выполняемое над одной частью системы мгновенно, без передачи каких бы то ни было взаимодействий, влияет на другую часть системы (квантовая нелокальность), если исходное состояние системы не представимо в виде произведения состояний подсистем. (См. 7.5.6 «Неравенство Белла и его нарушение (фф*)».)

Когда в какой-либо научной публикации говорится, что квантовая механика показала «отсутствие физической реальности», то на самом деле имеется в виду

⁸ *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be considered complete?* A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, Phys.Rev., 1935, **47**, 777–780. Цитируется по сборнику Альберт Эйнштейн. Собрание научных трудов, М. «Наука», 1966

квантовая нелокальность. Также «эксперименты по проверке существования физической реальности» означают на самом деле эксперименты по проверке существования квантовой нелокальности.



Рис. 9.7: Альберт Эйнштейн и Нильс Бор во время Сольвеевского конгресса в 1930 г. (Брюссель) — разгар знаменитого спора. [фото П.С. Эренфеста. W]

Означает ли это «смерть реальности»? Разумеется нет. Это лишь означает, что данное понимание «элемента реальности» оказалось неудачным, и нам надо по-другому (в соответствии с результатами экспериментов и описывающей их теорией) определить, что же является для нас необходимым свойством физической реальности. Именно такого пересмотра понятий, для приведения их в согласие с результатами научных исследований требует от нас последовательный материализм («реализм», как его модно называть среди зарубежных авторов, стесняющихся марксистских ассоциаций со словом материализм).

Этого же требует от нас научная методология: физика как экспериментальная наука должна согласовывать свои понятия с результатами экспериментов, и пересматривать те понятия, которые не соответствуют эксперименту, сколь бы привлекательными эти понятия не казались с точки зрения априорных (философских, эстетических, и др.) предпочтений исследователя.

Если физик отвергает это методологическое требование, то он рискует выпасть из науки и скатиться в лучшем случае в область чистой математики, а в худшем — по примеру средневековых схоластов заняться подсчётом чертей и ангелов на кончике иглы.

Интересно, что сам Эйнштейн в данном вопросе последовательно придерживается научной методологии и оказывается проницательнее многих современных учёных. Это видно если расширить приведённую выше цитату, включив в неё все оговорки, которые её сопровождают:

Элементы физической реальности не могут быть определены при помощи априорных философских рассуждений; они должны быть найдены на основе результатов экспериментов и наблюдений. Однако для наших целей нет необходимости давать исчерпывающее определение реальности. Мы удовлетворимся следующим критерием, который считаем разумным. *Если мы можем, без какого бы то ни было возмущения системы, предсказать с достоверностью (т.е. с вероятностью, равной единице) значение некоторой физической величины, то существует элемент физической реальности, соответствующий этой физической величине.* Нам кажется, что этот критерий, хотя он далеко не исчерпывает всех возможных способов распознавания физической реальности, по крайней мере, даёт нам один из таких способов, коль скоро выпол-

няются сформулированные в нём условия. Этот критерий, рассматриваемый не как необходимое, а только лишь как достаточное условие реальности, находится в согласии как с классическим, так и с квантовомеханическим представлением о реальности.

А. Эйнштейн, Б. Подольский, Н. Розен, «Можно ли считать квантовомеханическое описание физической реальности полным?»

Статья ЭПР явилась одной из самых важных статей в истории квантовой физики. Возможно именно эту статью, венчающую многолетнюю дискуссию Бора и Эйнштейна по основаниям квантовой механики, следует считать главным вкладом Эйнштейна в квантовую теорию. Не случайно зацепленные состояния квантовых систем часто называют *ЭПР-состояниями*. В последствии анализ парадокса ЭПР привёл к формулировке чёткого критерия, позволяющего отличить квантовую теорию, от локальной теории со скрытыми параметрами. Этот критерий — *неравенство Белла* был сформулирован Джоном Беллом в 1964 году. В 1982 году нарушение неравенств Белла было продемонстрировано на эксперименте Аспектом. С тех пор разговоры про «смерть реальности» стали подкрепляться ссылками на эксперименты Аспекта, как *экспериментальное подтверждение отсутствия физической реальности* (само по себе это выражение должно представляться абсурдным).

9.3 Интерпретации квантовой механики (ф)

9.3.1 Статистические интерпретации (ф)

В литературе по квантовой механике, а также при общении с физиками часто приходится слышать про *статистическую интерпретацию квантовой механики*.

В эти слова может вкладываться очень разный смысл:

- Может иметься в виду *статистическая интерпретация волновой функции*, т.е. борновское правило для вычисления вероятностей различных исходов измерения. Такое понимание статистической интерпретации уже давно следует относить не к философии физики, а к самой физике. Правило Борна — давно и надёжно установленный физический закон.
- *Статистическая интерпретация* может пониматься как синоним *копенгагенской интерпретации* (см. ниже), понимаемой в том или ином смысле. Так в двухтомнике А. Мессиа⁹ упоминается «статистическая интерпретация квантовой механики копенгагенской школы».
- Статистическая интерпретация может пониматься как самостоятельная интерпретация квантовой механики.

Вне зависимости от смысла, который вкладывается в слова *статистическая интерпретация*, часто подчёркивается, что *волновая функция или матрица плотности не применимы к единичной системе, а должны применяться исключительно к статистическому ансамблю не взаимодействующих между собой одинаково приготовленных квантовых систем*.

⁹ Альберт Мессиа, Квантовая механика, М.Наука, 1978, том 1, стр. 57

Это требование связано с невозможностью экспериментального определения распределения вероятностей (волновой функции, матрицы плотности) для единичной системы. В связи с этим само понятие вероятности для единичной системы *объявляется* неприменимым.

Иногда говоря о статистической интерпретации и необходимости ансамбля неявно подразумевают интерпретацию в терминах скрытых параметров, на незнание которых можно было бы списать возникновение квантовых вероятностей.

Следует заметить, что для любого известного чистого состояния квантовой системы можно построить наблюдаемую величину, для которой данное состояние было бы собственным. Измерение такой величины с вероятностью 1 обнаружило бы систему в исходном состоянии. С учётом того, что чистое квантовое состояние принято считать максимально полным описание квантовой системы, необходимость статистического ансамбля для определения квантового состояния представляется сомнительной.

Другой аргумент против необходимости статистического ансамбля исходит из многомировой интерпретации квантовой механики (см. раздел 9.3.7). Согласно многомировой интерпретации в различных параллельных мирах реализуются все возможные исходы измерения (из которых мы наблюдаем только один, который соответствует нашему миру), что даёт нам статистический ансамбль миров, в которых *одна* система ведёт себя всеми возможными способами. Впрочем, набрать экспериментальную статистику параллельные миры всё равно не позволяют, хотя и позволяет *думать* о вероятностях применительно к единичной системе.

Требование наличия статистического ансамбля совпадает с общим научно-методологическим требованием подкрепления экспериментального результата достаточной статистикой. По этой причине оно не налагает никаких дополнительных требований на проведение эксперимента и его интерпретацию.

9.3.2 Копенгагенская интерпретация. Разумное самоограничение (Ф)

Согласно копенгагенской интерпретации квантовой механики, разработанной Нильсом Бором, парадоксы квантовой механики по большей части сразу отменяются как нефизические.

Впрочем, разные физики называют «копенгагенскими» существенно разные интерпретации, общая черта которых — отказ от распространения квантовой механики на системы, для которых она заведомо не проверяема (по крайней мере, *пока* не проверяема). Мы приведём здесь две интерпретации, которые условно назовём «старая копенгагенская» (вероятно именно она ближе к воззрениям Бора, поэтому именно её мы будем подразумевать, говоря о «копенгагенской интерпретации» без уточнений) и «новая копенгагенская».

«Старая копенгагенская» интерпретация (Ф)

Старая копенгагенская интерпретация утверждает, что для того, чтобы можно было применять квантовую механику, нам необходимо выделить:

- *микроскопическую систему*, которая будет описываться с помощью квантовой механики,
- *макроскопического наблюдателя*, который будет описываться с помощью классической физики.

Многие авторы специально подчёркивают (в рамках старой копенгагенской интерпретации), что *классическая физика необходима для формулировки квантовой механики* для описания классического наблюдателя. При этом квантовая механика противопоставляется другим теориям (таким, как теория относительности), которые могут быть сформулированы без отсылки к более частным теориям, которые получают в как те или иные предельные случаи.

В старой копенгагенской интерпретации объявляются некорректными:

- попытки рассмотрения с точки зрения квантовой механики *макроскопических систем* (в том числе, всех систем, включающих в свой состав макроскопических наблюдателей),
- попытки рассмотрения систем *без помощи классического наблюдателя*, с точки зрения которого пишется волновая функция.

В частности, квантовое описание наблюдателя либо запрещается, либо переносит проблему наблюдения на следующий уровень:

- моделировать *макроскопического* наблюдателя (или прибор) с точки зрения квантовой механики нельзя,
- моделировать *микроскопического* наблюдателя (или прибор) с точки зрения квантовой механики можно, но при этом надо дополнительно вводить *макроскопического* наблюдателя, который наблюдает за системой включающей микронаблюдателя.

Попытки писать волновую функцию Вселенной запрещаются сразу по двум причинам:

- нельзя ввести наблюдателя, внешнего по отношению ко Вселенной, а значит некому проводить измерения и волновая функция (как амплитуда вероятности) теряет физический смысл,
- Вселенная (даже если исключить из неё наблюдателя) является макроскопической системой, поэтому квантовая механика к ней не применима.

«Новая копенгагенская» интерпретация (ф)

Новая копенгагенская интерпретация утверждает, что *квантовая механика — теория замкнутых систем*. Точнее систем, которые можно считать замкнутыми в некотором приближении. Условие замкнутости системы относится к той части квантовой механики, которая описывает унитарную эволюцию.

Теория измерений (проекционный постулат и его модификации) в этом случае рассматривается как *приблизённая теория* поведения первоначально замкнутой системы, которая подвергается *кратковременному внешнему возмущению* определённого вида, после чего вновь становится замкнутой.

Формула для вычисления вероятностей, в отличие от остальной теории измерений как правило признаётся фундаментальной, наравне с унитарной эволюцией. (См. раздел 8.2 «Возможна ли иная теория измерений?»)

С такой точки зрения, теория измерений (проекционный постулат и т.п.) оказывается некой феноменологической моделью с весьма зыбкими границами применимости, в отличие от собственно квантовой механики (унитарной эволюции), которая выступает в роли фундаментальной физической теории.

Таким образом, объявляются некорректными:

- попытки рассмотрения с точки зрения квантовой механики *незамкнутых систем*, в число которых попадают практически все *макроскопические системы* (в том числе, все системы, включающие в свой состав макроскопических наблюдателей).

В частности, квантовое описание наблюдателя либо запрещается, либо переносит проблему наблюдения на следующий уровень:

- моделировать *макроскопического* наблюдателя (или прибор) с точки зрения квантовой механики нельзя, т.к. система оказывается незамкнутой,
- моделировать *микроскопического* наблюдателя (или прибор) с точки зрения квантовой механики можно в том случае, если система вместе с микроприбором оказывает почти замкнутой.

Попытки писать волновую функцию Вселенной запрещаются, поскольку

- Вселенную нельзя рассматривать как замкнутую систему.¹⁰

9.3.3 Квантовые теории со скрытыми параметрами (фф)

На заре квантовой механики были популярными попытки объяснения квантовых вероятностей в классическом духе — как следствия незнания наблюдателем полного состояния квантовой системы. Подразумевалось, что возможно создание некоторой более общей, чем квантовая механика теории, в которой полное описание состояния системы включает в себя некоторые переменные, которые имеют вполне однозначные значения, но которые не могут быть измерены (*скрытые параметры*).

Теория со скрытыми параметрами должна быть полностью детерминистичной (для того, кто знает все скрытые параметры), т.к. все вероятности в ней обусловлены незнанием скрытых параметров.

Как было показано Беллом и продемонстрировано на эксперименте Аспектом предсказания квантовой механики не совместимы с *локальной* теорией со скрытыми параметрами. Таким образом, любая теория со скрытыми параметрами, из которой может быть выведена квантовая механика, должна допускать действие на расстоянии, связанное с квантовыми корреляциями (квантовой нелокальностью).

Следует специально отметить, что практически все самодельные «квантовые» теории которые периодически попадали автору на отзыв представляли собой *локальные теории со скрытыми параметрами*. Обычно эти «теории» были плохо разработаны математически: порой попусту тратя труд на отзыв сопровождалось предложением поделить нобелевской



Рис. 9.8: Давид Джо-
зеф Бом (1917-1992)
W



Рис. 9.9: Андрей
Юрьевич Хренников

¹⁰ Утверждение, что Вселенную нельзя рассматривать как замкнутую систему, достаточно спорно. В частности положившая начало научной космологии общая теория относительности, — одна из немногих теорий способных сказать что-то содержательное о Вселенной как целом, — допускает замкнутые космологические решения, соответствующие которым Вселенные следует рассматривать как замкнутые системы.

премией в обмен на помощь с математикой. Стандартная самодельная «квантовая теория» — это теория «эфирных вихрей». Вся «квантовость» такой теории сводится к дискретности вихревых колец. Другой вариант подобной «теории» предполагает введение явной дискретности с самого начала: предлагается некоторая (разумеется локальная) модель на решётке (разновидность *клеточного автомата*), которая объявляется квантовой на основании ложного тезиса квантовый=дискретный. Несоответствие всех таким моделей квантовой теории было показано Беллом, а несоответствие эксперименту — Аспектом. Для написания отзыва по существу одного этого возражения вполне достаточно, даже без явного разбора других грубых ошибок, которые эти теории обычно содержат. Однако переубедить автора такой теории, как правило, практически невозможно.

Существуют и вполне респектабельные — согласующиеся с физическим экспериментом (и обычной квантовой механикой) варианты квантовых теорий со скрытыми параметрами. Все они нелокальны.

Наиболее известным вариантом нелокальной теории со скрытым параметром является теория Давида Бома (теория волны-пилота), в которой траектории частиц сосуществуют с волновыми функциями.

А.Ю. Хренниковым была построена нелокальная теория со скрытыми параметрами, в которой в качестве скрытых параметров выступает волновая функция системы. Такая теория не даёт новых (по сравнению со стандартной квантовой механикой) предсказаний, но позволяет модифицировать теорию естественным с этой точки зрения (и противоестественным со стандартной точки зрения) способом.

Большинство физиков скептически смотрят на теории со скрытыми параметрами. Некоторые из них ошибочно полагают, что эксперименты Аспекта запретили все такие теории (а не только локальные). Тем не менее, у нас нет достаточных оснований полностью отменить нелокальные теории со скрытыми параметрами. Они полезны, по меньшей мере, как альтернативный взгляд на известные факты, а причудливость таких теорий — лишний повод удивиться тому, как странно и как квантово устроена Природа.

9.3.4 Принцип дополнительности Бора (фф)

При обсуждении философских вопросов квантовой теории часто используется введённый в 1927 году Нильсом Бором *принцип дополнительности*.

Согласно принципу дополнительности:

- явления природы обладают *дополнительными свойствами* и допускают *дополнительные описания*;
- понятия (величины), использующиеся *в рамках одного описания*, определены одновременно и взаимно согласованы;
- понятия (величины), использующиеся *в рамках различных (дополнительных) описаний* могут быть одновременно не определены, за счёт чего дополнительные описания (дополнительные свойства) могут представляться противоречащими друг другу;
- понимание свойств системы требует использования дополнительных описаний.

Принцип дополнительности является не физическим, а *общефилософским принципом*, поэтому:

- принцип дополнительности имеет более расплывчатую формулировку, чем физические принципы,

- в принцип дополненности может вкладываться разное физическое содержание,
- можно изучать квантовую теорию не используя принцип дополненности,
- принцип дополненности можно применять вне квантовой теории.

В рамках квантовой теории принцип дополненности может использоваться для объяснения следующих явлений:

- дополненность между унитарной эволюцией и измерением:
 - разрушение интерференции при наблюдении промежуточных состояний системы (дополненность интерференции и знания траектории);
 - дополненность классического наблюдателя и квантовой системы (необходимость классического наблюдателя для проведения измерения над квантовой системой в рамках копенгагенской интерпретации);
- дополненность одновременно не измеримых (некоммутирующих) наблюдаемых:
 - соотношения неопределённостей;
 - дополненность (дуализм) волна-частица (плоская монохроматическая волна — состояние с определённым импульсом, локализованная в некоторой точке частица — состояние с определённой координатой).

Иногда применение принципа дополненности в физике приводит к путанице в терминологии. Это происходит, когда сам принцип путают с его применением к тем или иным квантовым явлениям. Часто принцип дополненности отождествляют с соотношением неопределённостей. Более аккуратные авторы отделяя соотношение неопределённостей от принципа дополненности могут ограничивать принцип дополненностью интерференции и знания траектории. Порой обсуждаются возможности экспериментальной проверки принципа дополненности. Разумеется, при этом подразумевается не проверка самого общепризнанного принципа дополненности, а проверка несовместимости интерференции и знания траектории в тех случаях, когда для разрушения интерференции недостаточно размытия значений координаты и/или импульса, в следствии соотношения неопределённостей.¹¹

Принцип дополненности также привлекался (в первую очередь самим Бором) вне квантовой теории:



Рис. 9.10: Герб Нильса Бора в замке Фредриксборг. На щите — древнекитайский символ «инь и янь» и латинская надпись, выражающая идею Принципа дополненности. Воспроизводится по Д.С. Данин, «Нильс Бор».

¹¹ Дж. Гринштейн, А. Зайонц, «Квантовый вызов. Современные исследования оснований квантовой механики», Долгопрудный, «Интеллект», 2008, Глава 4 «Принцип дополненности».

- дополнительность творческого мышления и рефлексии (нельзя творить и одновременно отслеживать процесс творчества);
- дополнительность истины и ясности (простота описания противоречит его строгости);
- дополнительность сохранности системы и знания о ней.

9.3.5 За гранью копенгагенской интерпретации (фф)



Рис. 9.11: Один из кандидатов (наряду с мышью Эйнштейна) на роль наблюдателя для Вселенной в целом. В соответствии с принципами квантовой механики, такой наблюдатель не мог бы быть всеведущим. [Codex Vindobonensis, 1250 г. W]

Копенгагенская интерпретация предоставляет достаточные условия для того, чтобы описывать систему на языке квантовой механики. В большинстве практических применений мы можем пользоваться копенгагенской интерпретацией и не забивать себе голову излишней философией. Однако естественно возникает вопрос, нельзя ли ослабить достаточные условия применимости квантовой механики?

Обсуждая парадоксы квантовой механики мы включали в квантовую систему макроскопические объекты (в частности наблюдателей) и не получали противоречий. **Может ли квантовая механика описывать макрообъекты?** А если к макрообъектам теория не применима, то где границы её применимости? С со скольких песчинок начинается «куча»? Со скольких частиц (или со скольких степеней свободы) объект становится макроскопическим?

Само собой эти вопросы важны с точки зрения понимания теории и её философии, но в последние годы они становятся важными и с точки зрения практической физики. Физики учатся изучать мезоскопические системы на границе микро- и макромира. Создание хорошо изолированных квантовых систем из нескольких

тысяч частиц обещает создание квантовых компьютеров. Будут ли квантовые компьютеры работать, или их теория представляет собой выход за границы применимости квантовой механики?

Также вопрос о границах применимости квантовой теории ставит перед нами квантовая статистическая физика. Как старая, так и новая копенгагенская интерпретация формально не позволяют применять квантовую теорию в статистической физики. Старая копенгагенская интерпретация отказывается работать с макросистемами, а новая копенгагенская интерпретация отказывается работать с незамкнутыми системами.

Другой постулат копенгагенской интерпретации **о необходимости выделения наблюдателя** также ставится под сомнения. В данном случае эта дискуссия по-прежнему далека от практики, но постепенно приобретает всё большую важность в фундаментальной науке. Со времён Бора космология, строящаяся на основе общей теории относительности (ОТО), а также её обобщениях, постепенно всё в большей степени становилась наукой. В настоящее время космология умеет неплохо описывать нашу Вселенную, и её модели с удовлетворительной степенью

точности согласуются с наблюдательными данными. И здесь вопрос о том, можно ли писать волновую функцию Вселенной, и нужен ли при этом наблюдатель (кто?! См. рис. 9.11) становится актуальным.

Проблема усугубляется тем, что до сих пор не существует общепринятой последовательной квантовой теории гравитации.¹² Многие физики приходят к мысли, что создание последовательной квантовой теории гравитации потребует не менее радикального пересмотра наших физических концепций, чем создание квантовой механики или ОТО.

Некоторые эффекты ОТО, такие как поглощение частицы чёрной дырой, являются необратимыми. Это наводит некоторых учёных на мысль, что необратимость ОТО и необратимость измерения в квантовой теории связаны друг с другом. Если это действительно так, то есть надежда в рамках квантовой теории гравитации включить процесс измерения в теорию не в виде отдельного постулата, а как естественное следствие основных уравнений.

Другой взгляд на необходимость наблюдателя в квантовой механике предлагает интерпретация Эверетта (см. раздел 9.3.7).

9.3.6 «Абстрактное Я» фон Неймана (фф)

ФОПФ так и не смогли окончить лорд Кельвин, Иоганн фон Нейман, Отто фон Герике и Герберт фон Караян, о чем постоянно жалеет Ф.Ф. Каменец.



*Перспектив Факултетта общей и
прикладной физики МФТИ. 1992*

Рис. 9.12: «Абстрактное Я» фон Неймана по версии проспекта ФОПФ (1992).

Как уже упоминалось выше в разделе 8.1 «Моделирование измерительного прибора*», граница между наблюдателем и измеряемой системой может проводиться по-разному. Выше мы также двигали эту границу, рассматривая Кота Шрёдингера и Друга Вигнера.

И если мы выше *расширяли систему*, то Иоганн фон Нейман¹³ *сужал наблюдателя*. В систему могут включаться или не включаться прибор, стрелка прибора, глаз наблюдателя, часть мозга наблюдателя, занимающаяся обработкой зрительного сигнала... Соответственно сам акт наблюдения производят: человек и прибор, сам человек (целиком), голова наблюдателя, мозг наблюдателя, отвечающая за высшую нервную деятельность кора головного мозга, и наконец, некоторое «абстрактное Я наблюдателя». «Абстрактное Я» при этом рассматривается, как нечто, не имеющее материального носителя.¹⁴

¹²Хотя есть ряд кандидатов на роль квантовой теории гравитации, в число которых входят теории струн, супергравитация, М-теория, петлевая гравитация и др. Также существуют непоследовательные квантовые теории гравитации, которые в некоторых условиях позволяют предсказывать физические эффекты, но не являются самосогласованными теориями.

¹³Иоганн фон Нейман, *Математические принципы квантовой механики*, М. «Наука», 1964.

¹⁴Заметим, что основной вывод, декларируемый фон Нейманом состоял не во введении «абстрактного Я», а в существенной произвольности границы между системой и наблюдателем.

С этой точки зрения «абстрактное Я» представляет собой некий процесс, благодаря которому человек знает, в каком состоянии находится его сознание. Другая возможная трактовка: «абстрактное Я» тождественно некоторой объективной (не зависящей от наблюдателя) редукции волновой функции.

Предположение (у фон Неймана неявное), что человек знает в каком состоянии находится его сознание представляется весьма шатким. Скорее, следуя Бору, который предлагал применить *принцип дополнительности* к человеческому сознанию, можно ожидать, что *рефлексия* (осознание сознательной деятельности) препятствует сознательной деятельности. Сам Бор вероятно не связывал эту дополнительность с квантовыми эффектами, однако многие авторы полагают, что сознание может быть существенным образом квантовым, хотя и понимают эту квантовость очень по-разному.



Рис. 9.13: Иоганн фон Нейман (1903–1957) во время работы в Лос-Аламосе.

9.3.7 Многомировая интерпретация Эверетта (фф)

Когда мы рассматривали Кота Шрёдингера, а потом Друга Вигнера, то мы последовательно расширяли квантовую систему включая в неё всё новых и новых наблюдателей: Датчик, Кота, Наблюдателя, Друга. Каждый из этих наблюдателей по мере распространения сигнала попадал в состояние запутанное с тем, что на предыдущем этапе рассматривалось как квантовая система. Для того, чтобы проследить судьбу наблюдателя, включённого в расширенную систему, мы вводили следующего наблюдателя, который осуществляет измерение над предыдущим и т.д.

Это наводит на мысль, что нет никакой необходимости плодить наблюдателей и дополнять унитарную эволюцию процедурой измерения. В конце концов после того, как очередной Наблюдатель попал в суперпозицию двух макроскопически различных состояний, каждое из этих состояний живёт своей жизнью, поскольку они столь различны, что их интерференцией (возможностью привести к микроскопически одинаковому итогу) можно пренебречь. Мы получаем как бы два параллельных Мира: в одном из них Кот жив, и все наблюдатели с этим согласны, а в другом Кот мёртв, и все наблюдатели обнаруживают именно такой исход. Эти два Мира практически не влияют друг на друга.

Мы можем придти к выводу, что квантовая механика не требует введения процедуры измерения. Унитарная эволюция квантового состояния даёт нам суперпозицию состояний (параллельных Миров), отвечающих всем возможным комбинациям исходов всех измерений. Эти Миры ветвятся при каждом измерении, но все они сосуществуют, описанные как компоненты одного состояния (волновой функции) Вселенной.

Проекционный постулат, с помощью которого мы обычно описываем процедуру измерения, позволяет выделить из параллельных Миров один, который нами воспринимается.



Рис. 9.14: Хью Эверетт III 1964 г. (1930–1982) [<http://space.mit.edu/>]

Наблюдатель воспринимает лишь один Мир (компоненту квантовой суперпозиции) потому, что эти Миры макроскопически различны. Однако в параллельных Мирах могут быть аналоги этого же наблюдателя: если в одном Мире Наблюдатель обнаружил, что спин электрона направлен вверх и поставил в лабораторный журнал единичку, то в параллельном Мире точно такой же Наблюдатель обнаруживает, что спин направлен вниз и ставит в журнал нолик. Таким образом, Наблюдатели ветвятся вместе с Мирами.

Математически это ветвление описывается с помощью относительных состояний $|\psi_{\phi_0}\rangle$ (7.5.5 «Относительные состояния (ф*)»), которые задают состояние подсистемы при условии, что состояние наблюдателя окажется в состоянии $|\phi_0\rangle$. Разным параллельным мирам соответствуют разные состояния наблюдателя $|\phi_0\rangle$, и разные относительные состояния окружающей вселенной $|\psi_{\phi_0}\rangle$. В многомировой интерпретации все относительные состояния в равной степени реальны и сосуществуют друг с другом.

В многомировой интерпретации квантовой механики как в классике нет случайности, а есть только незнание. Наблюдатель, который всерьёз принял эту интерпретацию уверен, что в том или ином из параллельных Миров происходит всё, что может произойти (см. раздел 3.2 «Возможно всё, что может произойти»), он только не знает попадёт ли он в тот самый Мир, в котором случится интересное его событие, или это событие будет наблюдать не он, а его иной вариант из параллельного Мира.

Параллельные Миры расщепляются не сразу, а порой могут не только расщепляться, но и сливаться. Так если мы пустили фотон с помощью полупрозрачного зеркала сразу по двум плечам интерферометра, то можно сказать, что Мир расщепился на два, в каждом из Миров фотон пошёл по своему пути. Однако, если в конце интерферометра фотон будет снова собран с помощью полупрозрачного зеркала в один волновой пакет, то нам придётся сказать, что параллельные Миры снова слились, или что они ещё не успели толком расщепиться. Ну а если после полупрозрачного зеркала стоят датчики, как в мысленном эксперименте с Котом Шрёдингера, то Миры расходятся уже практически необратимо.

Процесс разделения альтернатив описывается в исследованиях явления *декогеренции* (8.3 «Декогеренция (фф)») — зацепления состояний измерительного прибора и окружения, в результате которого, для наблюдателя не контролирующего окружение полностью, различные альтернативы становятся как бы взаимоисключающими.¹⁵

Чем (не)удобна многомировая интерпретация (фф)

Многомировая интерпретация выглядит весьма абсурдно. Бесконечное количество параллельных Миров вводится для того, чтобы отказаться от проекционного постулата, который *всё равно приходится применять* для того, чтобы делать предсказания результатов каких-либо экспериментов. Эта *необходимость всё равно обращаться к проекционному постулату сводит существенные различия между традиционной квантовой теорией и многомировой интерпретацией на нет*. Некоторые физики вообще не верят, что кто бы то ни было (включая самого Эверетта) всерьёз способен принять такую глупость как многомировая интерпретация.

¹⁵ Многие авторы, исследующие процессы декогеренции не согласны с многомировой интерпретацией и считают, что декогеренция сама по себе является самостоятельной интерпретацией квантовой механики. Подробнее см. раздел 8.3 «Декогеренция (фф)».

Тем не менее многомировая интерпретация в последние годы приобрела популярность среди ряда физиков занимающихся основами квантовой механики и квантовой теорией информации.

Многомировая интерпретация позволяет развить некоторую форму специфически квантовой интуиции. Обсуждавшийся ранее тезис «возможно всё, что может произойти» усиливается и превращается в «происходит всё, что может произойти». Утверждение, что квантовые процессы происходят одновременно всеми возможными способами (в частности, что частица пролетает одновременно через оба отверстия в двухщелевом эксперименте) становится банальностью.

Удобную метафору (метафору ли?) даёт многомировая интерпретация и для квантового компьютера: квантовый компьютер выполняет параллельные вычисления одновременно во многих параллельных Мирах, благодаря чему достигается выигрыш в производительности, однако в конце возникает проблема собирания результатов вычислений в одном Мире.

Многомировой интерпретации придерживается один из создателей теории квантовых вычислений Дэвид Дойч. Дойч пропагандирует многомировую интерпретацию в книге «Структура реальности»¹⁶, где утверждает, что многомировая интерпретация является естественной для физика, исследующего квантовые вычисления.

Многомировая интерпретация даёт удобную интуицию и для понятия вероятности: *вероятность события — доля Миров в котором это событие происходит.*

Эвереттом был также получен «вывод» квантовомеханической формулы для вероятностей, как единственно возможной при некоторых условиях (см. 8.2.1 «Эвереттовский «вывод» теории измерений (фф*)»).

Многомировая интерпретация и антропный принцип (фф)

Ещё одним преимуществом, а может быть недостатком многомировой интерпретации квантовой теории является необычайная лёгкость применения антропного принципа.

Антропный принцип — это объяснение *наблюдаемых свойств* какой-либо системы тем фактом, что для наблюдения нужен наблюдатель, который должен иметь возможность возникнуть, жить и наблюдать эту систему.

Например, тот факт, что наше Солнце представляет собой сравнительно небольшую, зато очень долгоживущую звезду (с общим временем жизни около 10 млрд. лет) легко объясняется тем, что массивные звёзды живут очень мало (миллионы лет), а потому жизнь, а тем более разумная жизнь просто не успевает возникнуть на планетах, обращающихся вокруг этих звёзд. В связи с этим мы (т.е. *живые и разумные* существа) обречены были возникнуть рядом со сравнительно лёгкой звездой. Аналогичным образом объясняется то, что нам повезло жить в системе одиночной звезды, при том, что большинство звёзд входит в двойные и более сложные кратные системы: кратной системе орбиты планет менее устойчивы и меньше вероятность возникновения на них разумной жизни.

Как видна на этих примерах, для применения антропного принципа нам нужен достаточно большой ансамбль систем, в которых может или не может возникнуть/обитать разумная жизнь. Если ансамбль достаточно велик, то сколь угодно малая вероятность успеха (возникновения разумной жизни) в каждом конкретном

¹⁶ Д. Дойч «Структура реальности». — РХД. — Москва–Ижевск. — 2001.

случае даст нам для всего ансамбля практически достоверное возникновение разумной жизни.

В многомировой интерпретации у нас есть бесконечный ансамбль параллельных Миров. Таким образом применение антропного принципа по поводу *и без повода* становится лёгким и естественным. Например, согласно мнению многих физиков фундаментальные постоянные «подогнаны» очень точно с тем, чтобы в нашей Вселенной могла возникнуть жизнь: при чуть-чуть изменённых константах не могут возникнуть звёзды, или планеты, или тяжёлые атомные ядра, или что-либо ещё совершенно необходимое для разумной жизни *в том единственном виде, в котором мы её знаем*. Если предположить, что фундаментальные постоянные являются на самом деле динамическими переменными, то легко вообразить себе модель, в которой в разных параллельных Мирах будут реализованы все возможные их комбинации. С этой точки зрения попытки объяснения точной подгонки фундаментальных констант оказались бы бессмысленными. Однако возможно между фундаментальными константами существуют какие-то пока нам неизвестные соотношения. В поисках этих соотношений антропный принцип может сбить нас с толку выдав слишком лёгкое (и бесплодное объяснение).

Антропный принцип в комбинации с многомировой интерпретацией способен, например, объяснить происхождение жизни, сославшись на случайную сборку первого одноклеточного организма при броуновском движении атомов. Конечно, количество планет в наблюдаемой части Вселенной (радиусом порядка 10 млрд. световых лет) для подобной сборки за время жизни Вселенной практически наверняка недостаточно, но параллельные Миры предоставят нам ансамбль землеподобных планет любой нужной нам мощности. Это же рассуждение предсказывает, что мы (земная жизнь) практически наверняка одиноки во Вселенной (точнее *в нашем Мире*), поскольку одна планета с разумной жизнью (Земля) в нашем Мире уже точно есть, то все ничтожно-малые оценки вероятности возникновения жизни надо относить уже к другой подобной планете.

Однако объяснение возникновения жизни через комбинацию броуновского движения, многомировой интерпретации и антропного принципа бесплодно в том смысле, что оно ничего не говорит о той химической эволюции, которая должна была предшествовать возникновению органической жизни и не могла не увеличить вероятность её возникновения (уже не через броуновское движение, а через самоорганизацию) на много порядков.

Как мы видим на приведённых примерах, антропный принцип в комбинации с бесконечным множеством миров многомировой интерпретации способен объяснить практически что угодно, примерно как неиспользованная Лапласом «гипотеза Бога», однако его предсказательная сила столь же низка.¹⁷

9.3.8 Сознание и квантовая теория (фф)

Квантовая теория измерений не формулируется без ссылки на наблюдателя, причём граница между наблюдателем и измеряемой системой может быть проведена различными способами. И если кто-то делает вывод, что измерение в конечном итоге производится сознанием наблюдателя, или его абстрактным Я, то возникают естественные вопросы:

¹⁷Рассказывают, что после рассказа Лапласом Наполеону космологической теории происхождения Солнечной Системы, Наполеон спросил о месте Бога в этой теории и получил ответ: «Государь, я не нуждаюсь в этой гипотезе.»

- Что же такое сознание?
- Может ли сознание изучаться в рамках физики?
- Может ли сознание быть сведено к физическим явлениям, описываемым в рамках стандартной квантовой теории?
- Является ли сознание явлением принципиально отличным от «обычных» квантовых (унитарных) физических явлений?
- В каких ещё явлениях, помимо человеческого сознания, проявляется те же неунитарные эффекты?
- Как согласуется существование многих наблюдателей с тем, что они наблюдают один и тот же физический мир?
- Почему разные наблюдатели наблюдают один и тот же мир?
- Следует ли считать сознание каждого человека отдельным объектом?
- Следует ли считать, что в мире существует только одно Сознание?
- Если измерение производится именно сознанием, то может ли оно влиять на исход измерения? (Возможно ли «активное сознание»?)
- Если сознание одного наблюдателя может влиять на исход измерения, то как это будет восприниматься другими наблюдателями?
- Можно ли связать квантовые чудеса с чудесами человеческого сознания?
- Могут ли методы математического описания и физической интерпретации квантовых явлений (когда влиянием наблюдателя нельзя пренебречь) быть применены при изучении сознания (которое также реагирует на наблюдение)?

Многие вопросы сводятся к обсуждению и интерпретации парадокса Друга Вигнера. Также для некоторых вопросов можно предложить физические эксперименты, призванные на эти вопросы ответить. Такие вопросы можно обсуждать содержательно.

Роджер Пенроуз в своих книгах «Новый ум короля», «Тени разума» и др. приводит интересные аргументы в пользу своей гипотезы о связи сознания, неунитарных обобщений квантовой теории и квантовой гравитации. Пенроуз из неопределимости понятия доказательства и теоремы Гёделя о неполноте арифметики делает вывод, что сознание описывается невычислимым процессом. А поскольку уравнения квантовой (как и классической) физики в принципе допускают (на конечном временном интервале) численное решение с любой степенью точности, то квантовая теория не может описывать сознание. Эти аргументы, безусловно, спорны, но их можно содержательно обсуждать. (Также очень интересен обзор современной физики приводимый Пенроузом в указанных книгах.)

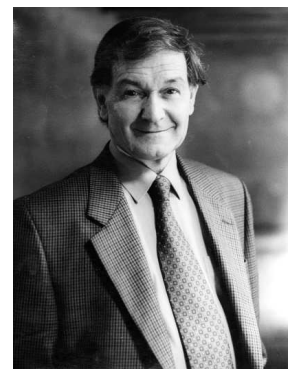


Рис. 9.15: Роджер Пенроуз W

Попытки применения в психологии методов и философии, разработанных в квантовой физике восходят к Н. Бору (принцип дополнительности в психологии)

и В. Паули (совместная работа К. Юнгом, 1953 год). Это направление развивается до сих пор (см. например статью А.Ю. Хренникова «Квантовоподобный мозг на сознательном и бессознательном временных масштабах»¹⁸, где также приведена обширная библиография).

Однако большинство из приведённого списка вопросов вообще не относятся к физике, соответственно большинство физиков избегает их обсуждения. Некоторые вопросы явно отдают какой-то мистикой, их обсуждение способно стимулировать разного рода «патологов» к проведению параллелей между современной физикой и разного рода мистикой/эзотерикой/теософией/астрологией. К сожалению до авторов ненаучной фантастики (ННФ) и паранаучных фантазий (ПНФ) уже дошли обрывочные и искажённые сведения о чудесах и парадоксах квантовой механики. Книги в жанре ННФ, в которых по параллельным эвереттовским мирам бродят толпы оживших мертвецов, уже написаны и продаются. Также написаны ПНФ-книги, в которых авторы, маскирующиеся под учёных-физиков, увязывают квантовую нелокальность с мистикой (восточной и западной), теософией, реинкарнациями, телепатией, ясновидением и «торсионными полями»¹⁹.

Пример ПНФ-книги — С.И. Доронин «Квантовая магия».²⁰ Эта книга особенно опасна для неспециалиста потому, что автор — кандидат физ.-мат. наук и старший научный сотрудник Института проблем химической физики РАН, причём входит в исследовательскую группу, которая в самом деле занимается квантовыми компьютерами. Книга содержит одновременно ссылки на вполне солидные научные работы, и откровенную мистику и патологию. Из книги видно, что автор очень много читал по физике (думаю, много больше меня), но практически ничего не понял ни в квантовой теории, ни в ОТО, о которой он тоже пишет.

Если пытаться разбирать книгу Доронина по существу, то вероятно, главной физической идеей (обсуждение разнообразной мистики слишком расплывчаты, чтобы их можно было по существу обсуждать с точки зрения физики) следует считать гипотезу о возможности приближённого описания квантовых нелокальных эффектов с помощью некоторой эффективной теории, на роль которой предлагается классическая **локальная** теория поля (как вариант — общая теория относительности). Естественно, такой подход (исторически восходящий к Эйнштейну) при современном уровне физики бесперспективен, поскольку в *таком* приближении пренебрегается как раз тем, что автор хочет описать. Грубые ошибки, допущенные далее в общей теории относительности после этого только подчёркивают низкий научный уровень работы.

По всей видимости это парадокс (написание *такой* книги сотрудником уважаемого академического института) может быть объяснено тем, что сам Доронин не столько физик, сколько программист, как написано на интернет-сайте Лаборатории спиновой динамики и спинowego компьютеринга, в которой он работает: «С.И. Доронин, владеет различными языками программирования, разрабатывает в нашей лаборатории программы для численного решения задач, в том числе параллельные программы для суперкомпьютерных расчетов, проводимых в Межведомственном Суперкомпьютерном Центре (МСЦ)». Я сомневался, следует ли давать здесь ссыл-

¹⁸ Andrei Yu. Khrennikov, *The Quantum-Like Brain on Cognitive and Subcognitive Time Scales*, Journal of Consciousness Studies, v. 15, No.7, 2008, pp. 39–77.

¹⁹ «Торсионные поля» — неоднократно разоблачённая паранаучная афера, получившая широкое освещение в прессе. «Торсионные поля» не следует путать с полями кручения, которые вводятся в ряде вполне респектабельных обобщений общей теории относительности.

²⁰ С.И. Доронин «Квантовая магия», ИГ «Весь», 2007 г.

ку на такую книгу, но решил, что подобного рода предостережение необходимо.

Ситуация осложняется ещё и тем, что ряд настоящих физиков (начиная, по крайней мере, с Шрёдингера) в своих философских работах также обращается к восточной философии, а порой и к обсуждению паранормальных явлений.

9.3.9 Активное сознание (фф*)

Термин *активное сознание*, для сознания которое способно влиять на исход измерения, был введён М.Б. Менским, хотя подобного рода гипотезы периодически высказывались в научной и околонаучной среде очень давно (вероятно, с начальных времён квантовой теории).

Несмотря на использование столь нелюбимого большинством физиков слова «сознание» данная гипотеза допускает экспериментальную проверку. Различные экспериментальные группы время от времени публикуют результаты исследований, в которых «оператор» пытался силой мысли влиять на классический или квантовый случайный процесс (карты, сдаваемые из колоды, дробовой шум и т.п.). Результаты таких поисков (из числа тех, с которым я ознакомился) неизменно отрицательные или сомнительные (прежде всего сомнительные по методике эксперимента и обработки данных). В качестве примера такого исследования можно привести книгу Р.Г. Джан, Б.Дж. Данн «Границы реальности: роль сознания в физическом мире».²¹ Не смотря на то, что авторы организовали свою Лабораторию изучения аномалий при Школе инженерных и прикладных наук Принстонского университета, книга сомнительна прежде всего методологически: если, согласно книге, «оператор» якобы «влияет» на генератор *псевдослучайных чисел*, т.е. на абсолютно детерминистический процесс, то это надо хоть как-то прокомментировать. В книге содержатся отсылки к квантовой теории, но они столь неопределённые, что не могут обсуждаться на содержательном уровне.

Также эта гипотеза допускает содержательное теоретическое обсуждение. Выше мы уже обсуждали «жесткость» формулы для квантовых вероятностей (см. 8.2.2 «Жесткость» формулы для вероятностей (фф)»). При этом мы показали, что отклонения от стандартной борновской формулы для квантовых вероятностей, позволяет передавать информацию со сверхсветовой скоростью с помощью квантовых запутанных состояний, а также позволяет ввести абсолютную одновременность (не зависящую от системы отсчёта). Таким образом, активное сознание явным образом нарушает лоренц-инвариантность теории, т.е. входит в прямое противоречие со специальной теорией относительности. Это именно настоящее, а не кажущееся противоречие с теорией относительности, в отличие от мгновенного коллапса волновой функции в обычной квантовой теории, которые не позволяет передать со сверхсветовой скоростью какую-либо информацию.

В принципе, после того, как на эксперименте было показано нарушение такой «очевидной» симметрии, как зеркальная симметрия (несохранение чётности), мы можем допустить, что и лоренцевская симметрия является только приближительной. Однако для большинства физиков противоречие активного сознания СТО ставит крест на этой гипотезе.



Рис. 9.16: Михаил Борисович Менский
[<http://ufn.ru/>]

²¹Р.Г. Джан, Б.Дж. Данн «Границы реальности: роль сознания в физическом мире», М. ОИВТ РАН, 1995.

Глава 10

Квантовая информатика**

Квантовая информатика рассматривает процессы получения, передачи, хранения и обработки информации с точки зрения квантовой теории. Адекватная квантовой теории *квантовая логика* допускает не только такие значения логических переменных как «да» («истина», 1) и «нет» («ложь», 0), но и их линейные суперпозиции.

Многие очевидные положения классической информатики в квантовой механике оказываются неверными, причём квантовая теория, по сравнению с классической, не только накладывает новые ограничения, но и даёт дополнительные возможности, которые на языке классической теории звучат как парадоксы.

Одно из ключевых ограничений на возможности квантовой обработки информации накладывает теорема о невозможности клонирования квантового состояния. Эта теорема лежит в основе квантовой криптографии, обеспечивая невозможность «подсмотреть» состояние передаваемого квантового бита, она же не позволяет извлечь из одного квантового бита более одного классического бита информации и ограничивает тем самым применимость основанного на суперпозиции состояний квантового параллелизма.

10.1 Квантовая криптография**

Квантовая криптография изучает методы секретной передачи информации, при которых секретность сообщения обеспечивается принципами квантовой механики.

Поскольку в квантовой механике любое измерение может оказать влияние на измеряемую систему, владелец системы, который знает в каком состоянии система была приготовлена изначально, может впоследствии проверить, измерял ли его систему кто-либо другой.

10.1.1 Зачем нужен ключ в классической криптографии (пример)

Для того, чтобы обеспечить абсолютно надёжную классическую линию связи достаточно, чтобы отправитель сообщения (Алиса) и получатель (Борис) располагали одинаковыми секретным ключом (случайной последовательностью цифр 0 и 1), длина которого не меньше, чем длина передаваемого секретного сообщения.

Алиса шифрует секретные сообщения побитово применяя операцию логического

сложения к сообщению и ключу: $(0, 1), (1, 0) \rightarrow 1$, а $(0, 0), (1, 1) \rightarrow 0$.

сообщение	0	1	1	0	0	0	...	1	0	1
ключ	1	0	1	0	1	1	...	0	0	1
шифровка	1	1	0	0	1	1	...	1	0	0

Два раза повторённая операция шифровки с одним и тем же ключом даёт снова исходное сообщение, поэтому на другом конце линии Борис расшифровывает сообщение снова логически прибавляя к нему побитово тот же ключ.

Поскольку ключ — последовательность случайных бит, такое шифрование полностью убирает из исходного текста любые корреляции и делает расшифровку невозможной, поэтому шифровку можно, не боясь подслушивания, передавать по открытым линиям связи. Этот метод называют иногда методом *одноразовых шифровальных блокнотов* (Алиса и Борис имеют набор попарно одинаковых блокнотов, в которых записаны ключи).

Главная проблема метода — необходимость обеспечить секретную передачу обоим корреспондентам одинаковых длинных ключей. После этого корреспонденты должны будут хранить секретные ключи так, чтобы исключить утечку информации вплоть до того момента, когда эти ключи будут использованы.

10.1.2 Квантовая генерация ключей

Квантовая механика позволяет Алисе и Борису получить пару заведомо одинаковых ключей, обмениваясь квантовыми битами по каналу связи, который допускает перехват информации, а также классической информацией по каналу, который допускает прослушивание. При этом Алиса и Борис смогут с любой степенью уверенности обнаружить перехват на квантовом канале.

Излагаемая ниже процедура генерации ключа была предложена в 1984 году Ч. Беннеттом и Дж. Brassardом¹. Эта процедура известна как *протокол BB84*.

В дальнейших рассуждениях будут использоваться 4 состояния квантового бита, принадлежащих к двум ортонормированным базисам «0-1» и «±»:

$$|0\rangle, \quad |1\rangle, \quad |+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}.$$

1. Алиса передаёт Борису случайную последовательность квантовых битов в состояниях $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|+\rangle$ или $|-\rangle$.
2. Борис измеряет полученные от Алисы фотоны используя случайным образом базисы «0-1», или «±», и получает цепочку нулей и единиц.
3. Алиса по открытому классическому каналу сообщает Борису, какой из базисов она использовала для каждого бита (но не говорит, какое из двух состояний было использовано).
4. Борис сообщает Алисе, какой из двух базисов он использовал при измерении каждого бита (но не сообщает результат измерения).

¹C.G. Bennett and G. Brassard, *Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing*, in: *Proc. of the IEEE Inst. Conf on Computers, Systems, and Signal Processing, Bangalore, India* (IEEE, New York, 1984) p.175

5. Алиса и Борис выбирают из цепочки только те биты, которые были испущены и измерены в одинаковых базисах (это предварительный ключ).
6. Алиса и Борис сравнивают (переговариваясь по открытому классическому каналу) некоторое количество случайно выбранных бит из предварительного ключа. Если проверенные биты совпадают, то делается вывод (с соответствующей численной оценкой), что перехвата на квантовом канале не было.
7. Из предварительного ключа исключаются биты, которые были использованы для проверки, остальное составляет секретный ключ.

Если Ева пытается вести перехват на квантовом канале, то её измерение будет нарушать состояние кубитов, во всех случаях, когда она не угадала, какой из базисов использует Алиса. Это будет происходить в половине случаев. После этого, если Ева не угадала базис, то поляризация, измеренная Борисом будет полностью случайна. Также поляризация, измеренная Борисом полностью случайна, если Борис не угадал базис Алисы. Таким образом, в восьмой части случаев перехвата Ева внесёт искажение в цепочку бит предварительного ключа. Это искажение должно быть выявлено сравнением случайной выборки бит на этапе 6.

В процессе генерации ключа Алиса и Борис не обмениваются никакой информацией, которая позволила бы узнать содержание ключа, поэтому Ева может сорвать генерацию ключа, но не может этот ключ перехватить.

10.1.3 Квантовая линия связи

Квантовые эффекты можно использовать не только для квантовой генерации ключа, но и для самой передачи информации.

Например, для секретной передачи данных можно использовать квантовую телепортацию (7.7 «Квантовая телепортация**»). При квантовой телепортации помимо квантовой линии для передачи коррелированных кубитов нам понадобится классическая линия, по которой будут передаваться результаты измерений, не несущие информации о состоянии телепортируемого кубита.

10.2 Квантовые компьютеры как аналоговые (ф)

Как уже отмечалось ранее, описание квантовой системы требует существенно большего количества информации (задание волновой функции), чем описание классической системы (задание координат и импульсов). Соответственно возрастает вычислительная сложность численного моделирования квантовых систем. И хотя, во многих случаях, удаётся обойтись без явного моделирования волновой функции большого числа переменных, задача моделирования сколь-нибудь сложных квантовых систем для классического компьютера оказывает сложной (часто нерешаемой за разумное время).

Ричард Фейнман в 1981 году предложил использовать одни квантовые системы для моделирования других².

Моделирование одной физической системы с помощью другой, имеющей аналогичное математическое описание, — идея аналогового компьютера. Таким образом,

²R.P. Feynman, "Simulating physics with computers", Int. J. Theor. Phys. **21**, Nos. 6/7, pp. 467–488 (1982)

может быть поставлена задача аналогового моделирования физических систем с помощью квантовых систем, т.е. задача создания аналогового квантового компьютера.

10.3 Квантовые компьютеры как цифровые (ф)

Если система ограничена в пространстве, то её энергетический спектр дискретен. Если при этом ограничена сверху и снизу также и энергия системы, то имеется только конечное число ортогональных состояний системы, т.е. пространство состояний $\mathcal{H}$ оказывается конечномерным, т.е. $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$, где N конечно (хотя, может быть, велико).

Таким образом, ограниченная в пространстве и по энергиям система допускает конечный набор дискретных независимых наблюдаемых. При измерении такой системы мы можем получить только конечный объём информации, записывающийся с помощью конечного числа знаков какого-либо алфавита. В классике это означало бы, что система имеет конечное число состояний, но в квантовом случае число состояний бесконечно, за счёт линейности пространства состояний (принципа суперпозиции).

Таким образом, обладая конечным числом независимых квантовых состояний ограниченная в пространстве и по энергии квантовая система может рассматриваться как квантовый аналог цифрового компьютера.

10.4 Понятие универсального квантового компьютера

В литературе определение универсального квантового компьютера часто даётся в запутанной форме, либо не даётся вообще. При этом как правило даётся ссылка на статью Дэвида Дойча 1985 года³.

Статья Дойча (1985) содержит достаточно расплывчатое определение «полного моделирования»⁴ одной системы с помощью другой:

Вычислительная машина M может полностью моделировать физическую систему $\mathcal{U}$ относительно данной разметки их входов и выходов, если для M существует программа $\pi(\mathcal{U})$, которая делает M вычислительно эквивалентной $\mathcal{U}$ относительно этой разметки. Другими словами, $\pi(\mathcal{U})$ превращает M в «чёрный ящик», функционально неотличимый от $\mathcal{U}$.

Универсальный квантовый компьютер при этом понимается как универсальное устройство для полного моделирования произвольной физической системы с любой наперёд заданной точностью.

Это определение только затемняет вопрос, т.к. вполне классическая универсальная машина Тьюринга (универсальный классический компьютер) при наличии неограниченного времени и неограниченной памяти способна численно решать уравнения квантовой механики с любой наперёд заданной точностью и формально подходит под это определение, хотя автор, очевидно, имеет в виду нечто большее.

³D. Deutsch, *Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer*, Proc. R. Soc. Lond. A **400**, 97–117 (1985); перевод А.П.Бельтюкова

⁴perfect simulation

Внимательное изучение реального физического содержания той же статьи позволяет извлечь и настоящее определение универсального квантового компьютера:

Универсальный квантовый компьютер — устройство, которое позволяет для системы L квантовых битов осуществлять преобразование сколь угодно близкое к любому желаемому унитарному преобразованию пространства $\mathcal{H}_L = \mathbb{C}^{2^L}$.

В статье Дойча (1985) содержатся также рассуждения, обосновывающие возможность полного моделирования открытых квантовых систем, однако эти рассуждения не представляются в достаточной степени строгими и убедительными.

10.5 Квантовый параллелизм

Квантовый параллелизм — возможность одновременного выполнения каких-либо обратимых вычислений над разными членами квантовой суперпозиции.

Набор из L классических битов может находиться в 2^L различных состояниях. Однако для квантовых битов эти 2^L состояний оказываются базисом линейного пространства и допустимы также любые их суперпозиции, в частности, состояние

$$\underbrace{\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \cdots \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}}_L =$$

$$= \frac{1}{2^{L/2}} \underbrace{\left(\underbrace{|0\rangle \cdots |0\rangle}_L |0\rangle + \underbrace{|0\rangle \cdots |0\rangle}_L |1\rangle + \underbrace{|0\rangle \cdots |1\rangle}_L |0\rangle + \underbrace{|0\rangle \cdots |1\rangle}_L |1\rangle + \cdots + \underbrace{|1\rangle \cdots |1\rangle}_L |1\rangle \right)}_{2^L}$$

Таким образом мы получаем суперпозицию всех двоичных чисел от $\underbrace{00 \cdots 0}_L = 0$ до

$\underbrace{11 \cdots 1}_L = 2^L - 1$. То же самое равенство мы можем переписать так:

$$|X\rangle = \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \right)^{\otimes L} = \frac{1}{2^{L/2}} \sum_{n=0}^{2^L-1} |n\rangle.$$

Если у нас есть некоторая функция $f : \{0, \dots, 2^L - 1\} \rightarrow \{0, \dots, 2^{L'} - 1\}$, тогда ей можно сопоставить унитарное преобразование $\hat{U}_f$, которое следующим образом действует на первых 2^L базисных состояниях пространства $\mathcal{H}_{L+L'} = \mathbb{C}^{2^{L+L'}}$:

$$\hat{U}_f \left| \underbrace{n}_{L \text{ кубит}} ; \underbrace{0}_{L' \text{ кубит}} \right\rangle = \left| \underbrace{n}_{L \text{ кубит}} ; \underbrace{f(n)}_{L' \text{ кубит}} \right\rangle.$$

Любое унитарное преобразование $\hat{U}_f$ может быть реализовано как оператор эволюции для некоторого гамильтониана, задающего взаимодействие L кубитов, т.е. может быть выполнено на универсальном квантовом компьютере.

$$\hat{U}_f |X; 0\rangle = \frac{1}{2^{L/2}} \sum_{n=0}^{2^L-1} \hat{U}_f |n; 0\rangle = \frac{1}{2^{L/2}} \sum_{n=0}^{2^L-1} |n; f(n)\rangle.$$

Таким образом, применение этого преобразования к состоянию $|X; 0\rangle$ позволяет вычислить функцию f одновременно для всех чисел от 0 до $2^L - 1$.

С точки зрения многомировой интерпретации квантовой механики⁵ можно сказать, что у нас имеется 2^L эвереттовских миров, которые отличаются друг от друга только тем, какое число введено в квантовый компьютер, в каждом из этих миров идёт вычисление функции f для своего значения аргумента. Однако извлечь из L кубитов мы по-прежнему можем не более L классических битов информации. По этой причине квантовый параллелизм оказывается не столь эффективным, как это может показаться на первый взгляд.

10.6 Логика и вычисления

10.6.1 Логика классическая

Классическая логика изучает функции двоичных переменных (классических битов): каждый аргумент такой функции пробегает два значения (0 и 1, «да» и «нет», «ложь» и «истина»), и значение самой функции также может принимать те же два значения. Такие функции могут также называться *логическими операциями*.

Логические операции удобно изображать графически в виде блока с несколькими входными линиями (*входами*), соответствующими аргументам и одной выходной линией (*выхода*), соответствующей значению функции. Логические операции в графическом представлении мы будем называть *логическими вентилями*.

Любое численное или логическое вычисление может быть представлено как комбинация логических операций, или в виде графической схемы (*логической схемы*), состоящей из нескольких логических вентилях, соединённых между собой линиями: у части вентилях выходы соединены с входами других вентилях. При этом линия идущая от выхода может разветвляться. Графическая схема может иметь несколько внешних входных линий, на которые подаются входные данные и несколько выходных — на которые выдаётся результат вычисления. Входные линии схемы (они также могут разветвляться) могут подключаться к выходным линиям схемы, а также к входным линиям логических вентилях.

Доказано, что для описания любого вычисления достаточно применить конечное число разновидностей логических вентилях, например, «и», «или», «не»:

$$\begin{array}{lll} \text{«и»}: & \begin{array}{l} 00 \rightarrow 0 \\ 01 \rightarrow 0 \\ 10 \rightarrow 0 \\ 11 \rightarrow 1 \end{array} & , \quad \text{«или»}: \begin{array}{l} 00 \rightarrow 0 \\ 01 \rightarrow 1 \\ 10 \rightarrow 1 \\ 11 \rightarrow 1 \end{array} , \quad \text{«не»}: \begin{array}{l} 0 \rightarrow 1 \\ 1 \rightarrow 0 \end{array} . \end{array}$$

Более того, достаточно одного универсально вида логических вентилях «не-и»:

$$\begin{array}{ll} \text{«не-и»}: & \begin{array}{l} 00 \rightarrow 1 \\ 01 \rightarrow 1 \\ 10 \rightarrow 1 \\ 11 \rightarrow 0 \end{array} , \quad \text{«не-и»}(\bullet, \bullet) = \text{«не»}(\text{«и»}(\bullet, \bullet)). \end{array}$$

⁵ Дэвид Дойч утверждает в своих статьях и книгах, что многомировая интерпретация квантовой механики является стандартной для физиков, работающих в области квантовых вычислений. Д. Дойч также является автором философской книги «Структура реальности», рассматривающей современную науку с точки зрения квантовой механики по Эверетту, эволюции по Дарвину и теории познания по Попперу (познание, как естественный отбор среди научных теорий).

10.6.2 Вычисления и необратимость

Описанные выше *логические схемы* представляют собой графическое описание процесса вычислений, который может быть реализован на некотором классическом вычислительном устройстве. Т.е. логические схемы — описания физических процессов, которые реализуют данное вычисление.

Поскольку линии логической схемы могут разветвляться, произвольная информация в логических схемах может копироваться. Согласно теореме о невозможности клонирования квантового состояния, возможность копирования означает, что информация не может задаваться произвольным квантовым состоянием, в частности она не может быть квантовой суперпозицией двух логически различных входов. Поскольку число входов логического вентиля больше, чем число выходов, число входных состояний больше, чем число выходных, и работа такого вентиля необратима. Физически из этого, в частности, следует, что работа соответствующего физического устройства генерирует энтропию: *потеря одного бита информации порождает не менее одного бита энтропии, как меры недостатка информации о микросостоянии системы.*

Поскольку квантовая теория замкнутых систем всегда порождает обратимую (унитарную) эволюцию, необратимые логические вентили не могут быть смоделированы как замкнутые квантовые системы.

10.6.3 Обратимые классические вычисления

Унитарная квантовая эволюция, в отличие от классических алгоритмов, полностью обратима. Тем не менее любое классическое вычисление может быть модифицировано так, чтобы каждый шаг выполнялся обратимым образом, и всё вычисление в целом также было обратимым.

Для обратимых *классических* вычислений вход и выход всегда содержат одинаковое количество бит L и любое вычисление можно рассматривать как некоторое взаимно-однозначное отображение (перестановку) множества всех входов (состоит из 2^L элементов) на себя.

Такую перестановку можно представить матрицей $2^L \times 2^L$, в каждой строке и в каждом столбце которой имеется ровно одна единица, а остальные элементы — нули. Такая матрица является унитарной (обратима и сохраняет скалярное произведение), а значит может быть реализована как оператор эволюции некоторой квантовой системы с пространством состояний $\mathcal{H}_L = \mathbb{C}^{2^L}$ (см. Рис.10.1)

10.6.4 Обратимые вычисления

Для записи обратимых вычислений удобно использовать *обратимые логические операции* (они не подпадают под определение логической операции, данное выше). Обратимые логические операции являются взаимно-однозначными отображения множества входов (множество состояний l битов, которое имеет 2^l состояний) на множество выходов, которое также имеет 2^l состояний и может быть записано как множество состояний l битов.

Обратимая логическая операция может быть изображена графически (Рис.10.1) в виде *обратимого логического вентиля*: блока, имеющего равное число входов (однобитных аргументов) и выходов (битов для записи значения функции). Такая картинка полностью аналогична графическому представлению квантового оператора, действующего на сложную систему (см. 4.4.4 «Сравнение разных обозначений*») и действительно, действие такого вентиля на квантовую систему соответствует действию соответствующего унитарного оператора.

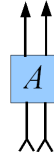


Рис. 10.1: Обратимый логический вентиль, действующий на два (ку)бита.

Доказано, что любое классическое вычисление может быть сделано обратимым. При этом достаточно применить конечное число разновидностей обратимых логических вентилях, например, достаточно одного универсального вентиля «управляемое не»:

$$\begin{array}{rcl} & 00 & \rightarrow 00 \\ & 01 & \rightarrow 01 \\ \text{«управляемое не»} & 10 & \rightarrow 11 \\ & 11 & \rightarrow 10 \end{array} \quad .$$

В операции «управляемое не» первый бит определяет применять ли операцию «не» ко второму биту, сам первый бит передаётся со входа на выход без изменений.

Обратимые вентили типа «управляемое не» могут быть реализованы в виде классических, или квантовых устройств. Однако такой вентиль переводит базисное состояние (в котором состояние всех битов задаётся как 0 или 1 и биты не зависят друг от друга) снова в базисные состояния.

Т.е. в процессе таких вычислений (вычислений в базисных состояниях) нигде не появляются квантовые суперпозиции и квантовая запутанность. Единственное преимущество квантовой реализации таких вычислений — теоретическая возможность вычисления без генерации энтропии, т.е. без диссипации энергии. Генерация энтропии и нагрев будут обязательно происходить только при необратимой очистке памяти и приготовлении исходного состояния компьютера.

10.6.5 Вентили сугубо квантовые

Чтобы построить универсальный квантовый в смысле приведённого выше определения необходимо дополнить описанный выше вентиль «управляемое не» несколькими сугубо квантовыми вентилями. Обычно берут однобитовые вентили

$$e^{i\alpha\sigma_x}, \quad e^{i\alpha\sigma_y}, \quad e^{i\alpha\sigma_z}, \quad H = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Доказано, что используя перечисленные вентили можно воспроизвести любое унитарное преобразование на пространстве состояний входа (пространстве состояний L кубитов) с любой наперёд заданной точностью.

10.6.6 Обратимость и уборка «мусора»

Переписывание какого-либо необратимого алгоритма в обратимом виде может привести к тому, что в схеме появятся дополнительные выходные биты, которые будут нести дополнительную информацию, которая не нужна для вычислений, но которая необходима, чтобы сделать вычисления обратимыми.

Т.е. результат вычисления можно записать так:

$$\hat{U}|\text{вход}, \underbrace{0 \dots 0}_{\text{выход}}, \underbrace{0 \dots 0}_{\text{доп. ячейки}}\rangle = |\text{вход}, \text{выход}, \underbrace{\text{вспомогательная информация}}_{\text{«мусор»}}\rangle.$$

Вспомогательная информация может мешать интерференции квантовых состояний, поэтому предпочтительно было бы иметь процесс вида

$$\hat{U}|\text{вход}, \underbrace{0 \dots 0}_{\text{выход}}, \underbrace{0 \dots 0}_{\text{доп. ячейки}}\rangle = |\text{вход}, \text{выход}, 0 \dots 0\rangle.$$

Это не нарушает обратимости оператора $\hat{U}$, т.к. вся информация, необходимая для обращения вычисления уже содержится в подсистеме ячеек «вход».

Доказано, что любое классическое вычисление всегда можно провести обратимым образом так, чтобы все дополнительные ячейки памяти, которые не используются для записи входа и выхода в начале и конце процесса были в состоянии 0 («ложь», «нет», «спин вниз» и т.п.).

Как правило, мы не можем «подсматривать» за промежуточными состояниями квантового компьютера, работающего в суперпозиции базисных состояний, чтобы не разрушить суперпозицию и не испортить вычисления. Однако, если мы заранее знаем, что на каком-то этапе вычислений в определённой ячейке обязательно должен быть 0, мы можем это проверить, и состояние квантового компьютера от этого не изменится.

Однако, если квантовые вентили реализуются не идеально точно, реальное состояние может чуть-чуть отличаться от желаемого, и мы можем вместо 0 обнаружить 1. Это будет означать ошибку квантового компьютера. Однако, если мы в самом деле обнаружим 1, то «неправильная» часть волновой функции системы обнулится и мы, убедившись что ошибки пока нет увеличим вероятность успешного завершения вычисления. По существу это разновидность квантового эффекта Зенона.

Глава 11

Симметрии-1 (теорема Нётер)

Наиболее естественно строить квантовую механику основываясь на понятии симметрии. Выше (5.1 «Квантовая механика замкнутой системы») временная эволюция была описана как преобразование симметрии, порождённое оператором энергии (гамильтонианом). Следуя за классической теоретической механикой, в которой теорема Эммы Нётер устанавливает связь между симметриями и законами сохранения, мы должны ожидать, что и другим преобразованиям симметрии будут соответствовать свои сохраняющиеся величины, причём сдвигу по координате должен соответствовать импульс.

Как мы увидим далее, квантовая теорема Нётер даже проще классической. Мы воспользуемся ей, чтобы ввести в квантовую механику ряд наблюдаемых, как имеющих классические аналоги (импульс, момент импульса), так и не имеющих (чётность, квазиимпульс).



Рис. 11.1: Эмма Нётер (1882–1935) W

11.1 Что такое симметрия в квантовой механике

Симметрия физической системы — это некоторое преобразование, которое переводит одни решения уравнений эволюции в другие решения того же уравнения¹. В частности стационарные состояния должны переходить в стационарные с той же энергией². Стационарные состояния образуют базис, поэтому достаточно проверить симметрию только для стационарных состояний.

Симметрии должны удовлетворять следующим условиям:

- пространство чистых состояний имеет структуру линейного пространства $\implies$ симметрии описываются линейными операторами;

¹Рассматривавшийся выше сдвиг нулевого уровня энергии (5.13) не подпадает под данное определение, поскольку преобразование $\psi(t) \rightarrow \psi(t)e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}}$ переводит решения уравнения Шрёдингера с гамильтонианом $\hat{H}$, в решения другого уравнения Шрёдингера, с гамильтонианом $\hat{H}' = \hat{H} + E_0 \hat{1}$.

²Если симметрия не зависит от времени. В данном разделе мы ограничимся этим случаем, хотя возможны и иные случаи, например, переход от одной инерциальной системы отсчёта к другой, движущейся относительно исходной равномерно и прямолинейно, является симметрией для свободной частицы, хотя и меняет уровни энергии.

- симметрия должна обладать свойством рефлексивности (если ψ симметрично ϕ , то и ϕ симметрично ψ) $\implies$ для всякого оператора симметрии существует обратный оператор, который тоже является симметрией;
- пространство чистых состояний наделено структурой скалярного произведения $\implies$ операторы симметрии должны сохранять скалярное произведение (а значит и вероятность).

Перечисленные три условия означают, что *симметрии описываются унитарными операторами*. ϕ симметрично ψ относительно симметрии $\hat{U}$ записывается как $\psi = \hat{U}\phi$, где $\hat{U}$ — унитарный оператор данной симметрии.

Пусть задан некоторый гамильтониан, для которого задан спектр:

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E.$$

Если унитарный оператор $\hat{U}$ является *симметрией данного гамильтониана*, то состояние $\hat{U}\psi_E$ также является собственным для того же гамильтониана с тем же собственным числом:

$$(\hat{H}\hat{U})\psi_E = \hat{H}(\hat{U}\psi_E) = E(\hat{U}\psi_E) = \hat{U}(\hat{H}\psi_E) = (\hat{U}\hat{H})\psi_E$$

Вычитая из первого выражения в цепочке равенств последнее получаем:

$$(\hat{H}\hat{U} - \hat{U}\hat{H})\psi_E = 0.$$

Состояния ψ_E образуют базис. Таким образом все базисные состояния обнуляются под действием оператора $[\hat{H}, \hat{U}] = \hat{H}\hat{U} - \hat{U}\hat{H}$, а значит данный оператор является нулевым:

$$[\hat{H}, \hat{U}] = \hat{H}\hat{U} - \hat{U}\hat{H} = 0. \quad (11.1)$$

Равенство нулю *коммутатора* (11.1) является необходимым и достаточным условием того, что унитарный оператор $\hat{U}$ является симметрией данного гамильтониана $\hat{H}$.

Из условия (11.1) следует, что эрмитов оператор $\hat{H}$ и унитарный оператор $\hat{U}$ могут быть диагонализированы одновременно, т.е. может быть построен базис, все элементы которого являются собственными функциями для обоих операторов. Следует иметь в виду, что не всякая функция собственная для одного оператора также является собственной для другого (такое возможно для собственных чисел, которым соответствуют несколько линейно независимых собственных функций).

11.2 Преобразования операторов «вместе» и «вместо»

Мы можем применять преобразования симметрии не только к состояниям, но и к операторам. Мы можем выполнять преобразования двумя способами:

- *Преобразование «вместе»*: операторы преобразуются вместе с состояниями, так, чтобы изменение операторов компенсировало изменение состояний и все матричные элементы оставались теми же, что и до преобразования:

$$\psi \rightarrow \hat{U}\psi, \quad \hat{A} \rightarrow \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger, \quad \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle \rightarrow \langle \phi | \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{U}}_{\hat{1}} \hat{A} \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{U}}_{\hat{1}} | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle.$$

- *Преобразование «вместо»*: операторы преобразуются вместо состояний, так, чтобы изменение операторов и изменение состояний давало одинаковое преобразование матричных элементов:

$$\begin{aligned} \psi &\rightarrow \hat{U}\psi, & \hat{A} &\rightarrow \hat{A}, & \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle &\rightarrow \langle\phi|\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}|\psi\rangle, \\ & & \text{или} & & & \\ \psi &\rightarrow \psi, & \hat{A} &\rightarrow \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}, & \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle &\rightarrow \langle\phi|\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}|\psi\rangle. \end{aligned}$$

Таким образом, преобразования операторов «вместе» и «вместо» осуществляются с помощью обратных операторов.

Преобразования «вместе» естественно применять для описания пассивных преобразований, когда преобразования состояния системы трактуются как замена базиса. В этом случае преобразование операторов вместе с состояниями соответствует их переписыванию в новом базисе.

Преобразования «вместо» естественно применять для описания активных преобразований, когда преобразования состояния системы трактуются как изменение физического состояния системы. В этом случае преобразование операторов вместо состояний даёт альтернативное описание того же самого преобразования. Например, преобразование операторов от представления Шрёдингера к представлению Гейзенберга это преобразование операторов «вместо» преобразования состояний, задававшего унитарную эволюцию в представлении Шрёдингера.

11.2.1 Непрерывные преобразования операторов и коммутаторы

Пусть оператор $\hat{A}$ подвергается однопараметрическому преобразованию «вместе» $\hat{U}_\alpha$:

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A}_\alpha = \hat{U}_\alpha \hat{A} \hat{U}_\alpha^\dagger, \quad \hat{U}_\alpha = e^{i\alpha\hat{B}}$$

Дифференцируя $\hat{A}_\alpha$ по параметру α получаем коммутатор оператора $\hat{A}_\alpha$ и генератора преобразования $\hat{B}$:

$$\frac{d\hat{A}_\alpha}{d\alpha} = (i\hat{B})\hat{U}_\alpha \hat{A} \hat{U}_\alpha^\dagger + \hat{U}_\alpha \hat{A} \hat{U}_\alpha^\dagger (-i\hat{B}) = i[\hat{B}, \hat{A}_\alpha]. \quad (11.2)$$

Положив $\alpha = 0$ получаем необходимое и достаточное условие инвариантности оператора при однопараметрическом преобразовании («вместе» или «вместо» — не важно):

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0.$$

11.3 Непрерывные симметрии и законы сохранения

В классической механике каждой симметрии, параметризуемой непрерывным параметром, в соответствии с теоремой Эммы Нётер соответствует закон сохранения. Если выбором координат свести такую симметрию к сдвигу по какой-то обобщённой координате (однородность по обобщённой координате), то такой сохраняющейся величиной можно выбрать обобщённый импульс вдоль этой координаты. Т.е. если функция Гамильтона $H(Q, P)$ не зависит от координаты Q_i , то есть если $\frac{\partial H(Q, P)}{\partial Q_i} = 0$, то в силу уравнения Гамильтона $\frac{\partial H(Q, P)}{\partial Q_i} = -\dot{P}_i$, импульс P_i не зависит от времени.

Получим квантовый аналог теоремы Нётер. Пусть имеется однопараметрическая группа симметрий гамильтониана $\hat{H}$ с непрерывным параметром $\alpha \in \mathbb{R}$:

$$\hat{U}_{\alpha_1} \hat{U}_{\alpha_2} = \hat{U}_{\alpha_1 + \alpha_2}, \quad (11.3)$$

$$\hat{U}_{\alpha}^{-1} = \hat{U}_{-\alpha}, \quad (11.4)$$

$$\hat{U}_0 = \hat{1}, \quad (11.5)$$

$$[\hat{H}, \hat{U}_{\alpha}] = 0. \quad (11.6)$$

Частный случай однопараметрической группы симметрии сдвига по времени (5.4)–(5.6) уже рассматривался при выводе уравнения Шрёдингера. И подобно тому, как из сдвига по времени $\hat{U}_t$ получается оператор Гамильтона (оператор Гамильтона отвечает энергии, той самой величине, сохранение которой следует из однородности времени по теореме Нётер), из симметрии $\hat{U}_{\alpha}$ получится эрмитов оператор некоторой сохраняющейся величины.

Дифференцируя (11.6) по параметру α получаем:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} [\hat{H}, \hat{U}_{\alpha}] \Big|_{\alpha=0} = \left[\hat{H}, \frac{\partial \hat{U}_{\alpha}}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=0} \right] = 0.$$

Обозначим

$$\hat{A} = -i\hbar \frac{\partial \hat{U}_{\alpha}}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=0} \Rightarrow \hat{U}_{\alpha} = e^{\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{A}}. \quad (11.7)$$

(по сравнению с (5.9) здесь выбран другой знак). Полностью аналогично (5.10)

$$\hat{U}_{d\alpha}^{\dagger} = \left(\hat{1} - d\alpha \frac{\hat{A}}{i\hbar} + o(d\alpha) \right)^{\dagger} = \hat{1} + d\alpha \frac{\hat{A}^{\dagger}}{i\hbar} + o(d\alpha), \quad (11.8)$$

$$\begin{aligned} \hat{U}_{d\alpha}^{\dagger} &= \hat{U}_{d\alpha}^{-1} = \left(\hat{1} - d\alpha \frac{\hat{A}}{i\hbar} + o(d\alpha) \right)^{-1} = \hat{1} + d\alpha \frac{\hat{A}}{i\hbar} + o(d\alpha), \\ \Rightarrow \quad \hat{A} &= \hat{A}^{\dagger}. \end{aligned}$$

Таким образом мы получаем эрмитов оператор $\hat{A}$, для которого коммутатор с гамильтонианом обнуляется

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0. \quad (11.9)$$

Эрмитовы операторы $\hat{H}$ и $\hat{A}$ могут быть одновременно диагонализированы. Т.е. математически (11.9) не имеет преимуществ перед (11.1), но имеется преимущество с точки зрения физического смысла, поскольку эрмитовой величине соответствует некоторая измеряемая величина. Энергия и физическая величина, соответствующая оператору $\hat{A}$ могут быть одновременно измерены.

Далее мы рассмотрим ряд важных примеров квантовых законов сохранения.

11.3.1 Сохранение единичного оператора

Заметим, что любой гамильтониан симметричен относительно одновременного умножения всех волновых функций на одинаковый фазовый множитель $e_{\alpha} = e^{i\alpha}$, $\alpha \in \mathbb{R}$, $|e_{\alpha}| = 1$. Умножение на e_{α} может рассматриваться как действие унитарного оператора $\hat{e}_{\alpha} = e_{\alpha} \cdot \hat{1}$ из группы $U(1)$. Мы получаем однопараметрическую симметрию, для которой сохраняющаяся физическая величина задаётся единичным

оператором $\hat{1} = -i \frac{\partial \hat{e}_\alpha}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=0}$, который, очевидно, коммутирует с любым оператором, а значит сохраняется для любого гамильтониана.³

11.3.2 Обобщённый импульс

Пусть симметрией системы является сдвиг вдоль обобщённой координаты Q_i на произвольную величину a . Т.е. оператор симметрии $\hat{T}_a$ действует следующим образом:

$$\hat{T}_a \psi(Q_i, q) = \psi(Q_i + a, q) = \psi(Q_i, q) + a \frac{\partial}{\partial Q_i} \psi(Q_i, q) + \dots + \frac{1}{n!} \left(a \frac{\partial}{\partial Q_i} \right)^n \psi(Q_i, q) + \dots \quad (11.10)$$

Здесь состояние ψ записано как волновая функция, аргументами которой являются координата Q_i и некоторый набор физических величин q , образующий вместе с Q_i полный набор независимых переменных. Далее мы разложили волновую функцию в степенной ряд по параметру a . Сравнив $\hat{T}_a \psi(Q_i, q)$ с получившимся рядом, получаем

$$\hat{T}_a = \hat{1} + a \frac{\partial}{\partial Q_i} + \dots + \frac{1}{n!} \left(a \frac{\partial}{\partial Q_i} \right)^n + \dots = e^{a \frac{\partial}{\partial Q_i}} = e^{\frac{i}{\hbar} a (-i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_i})} = e^{\frac{i}{\hbar} a \hat{P}_i}. \quad (11.11)$$

Здесь мы ввели обозначение для оператора обобщённого импульса вдоль координаты Q_i

$$\hat{P}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_i} = -i\hbar \frac{\partial \hat{T}_a}{\partial a} \Big|_{a=0}. \quad (11.12)$$

Для обычной декартовой координаты в роли обобщённого импульса выступает проекция обыкновенного механического импульса на выбранную ось. Для угла поворота вокруг некоторой оси в роли обобщённого импульса выступит проекция момента импульса на данную ось.

Собственные функции для оператора (11.12) зависят от координаты Q_i как волны де Бройля

$$\psi_p(Q_i, q) = c(q) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot Q_i} \quad (11.13)$$

Если обобщённая координата $Q_i \in \mathbb{R}$, то спектр непрерывен, и собственное число p пробегает всю действительную ось $p \in \mathbb{R}$. Если координата Q_i пробегает конечный интервал $[0, Q_{\max}]$ с периодическими граничными условиями (например, если Q_i — угол вокруг какой-либо оси, $Q_{\max} = 2\pi$, а P_i — проекция момента импульса на эту ось), то спектр оператора $\hat{P}_i$ дискретен, и $\frac{p \cdot Q_{\max}}{2\pi\hbar} \in \mathbb{Z}$. Устремляя $Q_{\max}$ к бесконечности мы можем совершить предельный переход к непрерывному спектру.

Для определённого таким образом обобщённого импульса и соответствующей

³Описанная симметрия и отвечающий ей «закон сохранения» представляются тривиальными и малоинтересными, но после некоторой модификации они окажутся интересными для систем с переменным числом частиц с точки зрения сохранения заряда.

координаты мы можем получить коммутационное соотношение $[\hat{Q}, \hat{P}]$:⁴

$$\begin{aligned} [\hat{Q}, \hat{P}]\psi &= (\hat{Q}\hat{P} - \hat{P}\hat{Q})\psi = Q \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial Q} \psi \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial Q} (Q\psi) \right) = i\hbar\psi, \\ [\hat{Q}, \hat{P}] &= i\hbar. \end{aligned} \quad (11.14)$$

Мы получили коммутационное соотношение (11.14) для случая, когда волновая функция является функцией обобщённой координаты Q , и, соответственно, оператор $\hat{Q}$ сводится к умножению на Q , а оператор $\hat{P}$ записывается как $\hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q}$, однако полученный ответ может быть использован в любом представлении пространства чистых состояний (волновых функций).

Если система состоит из нескольких невзаимодействующих подсистем, с одинаковой симметрией сдвига вдоль какой-то одной и той же координаты, то сохраняться будут обобщённые импульсы вдоль этой координаты для всех подсистем и любые их комбинации. Однако, если подсистемы взаимодействуют, то симметрия относительно сдвига только одной подсистемы может оказаться нарушенной. Сохранится же в общем случае только симметрия относительно одновременного сдвига соответствующих координат всех подсистем на одну и ту же величину a . В этом случае для системы мы имеем только один закон сохранения суммарного обобщённого импульса по данной координате, отвечающий этому одновременному сдвигу. Не теряя общности для двух подсистем можем записать:

$$\begin{aligned} \hat{T}_a \psi(Q_i^1, Q_i^2, q) &= \psi(Q_i^1 + a, Q_i^2 + a, q) = \\ &= \psi(Q_i^1, Q_i^2, q) + a \left(\frac{\partial}{\partial Q_i^1} + \frac{\partial}{\partial Q_i^2} \right) \psi(Q_i^1, Q_i^2, q) + \dots \\ &+ \frac{1}{n!} a^n \left(\frac{\partial}{\partial Q_i^1} + \frac{\partial}{\partial Q_i^2} \right)^n \psi(Q_i^1, Q_i^2, q) + \dots \end{aligned} \quad (11.15)$$

$$\hat{T}_a = e^{a \left(\frac{\partial}{\partial Q_i^1} + \frac{\partial}{\partial Q_i^2} \right)} = e^{\frac{i}{\hbar} a \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_i^1} - i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_i^2} \right)} = e^{\frac{i}{\hbar} a \hat{P}_i} = e^{\frac{i}{\hbar} a (\hat{P}_i^1 + \hat{P}_i^2)}. \quad (11.16)$$

$$\begin{aligned} \hat{P}_i &= \hat{P}_i^1 + \hat{P}_i^2 = -i\hbar \left. \frac{\partial \hat{T}_a}{\partial a} \right|_{a=0}, \\ \hat{P}_i^1 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_i^1}, \\ \hat{P}_i^2 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_i^2}. \end{aligned} \quad (11.17)$$

Т.е. как и в классической механике суммарный обобщённый импульс вдоль координаты Q_i задаётся как сумма импульсов отдельных подсистем.

⁴На самом деле не всё так просто. Область определения коммутатора $[\hat{Q}, \hat{P}]$ включает только векторы, на которые определено действие операторов $\hat{Q}$, $\hat{P}$, в то время как область определения оператора умножения на число $i\hbar$ — всё пространство $\mathcal{H}$. Таким образом, коммутатор $[\hat{Q}, \hat{P}]$ должен быть доопределён на всех тех состояниях, которые первоначально не попали в его область определения. Такое доопределение особенно осложняется в случае периодических граничных условий по координате. Как ни странно, игра на этих «чисто математических» тонкостях позволяет получить нетривиальные физические результаты, которые мы обсудим далее.

Мы видим, что наиболее общей оказывается формула для обобщённого импульса, как для генератора симметрии сдвига (трансляции)

$$\hat{P}_i = -i\hbar \left. \frac{\partial \hat{T}_a}{\partial a} \right|_{a=0} \Leftrightarrow \hat{T}_a = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{P}_i a}. \quad (11.18)$$

Формула (11.18) связывает его с соответствующей однопараметрической симметрией, при этом не важно, является ли система сложной или составной, в каком виде записаны волновые функции (через какие переменные они выражены), и записывается ли симметрия как сдвиг по соответствующим координатам (11.10), (11.15), или как-то иначе.⁵

11.3.3 Обобщённая координата*

В коммутационное соотношение (11.14) $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar$ координата и импульс входят почти (с точностью до знака) симметрично. Если мы сделаем замену

$$\hat{Q} \rightarrow \hat{P}, \quad \hat{P} \rightarrow -\hat{Q},$$

то соотношение перейдёт в себя.⁶

Таким образом, в импульсном представлении, получаемом из координатного преобразованием Фурье, операторы координаты и импульса приобретают вид

$$\hat{P} = P, \quad \hat{Q} = i\hbar \frac{\partial}{\partial P}.$$

Отсюда следует, что оператор

$$\hat{S}_b = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{Q}b} = e^{b \frac{\partial}{\partial P}}.$$

является оператором сдвига по импульсу на b :

$$\hat{S}_b \psi(P) = \psi(P + b).$$

Разумеется, определение $\hat{S}_b = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{Q}b}$ как оператора сдвига по импульсу не зависит от того, в каком представлении мы работаем. Например, в координатном представлении оператор $\hat{S}_b$ действует простым умножением волновой функции $\psi(Q)$ на волну де Бройля $e^{-\frac{i}{\hbar} Qb}$. В частности, если волновая функция является собственной для оператора импульса, то получаем

$$\underbrace{\hat{S}_b}_{e^{-\frac{i}{\hbar} bQ}} \underbrace{\psi_{p_0}(Q)}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 Q}} = \underbrace{\psi_{p_0-b}(Q)}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{i}{\hbar} (p_0-b)Q}}.$$

Функции ψ_{p_0} образуют базис, таким образом мы проверили, что оператор $\hat{Q}_b$ производит сдвиг по импульсу также и в координатном представлении.

Если мы разлагаем потенциал $\hat{U}(Q)$ в ряд или интеграл Фурье, то мы тем самым представляем его в виде суперпозиции операторов сдвига по импульсу.

⁵В частности именно через формулу (11.18) для поворотов вводятся операторы момента импульса с учётом спина (простой сдвиг по углам позволяет «поймать» только орбитальные моменты).

⁶В теоретической механике замена координат в фазовом пространстве, сохраняющая скобку Пуассона называется *канонической заменой координат*.

Если потенциал разлагается в ряд Фурье, то для функции с периодом a получаем:

$$\hat{U}(Q) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} u_n e^{i\frac{2\pi n}{a}Q} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} u_n \hat{S}_{-\frac{2\pi\hbar}{a}n}.$$

Таким образом, периодический с периодом a потенциал разлагается в линейную комбинацию сдвигов по импульсу кратных периоду обратной решётки $\frac{2\pi\hbar}{a}$. Это означает, что импульс под действием периодического потенциала $\hat{U}(Q)$ сохраняется с точностью до целого числа периодов обратной решётки и если мы введём параметр, называемый *квазиимпульсом*

$$q = P + \frac{2\pi\hbar}{a}n, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad q \in [0, \frac{2\pi\hbar}{a}),$$

то он будет сохраняться. Это утверждение называется *теоремой Блоха*. Мы ещё раз рассмотрим эту теорему и понятие квазиимпульса ниже 11.4.3 «Квазиимпульс*».

Свёртка и её физический смысл для потенциала и состояния

В общем случае нам удобно определить преобразование Фурье следующим образом:

$$\hat{U}(Q) = \int u(p) e^{\frac{i}{\hbar}pQ} dp = \int u(p) \hat{S}_{-p} dp, \quad u(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int U(Q) e^{-\frac{i}{\hbar}pQ} dQ.$$

(Ф) Преобразование Фурье при таком выборе коэффициентов не является унитарным, зато оно имеет другой хороший физический смысл — разложение по операторам сдвига по импульсу. Таким образом, «естественное» преобразование Фурье для потенциалов записывается иначе, чем «естественное» преобразование Фурье для волновых функций (сохраняющее скалярное произведение).

Действуя оператором $\hat{U}(Q)$, записанным через интеграл Фурье на волновую функцию в импульсном представлении получаем

$$\hat{U}(Q)\psi(P) = \int u(p) \hat{S}_{-p} \psi(P) dp = \int u(p) \psi(P - p) dp.$$

Последнее выражение называется *свёрткой функций* $u(p)$ и $\psi(P)$. Свёртка функций в данном случае имеет физический смысл суперпозиции сдвигов состояния ψ на всевозможные импульсы $-p$ с амплитудой $u(p)$.

Напоминаем, что в координатном представлении оператор $\hat{U}(Q)$ действует точечным умножением волновой функции $\psi(Q)$ на функцию $U(Q)$.

11.4 Законы сохранения для ранее дискретных симметрий

В классической механике мы различаем непрерывные симметрии, которым соответствуют законы сохранения, и дискретные симметрии (такие как зеркальная симметрия), которым законов сохранения не достаётся. В квантовой механике дискретных симметрий нет: любой симметрии соответствует некий эрмитов оператор, экспонента от которого позволяет вставить дискретную симметрию в непрерывную группу симметрий.

Для того, чтобы поставить в соответствие унитарному оператору $\hat{U}$ сохраняющуюся наблюдаемую (и не внести при этом лишнюю симметрию), достаточно найти эрмитов оператор $\hat{A}$, который коммутирует со всеми наблюдаемыми, с которыми коммутирует $\hat{U}$, и только с ними. Для этого все собственные векторы оператора $\hat{U}$, и только они, должны быть собственными для оператора $\hat{A}$.

Для того, чтобы задать оператор $\hat{A}$ достаточно задать его действие на все вектора некоторого базиса. Таким образом, если для каждого вектора некоторого базиса собственных векторов оператора $\hat{U}$ мы зададим вещественные собственные числа, то тем самым будет задан некоторый эрмитов оператор (коммутирующий с $\hat{U}$).

Эрмитов оператор, отвечающий симметрии $\hat{U}$ следует строить так, чтобы одинаковым собственным числам оператора $\hat{U}$, соответствовали одинаковые собственные числа оператора $\hat{A}$, а разным — разные. Такой оператор автоматически будет коммутировать/не коммутировать с теми же операторами, что и $\hat{U}$.

Удобнее всего подобрать эрмитов оператор $\hat{A}$ как генератор симметрии, чтобы экспонента от него давала унитарный оператор:

$$\hat{U} = e^{i\alpha_0 \hat{A}}, \quad \alpha_0 \in \mathbb{R} \quad (11.19)$$

При этом унитарные оператор оказывается элементом однопараметрической группы:

$$\hat{U} = U_{\alpha_0}, \quad \hat{U}_\alpha = e^{i\alpha \hat{A}}, \quad \alpha_0, \alpha \in \mathbb{R}.$$

Собственные числа операторов $\hat{U}$ и $\hat{A}$, соответствующие одному собственному вектору номер k , связаны соотношением

$$u_k = e^{ia_k}.$$

Таким образом, значение a_k определено с точностью периода 2π , поскольку $e^{ia_k} = e^{i(a_k + 2\pi n)}$, $n \in \mathbb{Z}$, но при этом если $u_k = u_m$, то следует выбирать $a_k = a_m$, чтобы не привнести лишнюю симметрию (ниже в разделе 11.4.3, при рассмотрении симметрии относительно сдвига на период, мы увидим важность этого замечания).

11.4.1 Зеркальная симметрия и не только

Рассмотрим некоторый оператор $\hat{I}$, задающий непрерывное линейное преобразование волновых функций, двукратное повторение которого приводит к тождественному преобразованию.

$$\hat{I}\hat{I} = \hat{I}^2 = \hat{1} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{I} = \hat{I}^{-1}.$$

Если этот оператор кроме того сохраняет скалярное произведение в пространстве волновых функций, т.е. если

$$\hat{I}^\dagger \hat{I} = \hat{1},$$

то он оказывается одновременно унитарным и эрмитовым:

$$\hat{I} = \hat{I}^{-1} = \hat{I}^\dagger. \quad (11.20)$$

К числу таких операторов, очевидно, можно отнести оператор зеркальной симметрии (*оператор инверсии* по координате x):

$$\hat{I}_{\text{зерк.}x} \psi(x) = \psi(-x).$$

Все собственные числа эрмитова оператора должны быть вещественны. Все собственные числа унитарного оператора должны по модулю равняться единице. Таким образом, оператор, который одновременно унитарен и эрмитов может иметь в качестве собственных чисел только ± 1 .⁷

Операторы

$$\hat{P}_+ = \frac{\hat{1} + \hat{I}}{2}, \quad \hat{P}_- = \frac{\hat{1} - \hat{I}}{2}$$

оказываются проекторами на подпространства состояний, отвечающие собственным числам $+1$ и -1 соответственно (Проверьте!):

$$\begin{aligned} \hat{P}_+^2 &= \hat{P}_+, \quad \hat{P}_-^2 = \hat{P}_-, \quad \hat{P}_+ \hat{P}_- = \hat{P}_- \hat{P}_+ = 0, \\ \hat{I}(\hat{P}_+ \psi) &= +1 \cdot (\hat{P}_+ \psi), \quad \hat{I}(\hat{P}_- \psi) = -1 \cdot (\hat{P}_- \psi). \end{aligned}$$

Если оператор $\hat{I}$ оказывается симметрией гамильтониана $\hat{H}$, то (11.1)

$$[\hat{H}, \hat{I}] = 0, \quad (11.21)$$

и, поскольку оператор $\hat{I}$ является одновременно эрмитовым, то в качестве сохраняющейся измеряемой величины мы можем выбрать его же. Таким образом, условие (11.21) одновременно выступает в роли закона сохранения (11.9).

Поскольку оператор $\hat{I}$ эрмитов, экспонента $e^{i\alpha\hat{I}}$ должна быть унитарным оператором.

$$e^{i\alpha\hat{I}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^k}{k!} \hat{I}^k = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^{2l}}{(2l)!} \hat{I}^{2l} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^{2l+1}}{(2l+1)!} \hat{I}^{2l+1}$$

Поскольку $\hat{I}^{2l} = \hat{1}$, $\hat{I}^{2l+1} = \hat{I}$, вынося за сумму операторы получаем

$$e^{i\alpha\hat{I}} = \hat{1} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \alpha^{2l}}{(2l)!} + i\hat{I} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \alpha^{2l+1}}{(2l+1)!} = \hat{1} \cos \alpha + \hat{I} i \sin \alpha. \quad (11.22)$$

Таким образом, мы почти (с точностью до фазового множителя) вставили оператор $\hat{I}$ в однопараметрическую группу унитарных преобразований:

$$e^{i0\hat{I}} = \hat{1}, \quad e^{i\frac{\pi}{2}\hat{I}} = i\hat{I}.$$

Поскольку $i = e^{i\frac{\pi}{2}}$ мы можем модифицировать формулу так, чтобы $\hat{I}$ попал в однопараметрическую группу:

$$e^{-i\alpha} \cdot e^{i\alpha\hat{I}} = e^{i\alpha(\hat{I}-\hat{1})}. \quad (11.23)$$

Теперь

$$e^{i0(\hat{I}-\hat{1})} = \hat{1}, \quad e^{i\frac{\pi}{2}(\hat{I}-\hat{1})} = e^{-i\pi\hat{P}_-} = \hat{I}.$$

⁷Случай когда имеется только одно собственное число неинтересен, поскольку в этом случае оператор оказывается единичным, или минус-единичным: $\pm\hat{1}$.

11.4.2 Чётность*

— Ну, как, Китти, хочешь жить в Зеркальном доме? Интересно, дадут тебе там молока? Впрочем, не знаю, можно ли пить зазеркальное молоко? Не повредит ли оно тебе, Китти. . .

Льюис Кэрролл, «Алиса в Зазеркалье»

Оператор зеркальной симметрии $\hat{I}_{\text{зерк.}x}$, который появился выше, обычно используется в одномерных задачах. Собственные функции с собственным числом $+1$ — любые чётные волновые функции, Собственные функции с собственным числом -1 — любые нечётные волновые функции. Поэтому соответствующая физическая величина называется *чётностью*.⁸

Для трёхмерных многочастичных задач рассматривается *оператор пространственной чётности* $\hat{P} = \hat{I}_{\text{зерк.}x} \hat{I}_{\text{зерк.}y} \hat{I}_{\text{зерк.}z}$, который аналогичным образом меняет все декартовы координаты всех частиц системы.⁹

Многие квантовые модели (т.е. многие гамильтонианы) коммутируют с оператором $\hat{P}$, т.е. для них выполняется *закон сохранения чётности*. Сохранение чётности означает, что если в начальный момент времени система описывалась чётной волновой функцией ($\hat{P}\psi = \psi$), или нечётной ($\hat{P}\psi = -\psi$), то в последующие моменты времени чётность волновой функции сохранится.

Сохранение чётности также означает, что состояния ψ и $\hat{P}\psi$ должны вести себя одинаково (см. рассуждения в начале раздела 11.1). Иными словами, система, отражённая по трём осям (или по одной оси, если есть ещё изотропность, т.е. симметрия относительно поворотов) описывается теми же законами (тем же гамильтонианом), что и исходная система: смотря в зеркало нельзя понять, что мы видим отражение, а не реальные объекты.

Закон сохранения чётности был введён в 1927 году Юджином Вигнером, и долгое время считалось очевидным, что сохранение чётности должно быть универсальным законом природы, пока *нарушение чётности* не было обнаружено экспериментально. Оказалось, что при слабом взаимодействии объект и его зеркальное отражение ведут себя по-разному, в частности, при β -распаде рождаются исключительно антинейтрино, закрученные по часовой стрелке¹⁰ (относительно направления вылета).

11.4.3 Квазиимпульс*

Рассмотрим симметрию относительно сдвига на период a вдоль координатной оси x . Такой симметрией обладает, например, гамильтониан частицы во внешнем периодическом потенциале.¹¹

⁸Помимо рассматриваемой здесь *пространственной чётности* могут вводиться другие величины, в названии которых используется слово «чётность». Всем им соответствуют операторы, удовлетворяющие условию (11.20). При этом собственные пространства, отвечающие обоим собственным числам (-1 и $+1$) бесконечномерны.

⁹Вместо произведения трёх отражений можно взять одно отражение и поворот на π в зеркальной плоскости.

¹⁰Под «закрученностью» следует понимать направление собственного момента импульса частицы — спина. Подразумевается, что зеркальная симметрия и пространственная чётность действуют также на зависимость волновых функций от спиновых переменных, «переворачивая» спин должным образом (если этого не делать, то пространственная чётность нарушится ещё раньше).

¹¹Это очень важный пример, соответствующий частице внутри идеального кристалла.

Соответствующий унитарный оператор $\hat{T}_a$, как мы уже знаем, записывается через экспоненту от оператора импульса по данной оси $\hat{p}_x$:

$$\hat{T}_a = e^{\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x}.$$

Однако сохранение импульса, как мы уже видели в разделе 11.3.2, подразумевает большую симметрию — симметрию относительно сдвига на произвольное расстояние. Выше, во вводной части раздела 11.4, мы уже упоминали, что генератор симметрии может быть выбран неоднозначно, причём не все генераторы могут соответствовать сохраняющимся величинам.

Каковы собственные функции и числа для оператора $\hat{T}_a$? Если координата x пробегает значения от $-\infty$ до $+\infty$, то собственные числа — все единичные комплексные числа $|u| = 1$. Т.е.

$$u = e^{i\alpha} = e^{i(\alpha + 2\pi n)} = u_q = e^{\frac{i}{\hbar} a q} = e^{\frac{i}{\hbar} a (q + \frac{2\pi\hbar}{a} n)}, \quad \alpha, q \in \mathbb{R}, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Здесь мы параметризовали собственные числа u параметром q , имеющим размерность *импульса*. Параметр q называют *квазиимпульсом*. Квазиимпульс определён с точностью до прибавления целого числа умноженного на $\frac{2\pi\hbar}{a}$. Это число называют *периодом обратной решётки*. Мы можем выбрать все квазиимпульсы из интервала длиной в период обратной решётки, например из интервала $(\frac{\pi\hbar}{a}, \frac{\pi\hbar}{a}]$. Таким образом, мы поставили в соответствие разным собственным числам оператора $\hat{T}_a$ разные вещественные числа, а одинаковым — одинаковые, и определили тем самым *оператор квазиимпульса*, для которого эти вещественные числа q являются собственными с собственными функциями ψ_{u_q} .

По определению оператора сдвига $\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x + a)$, по определению собственного вектора $\hat{T}_a \psi_u = u \psi_u$. Таким образом, собственная функция удовлетворяет условию

$$\psi_u(x + a) = u \psi_u(x). \quad (11.24)$$

Для гамильтонианов коммутирующих с $\hat{T}_a$, собственные функции можно искать среди собственных функций оператора $\hat{T}_a$. В этом случае уравнение (11.24) позволяет продолжить волновую функцию с отрезка длиной a на всю вещественную прямую, задействовав тем самым симметрию относительно сдвига на период.

При $|u| = 1$ интеграл по периоду

$$\int_{x_0-a}^{x_0} |\psi_u(x)|^2 dx = |u|^2 \int_{x_0}^{x_0+a} |\psi_u(x)|^2 dx$$

не зависит от x_0 . Если координата $x \in \mathbb{R}$, то ψ_u не нормируема на единицу, как и должно быть, раз ψ_u принадлежат непрерывному спектру.

Вместо $x \in \mathbb{R}$ мы можем рассматривать интервал $x \in [x_0, x_0 + N \cdot a]$ с периодическими граничными условиями для ψ . В этом случае допустимы только собственные числа для которых

$$u^N = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{Naq}{2\pi\hbar} \in \mathbb{Z}.$$

Таких собственных чисел имеется N штук (корни N -й степени из единицы). Интеграл от $|\psi_u|^2$ по конечному интервалу $x \in [x_0, x_0 + N \cdot a]$ оказывается конечен, а спектр становится дискретным. Устремляя N к бесконечности мы можем совершить предельный переход от дискретного к непрерывному случаю.

Глядя на (11.24) можно понять физический смысл условия $|u| = 1$. Если это условие нарушается, то $|u| > 1$, или $|u| < 1$. В первом случае модуль волновой функции неограниченно возрастает при последовательных сдвигах на a , а во втором — при последовательных сдвигах на $-a$. Тем не менее волновые функции ψ_u при $|u| \neq 1$ могут быть полезны при рассмотрении кристаллической решётки, которая конечна, или бесконечна только в одну сторону, а также кристаллической решётки с дефектами. Такие функции могут описывать экспоненциальное затухание волновой функции частицы вглубь кристалла, когда частица отражается от кристалла, или локализована на дефекте.

В некоторых случаях волновую функцию вида (11.24) представляют в виде произведения волны де Бройля с импульсом q на периодическую функцию с периодом a :

$$\psi_u(x) = e^{\frac{i}{\hbar} x q} \phi(x), \quad \phi(x) = \phi(x + a). \quad (11.25)$$

Утверждение (11.25) называют *теоремой Блоха*. Очевидно, что (11.24) равносильно (11.25).



Рис. 11.2:
Феликс Блох
(1905–1983)

Глава 12

Гармонический осциллятор

Гармонический осциллятор (грузик на пружинке) очень любим в теоретической механике, поскольку гармонический осциллятор — точно решаемая система, во многих случаях хорошо описывающая в первом приближении малые колебания различных систем. Эти достоинства гармонического осциллятора сохраняются и в квантовой механике.

На самом деле, в квантовой механике гармонический осциллятор любят даже больше чем в классической. Это связано с тем, что гармонический осциллятор приобретает фундаментальное значение при рассмотрении квантованных бозонных полей (в том числе электромагнитного поля), которые без учёта взаимодействия описываются набором невзаимодействующих квантовых гармонических осцилляторов (см. ниже раздел 12.9).

Решать задачу о квантовом гармоническом осцилляторе можно многими разными способами. Метод лестничных операторов, который вводится здесь, не является универсальным способом решения задач квантовой механики: он хорош только для гармонического осциллятора и похожих на него систем, однако именно этот способ задаёт специальный язык, который интенсивно используется во многих разделах квантовой теории, включая квантовую теорию поля (КТП).

Знакомство с данным методом очень полезно для изучающих квантовую теорию. Помимо того, что этот способ просто красив, он приучает столкнувшись с задачей хорошенько подумать, прежде чем писать уравнение Шрёдингера в форме дифференциального уравнения (хотя бы потому, что дифференциальные уравнения могут вообще не понадобиться).

Как обычно, начнём решение задачи с выписывания соответствующего гамильтониана. Удобно записывать уравнения не через жёсткость пружины k , а через собственную циклическую частоту $\omega = \sqrt{k/m}$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k\hat{x}^2}{2} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}. \quad (12.1)$$

12.0.4 Обезразмеривание

Для упрощения выкладок полезно обезразмерить гамильтониан, представив его в виде (число с размерностью энергии) $\times$ (безразмерный оператор). «Число с размерностью энергии» удобно взять не случайным образом, а естественным, т.е. скомбинировать константу с размерностью энергии из параметров задачи. Из унаследованных от классического осциллятора параметров m и ω составить константу с размерностью энергии («естественную единицу энергии») для гармонического

осциллятора невозможно, однако в квантовой задаче у нас появляется ещё один масштаб — постоянная Планка $\hbar$, имеющая размерность действия. Эта размерность может быть представлена как (действие) = (масса) $\times$ (длина)²/(время) = (энергия) $\times$ (время) = (импульс) $\times$ (длина). Произведение $\hbar\omega$ имеет как раз размерность энергии, вынося его за скобку получаем

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\frac{\hat{p}^2}{2\hbar\omega m} + \frac{m\omega\hat{x}^2}{2\hbar} \right). \quad (12.2)$$

От постоянных множителей в скобках мы можем избавиться выбрав подходящие единицы измерения координаты и импульса. Поскольку выражение в скобках безразмерно, новые координата $\hat{Q}$ и импульс $\hat{P}$ оказываются безразмерными:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\frac{\hat{P}^2}{2} + \frac{\hat{Q}^2}{2} \right), \quad (12.3)$$

$$\hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar\omega m}} = \frac{\hat{p}}{p_0}, \quad \hat{Q} = \hat{x} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \frac{\hat{x}}{x_0}. \quad (12.4)$$

$$p_0 = \sqrt{\hbar\omega m}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad p_0 x_0 = \hbar \quad (12.5)$$

— осцилляторные единицы импульса, координаты и действия (последняя, естественно, совпадает с постоянной Планка $\hbar$). До сих пор все наши выкладки можно было один к одному повторить для классического осциллятора стерева шляпки над буквами и считая $\hbar$ просто некоторой константой с размерностью действия.

Поскольку коммутатор координаты и импульса $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ имеет в квантовой механике фундаментальное значение, перепишем его в безразмерных операторах (числовые множители можно выносить из под коммутатора):

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = \left[\hat{x} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \frac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar\omega m}} \right] = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega m}} [\hat{x}, \hat{p}] = \frac{[\hat{x}, \hat{p}]}{\hbar} = i.$$

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i. \quad (12.6)$$

В классической механике роль аналогичную коммутатору играет скобка Пуассона, и в точности те же выкладки можно проделать для неё, используя соответствие $[\cdot, \cdot]/(i\hbar) \longrightarrow \{\cdot, \cdot\}$.

12.1 Представление чисел заполнения

12.1.1 Лестничные операторы

В переменных Q, P эволюция классического осциллятора сводится к вращению точки на фазовой плоскости вокруг начала координат с постоянной угловой скоростью ω .

Вращение с постоянной угловой скоростью удобно описывается с помощью комплексной переменной $z = \text{const} \cdot (Q + iP)$. Вращение задаётся умножением на фазовый множитель: $z(t) = e^{-i\omega t} z(0)$.

Поскольку в квантовой механике комплексные числа и фазовые множители вида $e^{-i\omega t}$ являются неотъемлемой частью математического аппарата, представляется естественным попробовать ввести аналогичные величины для описания квантового осциллятора:

$$\hat{a} = \frac{\hat{Q} + i\hat{P}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{Q} - i\hat{P}}{\sqrt{2}}. \quad (12.7)$$

В отличие от $\hat{Q}$ и $\hat{P}$ операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ не являются эрмитовыми.

Вычислим коммутатор введенных операторов (коммутатор можно рассматривать как разновидность умножения, и раскрывать скобки обычным образом, с учётом порядка сомножителей, т.е. операция взятия коммутатора дистрибутивна относительно сложения):

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \left[\frac{\hat{Q} + i\hat{P}}{\sqrt{2}}, \frac{\hat{Q} - i\hat{P}}{\sqrt{2}} \right] = \frac{1}{2} \left([\hat{Q}, \hat{Q}] - i[\hat{Q}, \hat{P}] + i[\hat{P}, \hat{Q}] + [\hat{P}, \hat{P}] \right) = \\ &= \frac{1}{2} (0 - i \cdot i + i(-i) + 0) = 1. \end{aligned}$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1. \quad (12.8)$$

Если бы операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ коммутировали, то в соответствии с формулой¹ $(A - B)(A + B) = A^2 - B^2$ их произведение дало бы безразмерный гамильтониан $\frac{\hat{H}}{\omega\hbar} = \frac{1}{2}(\hat{Q}^2 + \hat{P}^2)$. Однако с учётом некоммутативности операторов получаем:

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{\hat{Q} - i\hat{P}}{\sqrt{2}} \frac{\hat{Q} + i\hat{P}}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} (\hat{Q} \cdot \hat{Q} + i\hat{Q} \cdot \hat{P} - i\hat{P} \cdot \hat{Q} + \hat{P} \cdot \hat{P}) = \frac{1}{2} (\hat{Q}^2 + i[\hat{Q}, \hat{P}] + \hat{P}^2).$$

Введём теперь оператор $\hat{N}$:

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{1}{2} (\hat{Q}^2 - 1 + \hat{P}^2), \quad (12.9)$$

через который и выразим гамильтониан:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right). \quad (12.10)$$

¹Эта формула справедлива тогда и только тогда, когда $[A, B] = AB - BA = 0$, поскольку $(A - B)(A + B) = A^2 - B^2 + AB - BA = A^2 - B^2 + [A, B]$.

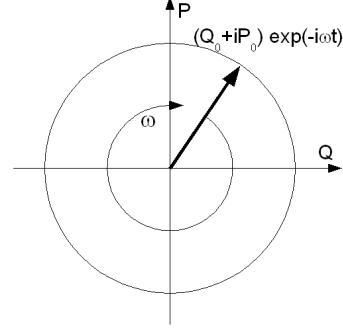


Рис. 12.1: Эволюция классического осциллятора сводится к вращению точки на фазовой плоскости (Q, P) .

Задача исследования гамильтониана свелась к задаче исследования эрмитового² оператора числа квантов $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$.

Мы видим, что в данных выражениях отличие квантовых формул от классических состоит в появлении константы $\frac{1}{2}$. В классическом пределе, когда операторы $\hat{Q}$ и $\hat{P}$ могут быть заменены большими (по сравнению с единицей) числами этой добавкой можно пренебречь.

Операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ называют *лестничными операторами*. Смысл этого термина мы сейчас раскроем, для этого вычислим их коммутаторы с оператором $\hat{N}$ (воспользовавшись формулой $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$ и формулой $[A, B]^\dagger = [B^\dagger, A^\dagger]$):

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{a}] &= [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a}, \\ [\hat{N}, \hat{a}]^\dagger &= [\hat{a}^\dagger, \hat{N}] = -\hat{a}^\dagger. \end{aligned}$$

Таким образом мы можем записать коммутационные соотношения в единообразном виде:

$$[\hat{N}, \hat{a}^\pm] = \pm \hat{a}^\pm, \quad \hat{a}^+ = \hat{a}^\dagger, \quad \hat{a}^- = \hat{a}. \quad (12.11)$$

Пусть $|\psi_n\rangle$ — некоторое собственное состояние оператора $\hat{N}$:

$$\hat{N}|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle. \quad (12.12)$$

Исследуем как ведёт себя состояние $|\psi_n\rangle$ под действием операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$, подействовав на получившиеся состояния $\hat{a}|\psi_n\rangle$ и $\hat{a}^\dagger|\psi_n\rangle$ оператором $\hat{N}$:

$$\begin{aligned} \hat{N}\hat{a}|\psi_n\rangle &= (\hat{a}\hat{N} + [\hat{N}, \hat{a}])|\psi_n\rangle = (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})|\psi_n\rangle = \hat{a}(\hat{N} - 1)|\psi_n\rangle = \hat{a}(n - 1)|\psi_n\rangle, \\ \hat{N}\hat{a}^\dagger|\psi_n\rangle &= (\hat{a}^\dagger\hat{N} + [\hat{N}, \hat{a}^\dagger])|\psi_n\rangle = (\hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger)|\psi_n\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{N} + 1)|\psi_n\rangle = \hat{a}^\dagger(n + 1)|\psi_n\rangle, \end{aligned}$$

$$\hat{N}(\hat{a}^\pm|\psi_n\rangle) = (n \pm 1)(\hat{a}^\pm|\psi_n\rangle), \quad (12.13)$$

Формула (12.13) означает, что для произвольного состояния $|\psi_n\rangle$, удовлетворяющего условию (12.12) состояния $\hat{a}^\pm|\psi_n\rangle$ либо являются собственными, с собственными числами $n \pm 1$, либо являются нулевыми векторами. Поэтому оператор $\hat{a}^+ = \hat{a}^\dagger$ называется *повышающим оператором*, а $\hat{a}^- = \hat{a}$ — *понижающим оператором*.

Оператор $\hat{N}$ имеет только неотрицательные средние:

$$\langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle = \langle\hat{a}\psi|\hat{a}\psi\rangle \geq 0. \quad (12.14)$$

Для собственного состояния имеем

$$\langle\psi_n|\hat{N}|\psi_n\rangle = \langle\psi_n|\underbrace{n}_{\text{число}}|\psi_n\rangle = n\langle\psi_n|\psi_n\rangle \geq 0 \quad \Rightarrow \quad n \geq 0. \quad (12.15)$$

Возьмём теперь произвольное собственное состояние и начнём на него много раз действовать понижающим оператором:

$$\hat{a}|\psi_n\rangle, \quad \hat{a}^2|\psi_n\rangle, \quad \dots, \quad \hat{a}^k|\psi_n\rangle, \quad \dots$$

Каждый раз оператор $\hat{a}$, либо понижает собственное число оператора $\hat{N}$ на единицу, либо обнуляет состояние. Поскольку, как мы показали только что, собственные числа оператора $\hat{N}$ неотрицательны, рано или поздно очередное состояние

$$|\psi_{n_0}\rangle = \text{const} \cdot \hat{a}^k|\psi_n\rangle \quad (12.16)$$

²Эрмитовость оператора $\hat{N}$ легко проверяется: $\hat{N}^\dagger = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a}^{\dagger\dagger} = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{N}$.

обнулится под действием $\hat{a}$.

$$\hat{a}|\psi_{n_0}\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{a}^\dagger \hat{a}|\psi_{n_0}\rangle = \hat{N}|\psi_{n_0}\rangle = n_0|\psi_{n_0}\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad n_0 = 0.$$

Мы видим, что это состояние — собственное для оператора $\hat{N}$ с нулевым собственным числом:

$$\hat{a}|\psi_0\rangle = 0. \quad (12.17)$$

Оно отвечает минимальной возможной энергии гармонического осциллятора $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, а потому называется *основным состоянием гармонического осциллятора*.

Легко видеть, что ненулевое состояние $|\psi\rangle$ никогда не обнулится под действием повышающего оператора $\hat{a}^\dagger$:

$$\langle \hat{a}^\dagger \psi | \hat{a}^\dagger \psi \rangle = \langle \psi | \hat{a} \hat{a}^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{N} + 1 | \psi \rangle \geq \langle \psi | \psi \rangle > 0. \quad (12.18)$$

Таким образом, начиная с основного состояния $|\psi_0\rangle$ и действуя на него раз за разом повышающим оператором $\hat{a}^\dagger$ мы получаем лестницу состояний, нумеруемых целыми неотрицательными числами. Однако надо уточнить следующие вопросы:

- *Сколько может быть линейно независимых состояний $|\psi_{0i}\rangle$, удовлетворяющих уравнению (12.17)?* Сколько угодно. До сих пор мы не вводили никаких условий, которые как бы то ни было ограничивали это число. Мы ещё вернёмся к этому вопросу.
- *Все ли собственные состояния оператора $\hat{N}$ будут получены из $|\psi_{0i}\rangle$ с помощью повышающего оператора $\hat{a}^\dagger$?* Все (см. объяснения ниже).
 - *Могут ли быть у оператора $\hat{N}$ нецелые собственные числа?* Нет. Пусть $|\psi_n\rangle$ — собственное состояние, отвечающее произвольному числу n , начнём действовать на него раз за разом понижающим оператором. Рано или поздно (как мы уже упоминали) мы получим (12.16), что $\hat{a}^k|\psi_n\rangle \neq 0$, но $\hat{a}^{k+1}|\psi_n\rangle = 0$, это означает, что состояние $\hat{a}^k|\psi_n\rangle$ — собственное для оператора $\hat{N}$, с собственным числом $0 = n - k$, т.е. $n = k$ — целое неотрицательное число.
 - *Могут ли быть у оператора $\hat{N}$ собственные состояния, которые не получаются из $|\psi_{0i}\rangle$ с помощью повышающего оператора?* Нет. Начнём строить собственные состояния оператора $\hat{N}$ в виде $|\psi_{ni}\rangle = c_n (\hat{a}^\dagger)^n |\psi_{0i}\rangle$. Предположим, что $|\phi_{n*}\rangle$ — собственное состояние линейно независимое от $|\psi_{ni}\rangle$ и отвечающее собственному числу n_* . При этом $n_* > 0$, т.к. иначе $|\phi_{n*}\rangle$ — просто ещё одно состояние из набора $\{|\psi_{0i}\rangle\}_i$. Выберем минимальное значение n_* . Подействовав на $|\phi_{n*}\rangle$ оператором $\hat{a}$ получаем собственное состояние $|\phi_{n*-1}\rangle = \frac{1}{n_*} \cdot \hat{a}|\phi_{n*}\rangle$ (где $\hat{a}|\phi_{n*}\rangle \neq 0$ т.к. $n_* > 0$). Мы видим, что $\hat{a}^\dagger|\phi_{n*-1}\rangle = \frac{1}{n_*} \cdot \hat{a}^\dagger \hat{a}|\phi_{n*}\rangle = \frac{1}{n_*} \cdot \hat{N}|\phi_{n*}\rangle = |\phi_{n*}\rangle$. Т.е. состояние $|\phi_{n*}\rangle$ получается из состояния $|\phi_{n*-1}\rangle$ с помощью оператора $\hat{a}^\dagger$. Если $|\phi_{n*-1}\rangle$ линейно независимо от $|\psi_{(n*-1)i}\rangle$, то выбранное нами n_* не минимально, а если зависимо, то $|\phi_{n*}\rangle$ представимо через $|\psi_{n_*i}\rangle$.
- *Сколько может быть линейно независимых состояний $|\psi_{ni}\rangle$, отвечающих произвольному собственному числу n оператора $\hat{N}$?* (Т.е. как зависит от n кратность вырождения?) Ровно столько же, сколько для $n = 0$ (см. первый вопрос), т.е. для всех n непременно поровну. Пусть $n > 0$. Состояния

$\hat{a}|\psi_{ni}\rangle$ ненулевые (т.к. $n > 0$) и линейно независимые (т.к. если они линейно зависимы, т.е. $\sum_i c_i \hat{a}|\psi_{ni}\rangle = 0$, то $0 = \hat{a}^\dagger 0 = \hat{a}^\dagger \sum_i c_i \hat{a}|\psi_{ni}\rangle = \sum_i c_i \hat{a}^\dagger \hat{a}|\psi_{ni}\rangle = \sum_i c_i n |\psi_{ni}\rangle$, т.е. линейно зависимы исходные состояния). Следовательно, кратность вырождения не может увеличиваться с ростом n . Аналогично для любого целого неотрицательного n состояния $\hat{a}^\dagger|\psi_{ni}\rangle$ ненулевые и линейно независимые (т.к. если они линейно зависимы, т.е. $\sum_i c_i \hat{a}^\dagger|\psi_{ni}\rangle = 0$, то $0 = \hat{a} 0 = \hat{a} \sum_i c_i \hat{a}^\dagger|\psi_{ni}\rangle = \sum_i c_i \hat{a} \hat{a}^\dagger|\psi_{ni}\rangle = \sum_i c_i (n+1) |\psi_{ni}\rangle$, т.е. линейно зависимы исходные состояния). Следовательно кратность вырождения не может уменьшаться с ростом n .

12.1.2 Базис собственных функций

Пусть кратность вырождения равна единице, тогда собственные функции оператора $\hat{N}$ нумеруются одним числом n . Эти собственные функции, будучи собственными функциями эрмитова оператора, образуют базис, для элементов которого удобно ввести следующие обозначения:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle. \quad (12.19)$$

Базис является ортогональным, т.к. собственные векторы отвечающие разным собственным числам ортогональны. Базисные векторы нормируем на единицу (поскольку спектр дискретный, это возможно), таким образом

$$\langle k|n\rangle = \delta_{kn}. \quad (12.20)$$

Под действием понижающего оператора базисные векторы ведут себя следующим образом:

$$\hat{a}|0\rangle = 0. \quad (12.21)$$

$$\hat{a}|n\rangle = c_n|n-1\rangle, \quad c_n \in \mathbb{C}, \quad n > 0.$$

Что мы можем сказать о константах c_n ? Сопрягая последнее уравнение и умножая исходное уравнение слева на сопряжённое получаем:

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{a}^\dagger &= \langle n-1|c_n^* \\ \Rightarrow \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle &= \langle n-1|c_n^* c_n|n-1\rangle, \\ \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle &= \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|n|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n, \\ \langle n-1|c_n^* c_n|n-1\rangle &= c_n^* c_n \langle n-1|n-1\rangle = c_n^* c_n = |c_n|^2. \end{aligned}$$

$$|c_n|^2 = n \quad \Leftrightarrow \quad c_n = e^{i\varphi_n} \sqrt{n}.$$

Таким образом, используя ортонормированность базиса мы вычислили c_n с точностью до фазовых множителей. *Вычислить* эти фазовые множители невозможно. Это связано с тем, что условие ортонормируемости зафиксировало наш базис только с точностью до умножения базисных векторов на произвольные *различные* фазовые множители:

$$\begin{aligned} |n\rangle' &= e^{i\phi_n} |n\rangle, \\ c_n' &= e^{i(\phi_n - \phi_{n-1})} c_n. \end{aligned}$$

Не имея возможности *вычислить* фазовые множители для c_n , мы имеем возможность *выбрать* их по своему произволу. Мы выберем все c_n вещественными

неотрицательными числами. Это зафиксировало большую часть произвола, теперь мы можем умножать наши векторы только на *одинаковые* фазовые множители ($|n\rangle' = e^{i\phi_0}|n\rangle$, а $c_n = \sqrt{n}$ теперь — фиксированные числа).

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (12.22)$$

Запишем матричные элементы оператора $\hat{a}$ для базисных векторов. Матричные элементы оператора $\hat{a}^\dagger$ получаются эрмитовым сопряжением.

$$\langle k|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{k,n-1} \quad \Leftrightarrow \quad \langle n|\hat{a}^\dagger|k\rangle = \sqrt{n}\delta_{k,n-1} = \sqrt{k+1}\delta_{k+1,n} \quad (12.23)$$

Это позволяет представить лестничные операторы в виде матриц

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (12.24)$$

Столбцы и строки нумеруются здесь целыми числами начиная с нуля.

Таким образом мы получили действие $\hat{a}^\dagger$ на базисные векторы

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (12.25)$$

На основе (12.25) мы можем выразить состояние $|n\rangle$ через основное состояние $|0\rangle$:

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad (12.26)$$

Обратите внимание, формулы (12.22) и (12.25) мы получали по-разному. Это связано с тем, что вывод формулы (12.22) предполагал *произвольную* фиксацию фазовых множителей. Выводя формулу (12.25) мы уже не могли фиксировать фазовые множители произвольно, а должны были воспользоваться соглашениями, принятыми ранее, поэтому формула (12.25) была выведена через формулу (12.22).

Мы нашли собственные числа оператора $\hat{N}$, используя (12.10) мы можем записать разрешённые уровни энергии гармонического осциллятора:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (12.27)$$

Целое число n можно трактовать как число фиксированных квантов энергии $\hbar\omega$, сообщённых осциллятору сверх энергии нулевых колебаний $\frac{1}{2}\hbar\omega$. По этой причине n называют *числом заполнения*, а разложение волновой функции по базису $\{|n\rangle\}_{n=0}^\infty$ — *представлением чисел заполнения*.

12.2 Переход к координатному представлению

До сих пор мы не установили кратность вырождения уровней для гармонического осциллятора. Кроме того, выбрав стационарные состояния в качестве базисных мы ничего не сказали про их вид в координатном представлении. Впрочем,

можно просто постулировать нужную кратность вырождения, а все вычисления проводить в представлении чисел заполнения.

В координатном представлении

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \psi(x) = \langle x | \psi \rangle.$$

Переходя к безразмерным операторам получаем:

$$\hat{Q} = Q, \quad \hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial(Qx_0)} \frac{1}{p_0} = -i \frac{\partial}{\partial Q}, \quad \psi(Q) = \langle Q | \psi \rangle = \sqrt{x_0} \psi(x)|_{x=Q \cdot x_0}. \quad (12.28)$$

Корень $\sqrt{x_0}$ возникает как нормировочный множитель, чтобы обеспечить нормировку на единицу для волновой функции, как функции Q :

$$\int |\psi(Q)|^2 dQ = \int |\psi(x = Q \cdot x_0)|^2 d(x_0 Q) = \int |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

В координатном представлении лестничные операторы принимают вид дифференциальных операторов:

$$\hat{a} = \frac{Q + \frac{\partial}{\partial Q}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{a}^\dagger = \frac{Q - \frac{\partial}{\partial Q}}{\sqrt{2}}. \quad (12.29)$$

Если теперь записать уравнение (12.21), то оно превратится в дифференциальное уравнение

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{Q + \frac{\partial}{\partial Q}}{\sqrt{2}} \psi_0(Q) = 0. \quad (12.30)$$

Мы получили обыкновенное (поскольку у нас одна независимая переменная Q , «круглые» дифференциалы можно заменить на «прямые»), линейное, однородное дифференциальное уравнение первого порядка, а значит, решение этого уравнения единственно с точностью до постоянного множителя (нормировочной константы). Это уравнение с разделяющимися переменными, так что оно без труда решается явно

$$\begin{aligned} Q\psi_0 + \frac{d\psi_0}{dQ} &= 0 \quad \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{d\psi_0}{\psi_0} &= -Q dQ \quad \Rightarrow \quad \ln \psi_0 = -\frac{Q^2}{2} + \text{const} \quad \Rightarrow \quad \psi_0 = \text{const}' \cdot e^{-\frac{Q^2}{2}}. \end{aligned}$$

С точностью до фазы множитель определяется из условия нормировки. Если выбрать фазу так, чтобы функция $\psi_0(Q)$ была вещественной и положительной, то

$$\psi_0(Q) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \cdot e^{-\frac{Q^2}{2}}. \quad (12.31)$$

Основное состояние единственно, с точностью до множителя, т.е. кратность вырождения — единица.

Мы можем получить и другие кратности вырождения, если добавим волновой функции дополнительные аргументы, например, рассмотрим осциллятор с волновыми функциями вида $\psi(Q, m)$, где Q — непрерывная координата, а m — дискретная переменная, пробегающая K значений (например, проекция спина, тогда $K = 2s + 1$), даст K -кратно вырожденный спектр. (Собственные функции, отвечающие одинаковой энергии, будут нумероваться ещё и значением переменной m .)

Возбуждённые состояния получаются из основного состояния (12.31) с помощью повышающего оператора $\hat{a}^\dagger$ по формуле (12.26). Но теперь повышающий оператор оказывается дифференциальным оператором, в соответствии с формулой (12.29):

$$\begin{aligned} \psi_n(Q) &= \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(Q) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{Q - \frac{\partial}{\partial Q}}{\sqrt{2}} \right)^n \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \cdot e^{-\frac{Q^2}{2}} = \\ &= (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1/2} \left(Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right)^n e^{-\frac{Q^2}{2}}. \end{aligned}$$

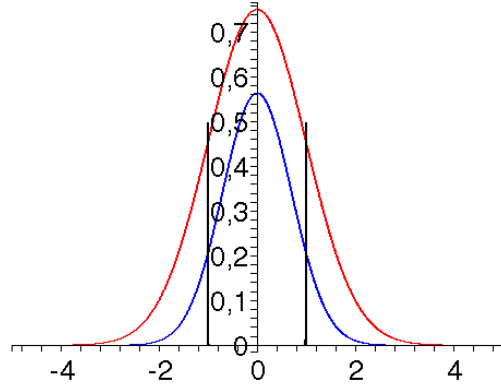


Рис. 12.2: Основное состояние гармонического осциллятора и его квадрат: $\psi_0(Q)$ и $|\psi_0(Q)|^2$. Две вертикальные черты обозначают границы классически разрешённой области.

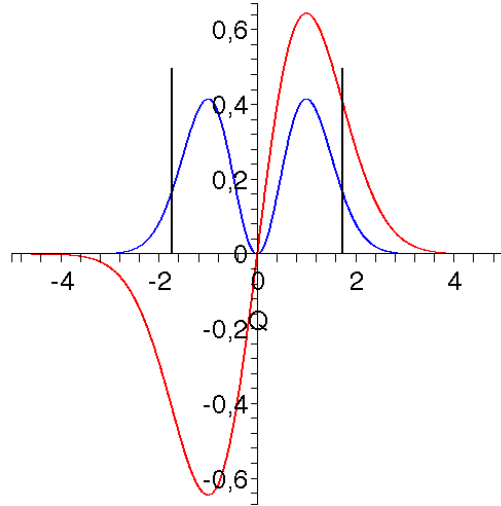


Рис. 12.3: Первое возбуждённое состояние гармонического осциллятора: $\psi_1(Q)$ и $|\psi_1(Q)|^2$.

Поскольку $\frac{\partial}{\partial Q} e^{-\frac{Q^2}{2}} = -Q e^{-\frac{Q^2}{2}}$, из предыдущей формулы легко видеть, что волновая функция n -го возбуждённого состояния имеет вид

$$\psi_n(Q) = (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1/2} H_n(Q) e^{-\frac{Q^2}{2}},$$

где $H_n(Q)$ — полином степени n , который называется *полиномом Чебышёва-Эрмита*.

Обратите внимание, что как дифференцирование по Q , так и умножение на Q меняют чётность волновой функции, таким образом, под действием операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ чётные волновые функции превращаются в нечётные и наоборот. Поскольку $\psi_0(Q)$ — чётная функция, чётности $\psi_n(Q)$ и полинома Эрмита $H_n(Q)$ соответствуют чётности n .

Приведём первые 6 полиномов Эрмита:

$$\begin{aligned} H_0 &= 1, & H_1 &= 2Q, & H_2 &= 4Q^2 - 2, & H_3 &= 8Q^3 - 12Q, \\ H_4 &= 16Q^4 - 48Q^2 + 12, & H_5 &= 32Q^5 - 160Q^3 + 120Q. \end{aligned}$$

Мы можем записать формулу для n -го полинома в виде

$$H_n(Q) = e^{\frac{Q^2}{2}} \left(Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right)^n e^{-\frac{Q^2}{2}}.$$

Данную формулу легко упростить, вставив перед скобками выражение $e^{\frac{Q^2}{2}} e^{-\frac{Q^2}{2}}$ и «пронеся» $e^{-\frac{Q^2}{2}}$ направо через все производные с помощью очевидной формулы:

$$e^{-\frac{Q^2}{2}} \left(Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right) F(Q) = \left(-\frac{\partial}{\partial Q} \right) e^{-\frac{Q^2}{2}} F(Q).$$

В результате получаем стандартную «формулу из учебника»:

$$H_n(Q) = e^{Q^2} \left(-\frac{\partial}{\partial Q} \right)^n e^{-Q^2}.$$

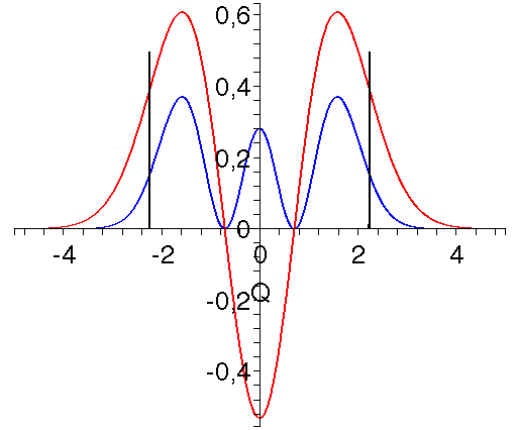


Рис. 12.4: Второе возбуждённое состояние гармонического осциллятора: $\psi_2(Q)$ и $|\psi_2(Q)|^2$.

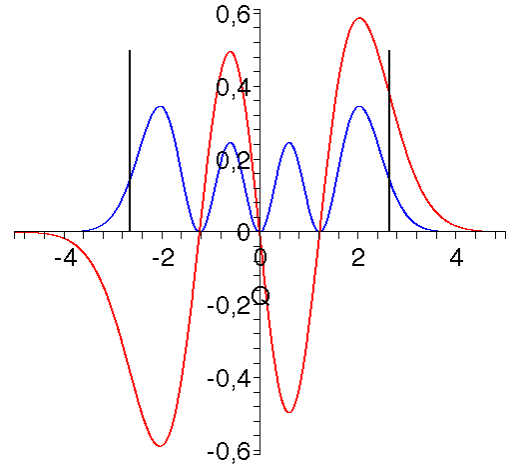


Рис. 12.5: Третье возбуждённое состояние: $\psi_3(Q)$ и $|\psi_3(Q)|^2$.

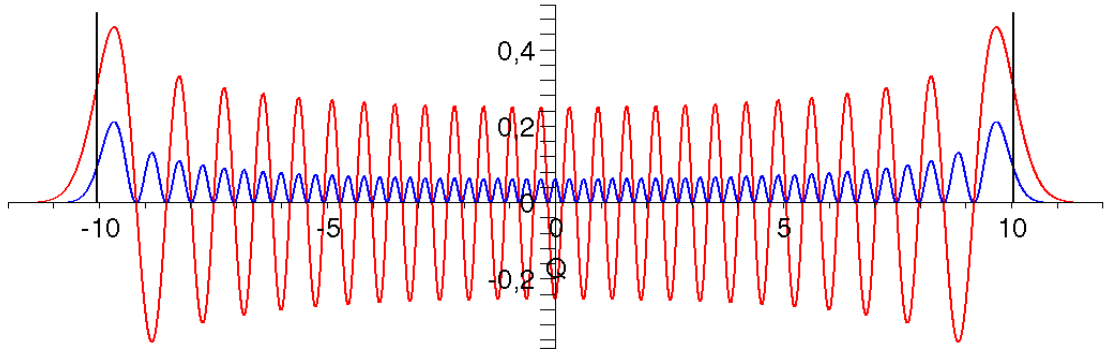


Рис. 12.6: 50-е возбуждённое состояние гармонического осциллятора: $\psi_{50}(Q)$ и $|\psi_{50}(Q)|^2$.

12.3 Пример расчётов в представлении чисел заполнения*

Пусть, например, нам надо посчитать среднее от какого-либо оператора, скажем, $\hat{Q}\hat{P}^2\hat{Q}$ в состоянии $|n\rangle$. Можно, конечно, найти волновую функцию $\psi_n(Q)$, и взять интеграл $\langle n|\hat{Q}\hat{P}^2\hat{Q}|n\rangle = \int \psi_n Q(-i\partial/\partial Q)^2 Q \psi_n dQ$, однако проще провести вычисления в представлении чисел заполнения.

Мы знаем, как на собственные функции осциллятора действуют лестничные операторы, поэтому выразим через них операторы координаты и импульса:

$$\hat{Q} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad \hat{P} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{i\sqrt{2}}. \quad (12.32)$$

Теперь мы можем написать

$$\langle n|\hat{Q}\hat{P}^2\hat{Q}|n\rangle = \langle n|\frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{i\sqrt{2}}\right)^2 \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}|n\rangle =$$

Далее остаётся раскрыть скобки (не забывая, что $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ не коммутируют!), применить формулы для действия лестничных операторов на базисные состояния (12.22), (12.25) и ортонормированность базисных состояний (12.20).

Впрочем, мы можем облегчить работу, выписывая при открытии скобок только те члены, которые содержат равное число операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$, поскольку каждый такой оператор опускает (поднимает) состояние на одну ступеньку, а состояния ортонормированы, а значит нам интересны только члены, не меняющие номер состояния. Таким образом, продолжаем предыдущее равенство

$$= \frac{1}{-4} \langle n| -\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} - \underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\hat{N}} \underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\hat{N}} + \underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\hat{N}} \underbrace{\hat{a} \hat{a}^\dagger}_{(\hat{N}+1)} + \underbrace{\hat{a} \hat{a}^\dagger}_{(\hat{N}+1)} \underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\hat{N}} - \underbrace{\hat{a} \hat{a}^\dagger}_{(\hat{N}+1)} \underbrace{\hat{a} \hat{a}^\dagger}_{(\hat{N}+1)} - \hat{a} \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger |n\rangle =$$

Мы просто выписали все 6 возможных способов поставить два креста на 4 оператора. При этом каждый крест над вторым или третьим оператором (которые происходят от оператора $\hat{P}$) давали знак минус.

Мы сразу выделили действующие на состояние $|n\rangle$, комбинации операторов, которые дают оператор номера уровня $\hat{N}$. Поскольку оператор действует на своё собственное состояние, его можно заменить собственным числом, таким образом, удалось существенно сократить выкладки:

$$= \frac{-1}{4} \left(- \underbrace{(\langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger)(\hat{a} \hat{a}|n\rangle)}_{\langle \hat{a} \hat{a} \psi_n | \hat{a} \hat{a} \psi_n \rangle} \underbrace{-n^2 + n(n+1) + (n+1)n - (n+1)^2}_{-1} - \underbrace{(\langle n|\hat{a} \hat{a})(\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger|n\rangle)}_{\langle \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \psi_n | \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \psi_n \rangle} \right) =$$

Осталось вычислить скалярные квадраты двух волновых функций: $\hat{a} \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n-1}\sqrt{n}|n-2\rangle$, $\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+2}\sqrt{n+1}|n+2\rangle$. Таким образом, получаем ответ

$$= \frac{1}{4} ((n-1)n + 1 + (n+2)(n+1)) = \frac{1}{4} (2n^2 + 2n + 3).$$

12.4 Симметрии гармонического осциллятора

12.4.1 Зеркальная симметрия

На первый взгляд мы видим у гармонического осциллятора одну симметрию — зеркальную, описываемую оператором инверсии координаты $\hat{I}$. Как мы уже обсуждали выше, это означает, что мы можем выбрать собственные функции оператора Гамильтона так, чтобы они одновременно были собственными функциями оператора $\hat{I}$, т.е. чётными или нечётными. Поскольку у гармонического осциллятора нет вырождения чётных и нечётных состояний (да и вообще спектр невырожденный), все собственные состояния оказываются либо чётными, либо нечётными. Основное состояние ψ_0 (12.31), очевидно чётно. Повышающий оператор $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - \frac{\partial}{\partial Q})$ меняет чётность состояния, т.е. превращает чётную функцию в нечётную и наоборот. Таким образом, чётность собственных состояний осциллятора чередуется, т.е. соответствует чётности номера уровня:

$$\hat{I}\psi_n = (-1)^n \psi_n.$$

12.4.2 Фурье-симметрия и переход от координатного представления к импульсному и обратно**

Гамильтониан для гармонического осциллятора в безразмерных переменных $\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{Q}^2 + \hat{P}^2)$ выглядит симметрично относительно замены координаты на $\mp$ импульс, а импульса на $\pm$ координату.

Это соответствует переходу от координатного представлению, к импульсному. Соответствующий унитарный оператор $\hat{F}$ задаёт преобразование Фурье, его удобно представить как интегральный оператор:

$$(\hat{F}\psi)(P) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-iPQ} \psi(Q) dQ.$$

Просто поменять местами $\hat{P}$ и $\hat{Q}$ не позволяют канонические коммутационные соотношения (12.6), но мы можем, как и в классической механике, сделать каноническую замену $\hat{Q} \rightarrow -\hat{P}$, $\hat{P} \rightarrow \hat{Q}$. Знаки мы выбрали так, чтобы они согласовывались с прямым преобразованием Фурье³:

$$\hat{Q} \rightarrow -\hat{P} = \hat{F}\hat{Q}\hat{F}^{-1}, \quad (12.33)$$

$$\hat{P} \rightarrow \hat{Q} = \hat{F}\hat{P}\hat{F}^{-1}, \quad (12.34)$$

$$\hat{a} \rightarrow \hat{F}\hat{a}\hat{F}^{-1} = \frac{-\hat{P} + i\hat{Q}}{\sqrt{2}} = i\hat{a}, \quad (12.35)$$

$$\hat{a}^\dagger \rightarrow \hat{F}\hat{a}^\dagger\hat{F}^{-1} = \frac{-\hat{P} - i\hat{Q}}{\sqrt{2}} = -i\hat{a}^\dagger. \quad (12.36)$$

Гамильтониан в координатном и в импульсном представлении задаётся одним и тем же дифференциальным оператором

$$\hat{H}_\text{д.} = \hat{F}\hat{H}_\text{д.}\hat{F}^{-1} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial Q^2} + Q^2 \right).$$

³ Рекомендуем самостоятельно проверить формулы (12.33)–(12.36).

Т.е. $\hat{F}\hat{H}_d = \hat{H}_d\hat{F}$. И этой симметрии соответствует некоторый закон сохранения.

Закон сохранения, следующий из Фурье-симметрии задаёт, что если в начальный момент времени волновая функция гармонического осциллятора является собственной, для оператора $\hat{F}$, с собственным числом f , то и в последующие моменты времени волновая функция остаётся собственной функцией для $\hat{F}$ с тем же собственным числом. Другая формулировка — $\langle \psi(t) | \hat{F} | \psi(t) \rangle$ не зависит от времени.

Как известно, 4-кратное преобразование Фурье возвращает нас к исходной функции, т.е. $\hat{F}^4 = \hat{1}$. Записав это для собственной функции, получаем:

$$\hat{F}\psi = f\psi, \quad \psi = \hat{1}\psi = \hat{F}^4\psi = f^4\psi, \quad \Rightarrow \quad f^4 = 1.$$

$$f \in \{1, -i, -1, i\}.$$

Двухкратное преобразование Фурье даёт исходную функцию, с обратным знаком аргумента: $(\hat{F}^2\psi)(Q) = \psi(-Q) = (\hat{I}\psi)(Q)$, т.е. $\hat{F}^2 = \hat{I}$. Аналогичное соотношение для собственных чисел позволяет заключить, что чётным функциям отвечает $f = \pm 1$, а нечётным — $f = \pm i$. Таким образом, Фурье-симметрия включает в себя зеркальную симметрию, но позволяет разбить чётные и нечётные функции ещё на два класса.

Уравнение на собственные функции и собственные числа выглядит следующим образом:

$$f\psi(P) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-iPQ} \psi(Q) dQ.$$

Здесь $\psi(Q)$ и $\psi(P)$ — одна и та же функция, в которую подставлены разные аргументы.

Поскольку спектр гармонического осциллятора не вырожден, найденные нами собственные функции $\psi_n(Q)$ являются также собственными для оператора $\hat{F}$, и нам надо только установить, какие собственные числа им соответствуют. Для основного состояния ψ_0 (12.31) $f = 1$, поскольку преобразование Фурье совпадает с самой функцией ψ_0 :

$$\begin{aligned} (\hat{F}\psi_0)(P) &= \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-iPQ} \frac{e^{-\frac{Q^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} dQ = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{1}{2}(Q^2 + 2iPQ)} dQ = \\ &= \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{((Q+iP)^2 + P^2)}{2}} dQ = \frac{e^{-\frac{P^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-\frac{(Q+iP)^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} dQ = \frac{e^{-\frac{P^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} = \psi_0(P). \end{aligned}$$

Посмотрим теперь, как меняется f под действием повышающего оператора $\hat{a}^\dagger$. Выкладки эти проведём двумя способами:

1. Прделаем выкладки используя тождество (12.36) для операторов $\hat{a}^\dagger$ и $\hat{F}$. Тождество $\hat{F}\hat{a}^\dagger\hat{F}^{-1} = -i\hat{a}^\dagger$ можно переписать как $\hat{F}\hat{a}^\dagger = -i\hat{a}^\dagger\hat{F}$, используя это получаем:

$$\hat{F}\hat{a}^\dagger\psi = -i\hat{a}^\dagger\hat{F}\psi = -i\hat{a}^\dagger f\psi = (-if)\hat{a}^\dagger\psi.$$

2. Прделаем те же выкладки представляя векторы состояния как функции⁴.

⁴По существу это вывод тождества (12.36), т.е. частичное решение задачи, предложенной в сноске 3. Впрочем, внимательный читатель легко превратит это частичное решение в полное.

Заменяя умножение на Q дифференцированием по P комплексной экспоненты и интегрируя по частям член, содержащий $\frac{\partial}{\partial Q}$, получаем:

$$\begin{aligned} (\hat{F}\hat{a}^\dagger\psi)(P) &= \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-iPQ} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right) \psi(Q) dQ = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(i \frac{\partial}{\partial P} - iP \right) \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-iPQ} \psi(Q) dQ = \\ &= (-i\hat{a}^\dagger\hat{F}\psi)(P) = (-i\hat{a}^\dagger f\psi)(P) = (-if)(\hat{a}^\dagger\psi)(P). \end{aligned}$$

Таким образом, под действием повышающего оператора f умножилось на $-i$, и мы получаем для собственных состояний осциллятора

$$\hat{F}\psi_n = (-i)^n \psi_n.$$

Данная формула выявляет связь преобразований Фурье и временной эволюции гармонического осциллятора:

$$\hat{F}\psi_n = (-i)^n \psi_n = e^{-i\frac{\pi}{2}n} \psi_n = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{N}} \psi_n = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{a}^\dagger\hat{a}} \psi_n = e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}-\frac{\hbar\omega}{2})\frac{\pi}{2\omega}} \psi_n.$$

Поскольку это тождество выполняется для всех базисных векторов ψ_n мы можем записать преобразование Фурье как оператор эволюции гармонического осциллятора на время $\frac{\pi}{2\omega}$, т.е. $\frac{1}{4}$ часть периода $T_0 = \frac{2\pi}{\omega}$, при условии, что в качестве нулевого уровня энергии принят уровень основного состояния $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$:

$$\hat{F} = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{a}^\dagger\hat{a}} = e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}-E_0)\frac{T_0}{4}} = e^{i\frac{\pi}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\frac{\pi}{2\omega}} = \frac{1+i}{\sqrt{2}} \hat{U}_{\frac{\pi}{2\omega}}.$$

Сдвиг нулевого уровня энергии не несёт физического смысла и приводит лишь к устранению фазового множителя $e^{-i\frac{\omega}{2}t}$. Таким образом, *гармонический осциллятор каждые четверть периода подвергает своё состояние преобразованию Фурье с точностью до фазового множителя (который устраняется, если отсчитывать энергию от E_0)*.

12.4.3 Вращение фазовой плоскости

Описанная выше Фурье-симметрия гармонического осциллятора соответствует повороту фазовой плоскости по часовой стрелке на угол $\frac{\pi}{2}$. Картинка 12.1 наводит на мысль, что гармонический осциллятор должен допускать более широкую симметрию, относительно поворотов фазовой плоскости на произвольный угол α . И этой симметрии также должен соответствовать какой-то закон сохранения, позволяющий ещё более детально, чем Фурье-симметрия различать между собой уровни энергии осциллятора.

Однако в данном случае нас ждёт разочарование: эта симметрия описывается оператором эволюции $\hat{U}_{\frac{\alpha}{\omega}}$, а соответствующий закон сохранения — закон сохранения энергии. Это легко увидеть, рассмотрев гармонический осциллятор в представлении Гейзенберга, чему и посвящён следующий раздел.

12.5 Представление Гайзенберга для осциллятора

12.5.1 Интегрирование уравнения Гайзенберга

Рассмотрим теперь, как выглядит временная эволюция гармонического осциллятора в представлении Гайзенберга. Для оператора $\hat{a}$, согласно (5.20) мы можем написать полную производную по времени

$$\frac{d\hat{a}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}] = -i\omega\hat{a}. \quad (12.37)$$

Для представления Гайзенберга полная производная по времени описывает просто, как оператор изменяется со временем и мы получаем дифференциальное уравнение, и начальные условия (шрёдингеровские операторы совпадают с гайзенберговскими в нулевой момент времени)

$$\begin{cases} \frac{d\hat{a}_r}{dt} = -i\omega\hat{a}_r, \\ \hat{a}_r(0) = \hat{a}_m. \end{cases} \Rightarrow \hat{a}_r(t) = e^{-i\omega t} \hat{a}_m. \quad (12.38)$$

Полученный результат выглядит точно также, как классическая эволюция гармонического осциллятора, изображённая на рисунке 12.1, с заменой координаты и импульса на операторы.

Через $\hat{a}_r(t)$ мы можем выразить гайзенберговские операторы координаты и импульса и получить для них «с точностью до шляпок» классические формулы эволюции гармонического осциллятора:

$$\begin{aligned} \hat{Q}_r(t) &= \frac{\hat{a}_r(t) + \hat{a}_r^\dagger(t)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\omega t} \hat{a}_m + e^{i\omega t} \hat{a}_m^\dagger \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\omega t} \frac{\hat{Q}_m + i\hat{P}_m}{\sqrt{2}} + e^{i\omega t} \frac{\hat{Q}_m - i\hat{P}_m}{\sqrt{2}} \right) = \\ &= \cos(\omega t) \hat{Q}_m + \sin(\omega t) \hat{P}_m. \end{aligned}$$

Формулу для импульса мы можем получить аналогично через $\hat{a}_r$ и $\hat{a}_r^\dagger$, а можем просто продифференцировать координату по обезразмеренному времени ωt :

$$\hat{P}_r(t) = \frac{1}{\omega} \frac{d\hat{Q}_r}{dt} = \frac{i}{\hbar\omega} [\hat{H}, \hat{Q}_r] = -\sin(\omega t) \hat{Q}_m + \cos(\omega t) \hat{P}_m.$$

Таким образом, точно также как в классике

$$\begin{aligned} \hat{Q}_r(t) &= \cos(\omega t) \hat{Q}_r(0) + \sin(\omega t) \hat{P}_r(0), \\ \hat{P}_r(t) &= -\sin(\omega t) \hat{Q}_r(0) + \cos(\omega t) \hat{P}_r(0). \end{aligned}$$

Если теперь усреднить эти уравнения по произвольной волновой функции (напомним, гайзенберговские волновые функции не зависят от времени), то средние значения (т.е. уже не операторы, а числа) будут колебаться совершенно классическим образом

$$\begin{aligned} \langle Q_r(t) \rangle &= \cos(\omega t) \langle Q_r(0) \rangle + \sin(\omega t) \langle P_r(0) \rangle, \\ \langle P_r(t) \rangle &= -\sin(\omega t) \langle Q_r(0) \rangle + \cos(\omega t) \langle P_r(0) \rangle. \end{aligned} \quad (12.39)$$

12.5.2 Роль эквидистантности уровней*

Посмотрим на представление Гайзенберга с несколько иной точки зрения и попытаемся *понять* с чем связано, что гайзенберговская эволюция описывается одной частотой ω .

Как мы знаем, матричный элемент не зависит от представления, в частности

$$\langle \phi_{\text{ш}} | \hat{A}_{\text{ш}} | \psi_{\text{ш}} \rangle_t = \langle \phi_{\text{Г}} | \hat{A}_{\text{Г}} | \psi_{\text{Г}} \rangle_t.$$

Для понижающего оператора все отличные от нуля матричные элементы имеют вид $\langle n-1 | \hat{a} | n \rangle$. Стационарные шрёдингеровские состояния эволюционируют со временем как $|n_{\text{ш}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n_{\text{ш}}(0)\rangle$. таким образом,

$$\langle n-1 | \hat{a}_{\text{Г}}(t) | n \rangle = \langle (n-1)_{\text{ш}} | \hat{a}_{\text{ш}} | n_{\text{ш}} \rangle_t = e^{-i \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar} t} \langle n-1 | \hat{a}_{\text{ш}} | n \rangle_0 = e^{-i\omega t} \langle n-1 | \hat{a}_{\text{ш}} | n \rangle_0.$$

Поскольку для всех ненулевых матричных элементов оператора $\hat{a}_{\text{Г}}(t)$ эволюция описывается одним и тем же фазовым множителем $e^{-i\omega t}$, мы можем записать для самого оператора

$$\hat{a}_{\text{Г}}(t) = e^{-i\omega t} \hat{a}_{\text{ш}}.$$

Нам удалось это благодаря тому, что все ненулевые матричные элементы оператора $\hat{a}$ берутся для состояний с одинаковой разностью энергий, т.е. благодаря тому, что $\hat{a}$ спускает каждое стационарное состояние по лестнице энергий на одну и ту же величину $\hbar\omega$.

12.6 Когерентные состояния гармонического осциллятора*

Выше мы уже рассматривали когерентные состояния, обращающие соотношение неопределённостей для пары операторов $\hat{A}, \hat{B}$ в равенство (7.6). Такие состояния должны быть собственными для оператора вида $i\gamma\hat{A} + \hat{B}$. Именно такой вид имеют операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ для гармонического осциллятора, поэтому их собственные состояния должны быть когерентными для пары наблюдаемых координата-импульс.

Легко видеть, что оператор $\hat{a}^\dagger$ не имеет собственных состояний.⁵

Состояния удовлетворяющие условию

$$\hat{a}|\psi_z\rangle = z|\psi_z\rangle, \quad z \in \mathbb{C} \quad (12.40)$$

называются *когерентными состояниями гармонического осциллятора*. Такие состояния существуют для всех z и одно из таких состояний мы уже знаем — это основное состояние гармонического осциллятора $|0\rangle$ (см. (12.21)).

Мы знаем, что $\hat{a} = \frac{\hat{Q} + i\hat{P}}{\sqrt{2}}$, пусть аналогично

$$z = \frac{\alpha + i\beta}{\sqrt{2}}, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}.$$

⁵ Попробуйте доказать это от противного, предположив, что $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = Z|\psi\rangle$, и разложив $|\psi\rangle$ по базису состояний $|n\rangle$. (При каком минимальном n коэффициент разложения может быть отличен от нуля?)

Тогда уравнение (12.40) перепишется как

$$\frac{\hat{Q} + i\hat{P}}{\sqrt{2}}|\psi_z\rangle = \frac{\alpha + i\beta}{\sqrt{2}}|\psi_z\rangle \Leftrightarrow [(\hat{Q} - \alpha) + i(\hat{P} - \beta)]|\psi_z\rangle = 0.$$

Таким образом, состояния $|\psi_z\rangle$ с произвольным $z \in \mathbb{C}$ получаются из $|0\rangle$ сдвигом по координате на α и импульсу на β .

В координатном представлении получаем

$$\psi_z(Q) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \cdot e^{i\beta Q - \frac{(Q-\alpha)^2}{2}}.$$

Однако при вычислении средних по когерентному состоянию осциллятора можно обойтись без этой формулы, используя вместо этого уравнение (12.40). Это работает для любых операторов, выражающихся через $\hat{Q}$ и $\hat{P}$ (а значит выражающихся через $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$).

Продемонстрируем это на примере вычисления средней энергии гармонического осциллятора в когерентном состоянии $|\psi_z\rangle$. В первую очередь надо записать оператор через $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ так, чтобы в каждом слагаемом все операторы $\hat{a}^\dagger$ были левее всех операторов $\hat{a}$ (используя коммутатор $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ (12.8), для расстановки лестничных операторов в правильном порядке)⁶

$$\langle\psi_z|\hat{H}|\psi_z\rangle = \langle\psi_z|\frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})|\psi_z\rangle.$$

После этого действуем всеми операторами $\hat{a}$ налево, а всеми операторами $\hat{a}^\dagger$ направо, используя (12.40) и эрмитово сопряжённое соотношение:

$$\hat{a}|\psi_z\rangle = z|\psi_z\rangle, \quad \langle\psi_z|\hat{a}^\dagger = \langle\psi_z|z^*.$$

$$\langle\psi_z|\hat{H}|\psi_z\rangle = \langle\psi_z|\frac{\hbar\omega}{2}(z^*z + \frac{1}{2})|\psi_z\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}(|z|^2 + \frac{1}{2}).$$

12.6.1 Временная эволюция когерентного состояния*

Для изучения временной эволюции когерентного состояния воспользуемся представлением Гайзенберга:

$$|\psi_z(t)\rangle = \hat{U}_t|\psi_z\rangle,$$

$$\hat{a}|\psi_z\rangle = z|\psi_z\rangle \Rightarrow \hat{U}_t\hat{a}|\psi_z\rangle = \hat{U}_tz|\psi_z\rangle = z|\psi_z(t)\rangle.$$

Мы знаем, что $\hat{a}_r(t) = \hat{U}_t^{-1}\hat{a}\hat{U}_t = e^{-i\omega t}\hat{a}$, поэтому

$$\hat{U}_t\hat{a}|\psi_z\rangle = \underbrace{\hat{U}_t\hat{a}\hat{U}_t^{-1}}_{\hat{a}_r(-t)}\underbrace{\hat{U}_t|\psi_z\rangle}_{|\psi_z(t)\rangle} = \hat{a}_r(-t)|\psi_z(t)\rangle = e^{i\omega t}\hat{a}|\psi_z(t)\rangle.$$

Таким образом,

$$e^{i\omega t}\hat{a}|\psi_z(t)\rangle = z|\psi_z(t)\rangle \Rightarrow \hat{a}|\psi_z(t)\rangle = e^{-i\omega t}z|\psi_z(t)\rangle.$$

Мы получили, что исходное состояние $|\psi_z\rangle$ эволюционировало за время t в состояние $|\psi_z(t)\rangle$, которое снова оказалось собственным для оператора $\hat{a}$, но уже с

⁶Это называется — *нормальное упорядочение*.

собственным числом $z(t) = e^{-i\omega t}z$. Средние значения координаты и импульса (вещественная и мнимой части $\sqrt{2}z$) зависят от времени также, как для классического осциллятора, при этом дисперсии координаты и импульса остаются неизменными, т.е. волновой пакет осциллирует как целое, не расплываясь.

Мы получили временную эволюцию когерентного состояния с точностью до зависящего от времени фазового множителя. Точную временную эволюцию когерентного состояния мы можем легко получить разложив его по базису чисел заполнения.

12.6.2 Когерентные состояния в представлении чисел заполнения**

Результаты данного подраздела можно получить более громоздким и прямолинейным путём, подставляя в уравнение для когерентного состояния гармонического осциллятора (12.40) волновую функцию, разложенную по $|n\rangle$ и исследуя рекуррентные соотношения для коэффициентов разложения.⁷ Однако мы нашли полезным для любознательных студентов использовать более изощрённый подход (поставив на заголовок лишнюю звёздочку).

Мы можем разложить произвольную волновую функцию по базисным состояниям $|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \right) |0\rangle = f(\hat{a}^\dagger) |0\rangle.$$

Таким образом, волновая функция может быть представлена как результат действия на основное состояние $|0\rangle$ некоторой функции f от оператора $\hat{a}^\dagger$. Функция f задаётся с помощью формального степенного ряда:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{n!}} x^n.$$

Мы можем считать, что функция $f(x)$ является иным представлением волновой функции $|\psi\rangle$. Вопрос о сходимости ряда, который задаёт функцию $f(x)$ при тех или иных значениях аргумента не имеет физического смысла и нас не интересует. Единственная сходимость, которую следует требовать для $f(x)$ — сходимость квадрата нормы волновой функции:

$$\|\psi\|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left| \frac{d^n f(0)}{dx^n} \right|^2.$$

Производная здесь понимается как формальная производная ряда.

Оператор $\hat{a}^\dagger$ действует на волновую функцию, представленную как $f(x)$ путём умножения на x , а оператор $\hat{a}$ действует как $\frac{\partial}{\partial x}$.⁸

⁷Читатель может проделать эти вычисления в качестве упражнения.

⁸Проверьте это. Предварительно выведите, используя (12.8), следующую формулу: $[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}$. Мы можем также символически написать $\hat{a} = \frac{\partial}{\partial \hat{a}^\dagger}$. Для сравнения см. также раздел 13.2.4 «Производная по операторному аргументу».

Таким образом, уравнение для когерентного состояния гармонического осциллятора (12.40) переписывается следующим образом:⁹

$$\hat{a}|\psi_z\rangle = z|\psi_z\rangle \quad \Rightarrow \quad \frac{df}{dx} = zf.$$

Решая это уравнение находим:

$$\begin{aligned} f(x) &= c \cdot e^{zx} \quad \Rightarrow \quad |\psi_z\rangle = c \cdot e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle. \\ |\psi_z\rangle &= c \cdot e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle = c \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = c \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \\ \|\psi_z\| &= |c|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z^* z)^n}{n!} = |c|^2 e^{|z|^2}. \end{aligned}$$

Теперь мы можем написать нормированное на единицу когерентное состояние:

$$|\psi_z\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} \cdot e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle. \quad (12.41)$$

Используя представление Гейзенберга мы можем теперь получить временную эволюцию когерентного состояния со всеми фазовыми множителями:

$$|\psi_z(t)\rangle = \hat{U}_t e^{-\frac{|z|^2}{2}} \cdot e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} \hat{U}_t e^{z\hat{a}^\dagger} \hat{U}_t^{-1} \cdot \hat{U}_t |0\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} e^{z\hat{a}_r^\dagger(-t)} \cdot |0\rangle_t.$$

Таким образом, используя соотношение $\hat{a}_r^\dagger(t) = e^{i\omega t} \hat{a}^\dagger$, находим

$$|\psi_z(t)\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} e^{ze^{-i\omega t} \hat{a}^\dagger} \cdot e^{-i\frac{\omega t}{2}} |0\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} |\psi_{z(t)}\rangle, \quad z(t) = ze^{-i\omega t}. \quad (12.42)$$

12.7 Сжатые состояния**

Рассмотренные выше, в разделе 12.6, *когерентные состояния гармонического осциллятора* не исчерпывают всех возможных *когерентных состояний для пары операторов координата-импульс* (см. раздел 7.2.3). Общее когерентное состояние для пары операторов координата-импульс должно удовлетворять уравнению

$$(\hat{x} + i\gamma\hat{p})|\psi_{z\gamma}\rangle = z|\psi_{z\gamma}\rangle,$$

в котором параметры $z \in \mathbb{C}$ и $\gamma > 0$ могут быть выбраны произвольными. Однако когерентные состояния гармонического осциллятора ограничены случаем фиксированного $\gamma = \frac{x_0}{p_0} = \frac{1}{m\omega}$ (см. (12.5)). Такие состояния все получаются сдвигом по координате и импульсу гауссова распределения (основного состояния) с фиксированной шириной.

Мы можем рассмотреть когерентные состояния с другими значениями γ , которым будут соответствовать гауссовы распределения более или менее широкие, чем для основного состояния осциллятора. Такие состояния называют *сжатыми состояниями гармонического осциллятора*.¹⁰

⁹Мы также получаем ещё одно доказательство отсутствия ненулевых состояний, удовлетворяющих уравнению $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = z|\psi\rangle$, которое переписывается в виде $x f(x) = z f(x)$.

¹⁰Название связано с тем, что распределение по координате или по импульсу для такого состояния может оказаться более узким (сжатым), чем для основного состояния осциллятора.

Сжатые состояния могут быть получены из когерентных изменением масштабы (растяжением или сжатием) по координате (масштаб по импульсу меняется автоматически так, чтобы продолжало выполняться соотношением $x_0 p_0 = \hbar$).

Удобно построить оператор сжатия, действие которого позволяло бы проводить соответствующее изменение масштаба. Сжатие по координате x соответствует сдвигу по $\ln|x|$. Таким образом, генератор соответствующего преобразования должен иметь вид:

$$\hat{G}_0 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \ln|x|} = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} = \hat{x}\hat{p}. \quad (12.43)$$

Данный оператор, однако, не является эрмитовым, а следовательно, экспонента от него

$$e^{\frac{i}{\hbar}k\hat{G}_0}, \quad e^{\frac{i}{\hbar}k\hat{G}_0}\psi(x) = \psi(e^k x)$$

не будет унитарным оператором. Это связано с тем, что при сжатии в e^k раз по x во столько же раз уменьшается квадрат нормы $\|\psi\|^2$. Для того, чтобы сделать оператор унитарным можно добавить к генератору $\hat{G}_0$ константу с таким расчётом, чтобы новый оператор оказался эрмитовым.

$$\hat{G} = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2} \right) = \hat{x}\hat{p} - \frac{i\hbar}{2} = \frac{1}{2}[\hat{x}, \hat{p}]_+ = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) = -i\hbar \frac{\hat{a}^2 - (\hat{a}^\dagger)^2}{2}. \quad (12.44)$$

Экспонента от эрмитового оператора автоматически оказывается унитарной:

$$\hat{D}_k = e^{\frac{i}{\hbar}k\hat{G}} = e^{\frac{k}{2}(\hat{a}^2 - (\hat{a}^\dagger)^2)}, \quad \hat{D}_k\psi(x) = e^{\frac{k}{2}}\psi(e^k x). \quad (12.45)$$

Как эволюционирует сжатое состояние, по сравнению с исходным? Пусть

$$|\psi_k\rangle = \hat{D}_k|\psi\rangle.$$

$$\begin{aligned} |\psi_k(t)\rangle &= \hat{U}_t|\psi_k\rangle = \hat{U}_t\hat{D}_k|\psi\rangle = \hat{U}_t\hat{D}_k\hat{U}_t^{-1}\hat{U}_t|\psi\rangle = (\hat{D}_k)_r(-t)|\psi(t)\rangle. \\ (\hat{D}_k)_r(-t) &= e^{\frac{k}{2}(\hat{a}_r^2(-t) - (\hat{a}_r^\dagger(-t))^2)} = e^{\frac{k}{2}(e^{2i\omega t}\hat{a}^2 - e^{-2i\omega t}(\hat{a}^\dagger)^2)} = e^{\frac{ke^{2i\omega t}}{2}(\hat{a}^2 - e^{-4i\omega t}(\hat{a}^\dagger)^2)}. \end{aligned}$$

Таким образом, каждые $\frac{1}{4}$ периода колебаний осциллятора меняется знак k , т.е. сжатие по координате (и растяжение по импульсу) сменяется растяжением по координате (и сжатием по импульсу).

Среднее значение координаты и импульса, как и для любых волновых функций гармонического осциллятора, колеблются как в классике (12.39).

В моменты времени не кратные четверти периода сжатое состояние уже не когерентное для пары наблюдаемых координата-импульс, но оказывается когерентным для пары

$$\begin{aligned} \hat{Q}_r(-t) &= \cos(\omega t)\hat{Q} - \sin(\omega t)\hat{P}, \\ \hat{P}_r(-t) &= \sin(\omega t)\hat{Q} + \cos(\omega t)\hat{P}. \end{aligned}$$

12.8 Классический предел*

Как получить из квантового осциллятора классический? Мы уже установили, что средние значения координаты и импульса для произвольного квантового состояния гармонического осциллятора эволюционируют точно также, как и в классике (12.39). Однако, какие из квантовых состояний наиболее похожи на классические? Для стационарных состояний с любой энергией $\langle Q(t) \rangle = \langle P(t) \rangle = 0$, $\langle Q^2(t) \rangle = \langle P^2(t) \rangle = n + \frac{1}{2}$, $\langle E \rangle = E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

В классическом пределе постоянную планка $\hbar$ можно считать малой (n велико) и мы можем пренебречь добавкой $\frac{1}{2}$ в формулах для энергии и средних квадратов.

Основному состоянию ($n = 0$) можно сопоставить состояние равновесия классического осциллятора, а возбуждённым состояниям — классические состояния с неизвестной фазой колебаний: мы знаем, что осциллятор колеблется с определённой амплитудой $\sqrt{\langle Q^2(t) \rangle} = \sqrt{\langle P^2(t) \rangle}$, но не знаем с какой фазой происходят колебания. Из-за этого незнания координата и импульс усредняются по периоду и их средние значения обнуляются.

Определение фазы колебания — это определение времени: $\varphi = \omega t$. Соотношение неопределённостей энергия-время (2.2) может быть переписано как соотношение фаза-уровень:

$$\delta t \cdot \delta E = \frac{\delta \varphi}{\omega} \cdot \delta E \geq \frac{1}{2} \quad \Leftrightarrow \quad \delta \varphi \cdot \delta n \geq \frac{1}{2}. \quad (12.46)$$

Таким образом, чтобы хотя бы приближённо определить фазу колебаний нам необходимо пожертвовать точным определением энергии.

Наиболее классическими состояниями осциллятора принято считать когерентные состояния, поскольку для них неопределённости координаты и импульса минимальны и не зависят от времени $\langle \delta Q^2(t) \rangle = \langle \delta P^2(t) \rangle = \frac{1}{2}$. При этом чем больше средняя энергия когерентного состояния, тем более классическим оно является.

12.9 Квантованные поля (Φ^*)

Классическая теория поля может рассматриваться как теоретическая механика систем, с бесконечным числом степеней свободы. При этом значение поля в каждой точке пространства (или каждая Фурье-компонента поля) может рассматриваться как обобщённая координата.

Квантовая теория поля соотносится с классической теорией поля точно также, как квантовая механика соотносится с теоретической механикой систем, с конечным числом степеней свободы.

Квантовая теория поля — теория с переменным числом частиц, поскольку частицы в ней выступают в роли возбуждений поля. Мы обязаны рассматривать частицы в качестве возбуждений соответствующих полей в тех случаях, когда характерные энергии становятся сравнимы с энергиями покоя частиц, а это, в частности, означает, что корректная релятивистская квантовая механика может быть построена только в рамках квантовой теории поля.

Если мы рассматриваем поле свободных (т.е. ни с кем не взаимодействующих) частиц, то обычно поле заключается в ящик $L_x \times L_y \times L_z$ с периодическими граничными условиями и поле разлагается в ряд Фурье. Каждому разрешённому (при данных размерах ящика) волновому вектору ставится в соответствие количество степеней свободы K , равное числу поляризаций у частиц рассматриваемого сорта. После этого пишется *гамильтониан квантованного поля*, состоящий из суммы членов, описывающих все эти степени свободы.

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{H}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{L_x} N_x, \frac{2\pi}{L_y} N_y, \frac{2\pi}{L_z} N_z \right), \quad N_x, N_y, N_z \in \mathbb{Z}, \quad \sigma = 1, \dots, K.$$

Взаимодействие частиц описывается с помощью добавления в гамильтониан членов, содержащих переменные относящиеся к разным состояниям частиц.

Вид гамильтониана $\hat{H}_{\mathbf{k},\sigma}$ зависит от того, является ли рассматриваемое поле бозонным или фермионным. Для бозонных полей (например, для электромагнитного поля) надо взять гамильтониан гармонического осциллятора

$$\hat{H}_{\mathbf{k},\sigma} = \hbar\omega_{\mathbf{k},\sigma} \frac{1}{2} (\hat{P}_{\mathbf{k},\sigma}^2 + \hat{Q}_{\mathbf{k},\sigma}^2) = \hbar\omega_{\mathbf{k},\sigma} (\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2}).$$

Операторы $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ и $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$ оказываются операторами рождения и уничтожения частицы (*кванта поля*, для электромагнитного поля — *фотона*) в состоянии с волновым вектором $\mathbf{k}$ (т.е. с импульсом $\mathbf{p}_{\mathbf{k}} = \hbar\mathbf{k}$), энергией $\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} = \hbar\omega_{\mathbf{k},\sigma}$ и поляризацией σ . Оператор $\hat{N}_{\mathbf{k},\sigma} = \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$ оказывается оператором числа частиц с волновым вектором $\mathbf{k}$ и поляризацией σ . Через операторы $\hat{N}_{\mathbf{k},\sigma}$ легко записываются такие величины как общее число частиц

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hat{N}_{\mathbf{k}\sigma},$$

общая энергия

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} (\hat{N}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2}) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hbar\omega_{\mathbf{k}\sigma} (\hat{N}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2}),$$

общий импульс

$$\hat{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \mathbf{p}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{N}_{\mathbf{k}\sigma}.$$

Общая энергия оказывается ненулевой даже в отсутствие частиц (такое состояние называют *вакуумом*)

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hbar\omega_{\mathbf{k}\sigma},$$

эту энергию называют *энергией нулевых колебаний вакуума* (или просто — *энергия вакуума*). Более того, энергия вакуума как правило оказывается бесконечной (одна из знаменитых расходимостей квантовой теории поля). Однако обычно эту энергию просто отбрасывают, используя модифицированный гамильтониан

$$\hat{H}_{\mathbf{k},\sigma} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hbar\omega_{\mathbf{k},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}.$$

В большинстве случаев нас интересуют не абсолютные значения энергий, а изменение энергии, поэтому мы можем вычесть из энергии произвольную (хотя и бесконечную) константу. Однако энергия нулевых колебаний вакуума проявляется на эксперименте в виде *эффекта Казимира*, за счёт которого две параллельные проводящие пластинки притягиваются. Это притяжение вызвано зависимостью E_0 для нулевых колебаний электромагнитного поля от размера ящика (т.е. от расстояния между пластинами).

Также энергия вакуума должна быть существенна для гравитационных эффектов, в общей теории относительности она может давать вклад в *космологическую постоянную*.

Для фермионных полей гамильтонианы $\hat{H}_{\mathbf{k},\sigma}$ действуют на двумерных пространствах состояний и имеют два уровня с энергией ε_0 (нет частицы) и с энергией $\varepsilon_0 + \hbar\omega_{\mathbf{k},\sigma}$ (есть частица). Тем самым автоматически запрещается существование двух фермионов в одном состоянии.

Для фермионов также вводятся операторы рождения и уничтожения, но для этих операторов коммутационные соотношения заменяются на антикоммутационные, которые нами пока не обсуждаются.

Рассмотрение кристаллической решётки очень похоже на рассмотрение поля, с той разницей, что значения поля задаются не во всех точках, а только в узлах решётки, а допустимые значения волнового вектора оказываются обрезаны сверху значениями порядка $\frac{2\pi}{a}$, где a — период решётки. За счёт этого число степеней свободы оказывается конечным, хотя и большим. Конечной оказывается и энергия нулевых колебаний. Элементарные возбуждения в этом случае считаются не частицами, а *квазичастицами*. Например, возбуждения (кванты) упругих (звуковых) колебаний решётки называются *фононами*. Квазичастицы описываются с помощью того же математического аппарата, что и настоящие частицы. Для них также можно писать энергию, импульс, число частиц, операторы рождения, уничтожения, распределения Бозе (для свободных бозонов) и Ферми (для свободных фермионов) и пр.

12.9.1 Классический предел ($\Phi\Phi^*$)

Для колебаний квантованных полей как и для гармонического осциллятора мы можем получить из соотношения неопределённостей энергия–время соотношение фаза–номер уровня (12.46), которое теперь понимается как соотношение фаза волны–число частиц.

$$\delta\varphi \cdot \delta n \geq \frac{1}{2}.$$

Как и для гармонического осциллятора наиболее классическими состояниями бозонного поля принято считать когерентные состояния. Причём чем больше средняя энергия (число частиц) когерентного состояния, тем более классическим оно является. Именно состояния похожие на когерентные чаще всего возникают на экспериментах «сами собой», состояния же с определённым числом частиц как правило приходится специально приготавливать. Например, если мы ослабим с помощью светофильтров импульс лазера так, что в нём будет в среднем один фотон, то точное число фотонов в таком состоянии окажется неопределённым. В некоторых опытах когерентные состояния очень хорошо умеют притворяться классическими полями, в частности при рассмотрении расщепления слабого (в среднем меньше 1 фотона) лазерного импульса на полупрозрачном зеркале при обнаружении фотона в одном плече вероятность обнаружения фотона во втором плече не уменьшается, а увеличивается.

Число фермионных возбуждений (частиц) в одном состоянии может быть только 0 или 1. Это препятствует точному определению фазы фермионных волн, а значит и созданию для них состояний близких к классическим.

Глава 13

Переход от квантовой механики к классической

Согласно *принципу соответствия* (2.4 «Принцип соответствия (ф)») квантово-механическое и классическое описания природы должны *соответствовать* друг другу в области применимости обеих теорий, т.е. они должны давать для таких случаев согласующиеся предсказания.

Это соответствие проявляется в целом ряде теорем и утверждений, некоторые из которых будут обсуждаться далее, однако было бы неверно сводить всё соответствие, например, к теореме Эренфеста. Формальный предел $\hbar \rightarrow 0$ вовсе не исчерпывает вопроса о получении классической механики из квантовой. Соответствие квантовой механики и классической — сложный вопрос, предполагающий обращение к основам обеих теорий, включая скользкие вопросы интерпретации квантовой механики. Более того, во многих случаях заранее не ясно в чём именно состоит соответствие между двумя теориями, а также есть ли это соответствие вообще, или в каком-то вопросе две теории радикально расходятся между собой. Какой теории отдать предпочтение при таком расхождении также не всегда ясно: хотя квантовая механика более общая теория и квантовый взгляд на мир снимает многие классические проблемы, он приносит свои собственные проблемы связанные с интерпретацией квантовых загадок и парадоксов.

13.1 Волны де Бройля. Фазовая и групповая скорость

На заре квантовой теории в 1923 году Луи де Бройль предложил рассматривать частицу как волну с волновым вектором, выражаемым через импульс и циклической частотой, выражаемой через энергию:

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}.$$

Постоянная Планка $\hbar$ является размерной константой, а следовательно может быть приравнена единице, выбором соответствующих единиц измерения. Таким образом, мы можем считать, что импульс и энергия — это и есть волновой вектор и циклическая частота, просто выраженные в других единицах измерения.

В 1927 году гипотеза де Бройля была подтверждена в экспериментах по дифракции электронов на кристалле.

Волна де Бройля имеет вид

$$e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}.$$

Её фазовая скорость — $v_\phi = \frac{\omega}{k}$. Однако фазовая скорость волны де Бройля не имеет физического смысла. В частности при сдвиге нулевого уровня энергии меняется фазовая скорость. Более того, для релятивистского соотношения между энергией и импульсом $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ фазовая скорость обратно пропорциональна классической скорости и превышает скорость света:

$$v_\phi = \frac{\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}}{p} = \frac{c^2}{v_{\text{кл}}} > c.$$

Это и понятно: фаза волновой функции не влияет на вероятность обнаружения частицы.

Естественно попытаться отождествить классическую скорость с групповой скоростью, т.е. со скоростью, с которой перемещается волновой пакет:¹

$$\mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}.$$

Данное выражение уже не меняется при сдвиге нулевого уровня энергии, а движение волнового пакета соответствует смещению места наиболее вероятного обнаружения частицы, что уже может быть наблюдаемо на опыте.

Если теперь переписать выражение для групповой скорости через энергию и импульс (умножить числитель и знаменатель на $\hbar$), то мы получим

$$\mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}}, \quad v^\alpha = \dot{x}^\alpha = \frac{\partial H(x, p)}{\partial p_\alpha}.$$

В последнем выражении, переписанном через компоненты легко узнать классические уравнения Гамильтона. Это позволяет определить область применимости классической механики, как область применимости приближения волновых пакетов.

Следует, однако, отметить, что простая замена частицы волновым пакетом в обычном пространстве, или даже замена системы волновым пакетом в конфигурационном пространстве, не описывает исчерпывающим образом перехода от квантовой механики к классической. Для большинства систем волновой пакет за конечное время расплывётся до макроскопических размеров. Например, можно было бы ожидать, со времени своего возникновения планеты существенно «размазались» по орбитам вокруг Солнца, что плохо соотносится с классической картиной. Чтобы предотвратить это расплывание следует время от времени включать какую-то процедуру измерения.

Расплывание волновых пакетов имеет свой аналог и в классической механике (расплывание облака вероятностей), понимаемой как теория эволюции распределений вероятностей для классической системы (см. раздел 2.5.1 «Вероятностная природа классической механики»).

13.2 Что такое функция от операторов?

При рассмотрении соответствия между квантовой механикой и классической часто встречаются выражения типа «классический гамильтониан, в который в качестве аргументов подставлены квантовые операторы». С точки зрения строгого

¹Одномерные волновые пакеты и их групповая скорость уже рассматривались в разделе 6.3.6 «Волновые пакеты».

математического понятия функции такое выражение бессмысленно: функция — это правило, которое ставит в соответствие объекту из области определения функций, объект из области её значений. Для классической наблюдаемой мы можем записать:

$$F: \underbrace{\mathbb{R}^N}_{\text{обл. определения}} \rightarrow \underbrace{\mathbb{R}}_{\text{обл. значений}}.$$

При этом конкретный способ описания соответствия значения функции значению аргумента может быть различен: явная алгебраическая формула, неявная формула (значение функции — корень алгебраического уравнения), задание в квадратурах (через определённые интегралы), задание функции как решения дифференциального уравнения, задание функции таблицей значений, или графиком.

Поскольку набор операторов, который нам надо подставлять в функцию числовых аргументов не входит в область определения (не является набором чисел), то строго говоря вычислить функцию с такими аргументами невозможно.

Тем не менее, в некоторых случаях мы можем обобщить (доопределить) функции числовых аргументов на операторные аргументы определённого вида, хотя такое соответствие часто не будет взаимнооднозначным.

13.2.1 Степенные ряды и полиномы коммутирующих аргументов

Простейший случай с которым мы можем столкнуться — доопределение числовой функции на наборе взаимнокоммутирующих операторов. Порядок умножения таких операторов не имеет значения. Так что *если исходная функция задаётся полиномом или степенным рядом* (хотя бы формальным рядом) мы можем определить оператор, являющийся значением функции как ряд (полином) по степеням соответствующих операторов.

Таким образом мы определяем, например, такие операторы как

- $K(\hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ — кинетическая энергия,
- $U(\hat{x})$ — потенциальная энергия (если функция $U(x)$ может быть задана рядом или полиномом),
- $e^{i\frac{a}{\hbar}\hat{p}}$ — оператор сдвига по координате,
- $e^{-i\frac{b}{\hbar}\hat{q}}$ — оператор сдвига по импульсу,
- $e^{-i\frac{t}{\hbar}\hat{H}}$ — оператор эволюции (сдвига по времени),
- $e^{i\frac{a}{\hbar}(\hat{p}_z + p_0\hat{l}_z)}$ — оператор винтового сдвига.

13.2.2 Функции одновременно диагонализующих операторов

Иногда операторные аргументы задаются коммутирующими операторами, которые при этом ещё и одновременно диагонализуются выбором соответствующего базиса. Это относится к набору $\hat{A}_k$ взаимнокоммутирующих эрмитовых, антиэрмитовых и унитарных операторов.²

²Взаимнокоммутирующие нормальные операторы не всегда можно одновременно диагонализировать. Например, $[\hat{x} + i\hat{y}, \hat{p}_x + i\hat{p}_y] = 0$, но операторы $\hat{x} + i\hat{y}$ и $\hat{p}_x + i\hat{p}_y$ одновременно не диагонализуются. Для нормальных операторов как достаточное условие одновременной диагонализации можно дополнительно потребовать коммутируемость сопряжённых операторов, или эрмитовых и антиэрмитовых частей.

Для такого набора операторов мы можем доопределить более широкий набор функций.

Разбиваем пространство состояний $\mathcal{H}$ в сумму *максимальных* собственных подпространств нашего набора операторов $\hat{A}_k$.

$$\mathcal{H} = \bigoplus_i \mathcal{H}_i$$

(индекс i может быть как дискретным, так и непрерывным).

При этом любой вектор является собственным для всех операторов $\hat{A}_k$:

$$\forall \psi \in \mathcal{H}_i, \quad \hat{A}_k \psi = \alpha_{ki} \psi.$$

Максимальность собственных подпространств означает, что любой общий собственный вектор операторов $\hat{A}_k$ попадает в одно из подпространств.

Мы определяем оператор-функцию $F(\hat{A}_k)$ так, что все подпространства $\mathcal{H}_i$ являются для него собственными, с собственными числами вычисляемыми по собственным числам операторов $\hat{A}_k$ с помощью исходной функции F :

$$\forall \psi \in \mathcal{H}_i \quad F(\hat{A}_k) \psi = F(\alpha_{ki}) \psi. \quad (13.1)$$

Если функция представляет собой степенной ряд или полином, то это определение согласуется с приведённым выше определением через формальные ряды (полиномы), но на одновременно диагонализующих операторах мы можем определять функции не разложимые в ряд, включая разрывные, например, θ -функцию (ступеньку).

Условие максимальной подпространств нужно только если мы имеем дело с неоднозначными функциями (корень, логарифм и т.п.). Оно гарантирует, что все общие собственные векторы операторов $\hat{A}_k$ будут собственными для оператора $F(\hat{A}_k)$, какие бы ветви мы не выбирали на каждом подпространстве.

Мы можем использовать это определение функции от оператора для определения разрывных потенциалов, проекторов на собственные подпространства и для проекторнозначных мер (5.3.1 «Проекторнозначная мера**»). Условие максимальной подпространств было важно при определении квазиимпульса (11.4.3 «Квазиимпульс*»).

13.2.3 Функции некоммутирующих аргументов

Функции от некоммутирующих аргументов не могут быть доопределены однозначно. Результат доопределения всегда зависит от того, какой именно формулой представляется исходная функция. Например, если к исходной формуле прибавить член, пропорциональный коммутатору аргументов, то формула будет давать те же значения на коммутирующих (в том числе числовых) аргументах, но значение на некоммутирующих аргументах изменится.

Функция доопределённая на эрмитовых аргументах может не быть эрмитовой. Обычно для того, чтобы избежать этого вводится симметризованное произведение

$$\hat{a} \circ \hat{b} = \frac{\hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a}}{2}, \quad (13.2)$$

которое по двум эрмитовым операторам снова даёт эрмитов. Однако и симметризованное произведение не устраняет неоднозначности: оно неассоциативно, т.е.

возможна ситуация, когда

$$\hat{a} \circ (\hat{b} \circ \hat{c}) \neq (\hat{a} \circ \hat{b}) \circ \hat{c}, \quad (13.3)$$

поэтому результат доопределения функции может зависеть от расстановки скобок, которые были неважны для коммутирующих аргументов.

Функции от некоммутирующих аргументов мы будем определять как некоторую комбинацию, построенную с помощью операций сложения, умножения на число, операторного умножения функций от коммутирующих аргументов (их мы обсуждали выше в разделах 13.2.1 и 13.2.2).

13.2.4 Производная по операторному аргументу

Для того, чтобы взять производную от функции надо, чтобы аргументу функции можно было дать бесконечно малое приращение, т.е. аргумент функции должен непрерывно меняться. Когда мы доопределяем функцию на фиксированном наборе операторов, то процедура доопределения зависит от того, какие именно операторы мы взяли в качестве аргументов, кроме того, эта процедура может зависеть от нашего произвола (часто дискретного произвола). В таких условиях правильнее считать, что мы имеем не операторную функцию операторнозначных аргументов, а один единственный оператор $F(\hat{A}_k)$, который выражен через фиксированный набор операторов $\hat{A}_k$. Говорить о производной от операторнозначной функции по операторному аргументу в данном случае, строго говоря (используя обычный смысл понятия производной) нельзя.

Прежде чем определять производную по операторному аргументу полезно понять, зачем вообще нам такая производная может понадобиться. В первую очередь такая производная нужна нам для того, чтобы записать квантовое обобщение уравнений Гамильтона:

$$\frac{dp_i}{dt} = \{p_i, H\} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \frac{dq_i}{dt} = \{q_i, H\} = +\frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (13.4)$$

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}, \quad \{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0.$$

Мы знаем, что в квантовом случае скобка Пуассона выражается через коммутатор:

$$\{\cdot, \cdot\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[\cdot, \cdot].$$

И мы хотим, чтобы квантовые уравнения Гайзенберга записывались аналогично:

$$\frac{d\hat{p}_i}{dt} = \underbrace{\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i, \hat{H}]}_{\text{знаем}} = -\underbrace{\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}_i}}_{\text{хотим}}, \quad \frac{d\hat{q}_i}{dt} = \underbrace{\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i, \hat{H}]}_{\text{знаем}} = +\underbrace{\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i}}_{\text{хотим}}, \quad (13.5)$$

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = \delta_{ij}, \quad [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0.$$

Причём, если гамильтониан представим в виде суммы кинетической и потенциальной энергии $\hat{H} = K(\hat{p}) + U(\hat{q})$, которые записываются через дифференцируемые функции от координат и импульсов, то мы можем их просто формально продифференцировать (по обычным правилам дифференцирования.)

Это возможно потому, что для коммутатора, как для производной, у нас есть линейность

$$[\hat{x}, \alpha \hat{A} + \hat{B}] = \alpha [\hat{x}, \hat{A}] + [\hat{x}, \hat{B}],$$

и некоммутативное (порядок сомножителей имеет значение!) «правило Лейбница» (5.21):

$$[\hat{x}, \hat{A}\hat{B}] = [\hat{x}, \hat{A}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{x}, \hat{B}].$$

Таким образом, если у нас есть набор пар операторов $\hat{A}_k$ и $\hat{B}_l$, коммутатор которых даёт ненулевое число для операторов одной пары и нуль в противном случае

$$[\hat{A}_k, \hat{B}_l] = c_k \delta_{kl}, \quad [\hat{A}_k, \hat{A}_l] = [\hat{B}_k, \hat{B}_l] = 0,$$

то для функции этих операторов $\hat{F} = F(\hat{A}_k, \hat{B}_l)$ мы можем определить производные по ним:

$$\frac{\partial F(\hat{A}_k, \hat{B}_l)}{\partial \hat{A}_k} = \frac{1}{c_k} [\hat{F}, \hat{B}_k], \quad \frac{\partial F(\hat{A}_k, \hat{B}_l)}{\partial \hat{B}_k} = \frac{1}{c_k} [\hat{A}_k, \hat{F}]. \quad (13.6)$$

Эти производные линейны

$$\frac{\partial (\alpha \hat{A} + \hat{B})}{\partial x} = \alpha \frac{\partial \hat{A}}{\partial x} + \frac{\partial \hat{B}}{\partial x},$$

удовлетворяют *некоммутативному правилу Лейбница*

$$\frac{\partial \hat{A}\hat{B}}{\partial \hat{x}} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial \hat{x}} \hat{B} + \hat{A} \frac{\partial \hat{B}}{\partial \hat{x}}$$

и соответствуют обычным формальным производным благодаря свойству

$$\frac{\partial \hat{x}_i}{\partial \hat{x}_j} = \delta_{ij}.$$

Если функция задана как ряд или полином от своих аргументов, то такие производные можно брать как формальные производные по правилу (проверьте через коммутаторы!)

$$\frac{\partial \hat{x}^n}{\partial \hat{x}} = n \hat{x}^{n-1}.$$

Если задана функция $F(\hat{A}_k)$ одновременно диагонализующих аргументов $\hat{A}_k$, то дифференцирование снова может быть выполнено формально, но уже по другому правилу: дифференцируется по соответствующему (числовому) аргументу x_k исходная (числовая) функция $F(x)$:

$$F'_k(x) = \frac{\partial F(x)}{\partial x_k}$$

После чего в производную подставляются (в прежнем смысле) операторные аргументы:

$$\frac{\partial F(\hat{A})}{\partial \hat{A}_k} = F'_k(\hat{A}).$$

Для функции некоммутирующих аргументов дифференцирование также может выполняться формально, при условии, что применяется *некоммутативное правило Лейбница* (с учётом порядка сомножителей).

Такого рода производные по операторному аргументу могут применяться браться не только по координатам и импульсам. Например, осцилляторные операторы подходят ничуть не хуже

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0,$$

$$\frac{\partial F(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)}{\partial \hat{a}_i} = [\hat{F}, \hat{a}_i^\dagger], \quad \frac{\partial F(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)}{\partial \hat{a}_i^\dagger} = [\hat{a}_i, \hat{F}]. \quad (13.7)$$

Формально дифференцирование операторных функций создаёт соблазн применять его без должного обоснования, однако для произвольных операторов оно может быть определено неоднозначно, возьмём, например, произвольный оператор удовлетворяющий условию $\hat{I}^2 = \hat{1}$ $\hat{I} \neq 1$ (инверсия, зарядовое сопряжение и т.п.). Следующая функция может быть определена разными способами:

$$F(\hat{I}) = \hat{1} = \hat{I}^2.$$

Тогда формальная производная даёт разные ответы, в зависимости от способа определения функции:

$$\frac{\partial F(\hat{I})}{\partial \hat{I}} = \frac{\partial \hat{1}}{\partial \hat{I}} = 0, \quad \text{либо} \quad \frac{\partial F(\hat{I})}{\partial \hat{I}} = \frac{\partial \hat{I}^2}{\partial \hat{I}} = 2\hat{I} \neq 0.$$

13.3 Теорема Эренфеста

В соответствии с данным выше определением производной по операторному аргументу (13.6) уравнения Гайзенберга для операторов координат и импульсов могут быть переписаны в виде, с точностью до шляпок аналогичном уравнениям Гамильтона:

$$\frac{d\hat{p}_i}{dt} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}_i}, \quad \frac{d\hat{q}_i}{dt} = +\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i}. \quad (13.8)$$

И хотя мы сами вложили это свойство (13.5) в определение производной по операторному аргументу, возможность выполнять дифференцирование формально, приводит к тому, что производные с точностью до шляпок и коммутаторов (если аргументы не коммутируют) совпадают с классическими выражениями.

Для сравнения с классическими уравнениями Гамильтона, возьмём от обеих частей уравнений (13.8) средние. С учётом того, что взятие полная производная от оператора по времени по определению (5.19) перестановочно с квантовым усреднением, мы получаем *теорему Эренфеста*:

$$\frac{d\langle \hat{p}_i \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}_i} \right\rangle, \quad \frac{d\langle \hat{q}_i \rangle}{dt} = \left\langle +\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i} \right\rangle. \quad (13.9)$$

Можно сказать, что согласно теореме Эренфеста для систем, имеющих классические аналоги, уравнения Гамильтона выполняются в среднем.

При обсуждении уравнений Гамильтона 5.2.6 на примере движения (5.24) и расплывания (5.25) волнового пакета мы уже сравнивали эволюцию средних значений координаты и импульса с классической эволюцией и получили полное соответствие. Для гармонического осциллятора мы также получили, что средние координаты и импульсы ведут себя классическим образом (12.39).



Рис. 13.1: Эренфест Павел Сигизмундович (1880–1933) W

Для того, чтобы эволюция средних значений соответствовала классической динамике, должно выполняться условие

$$\frac{d\langle\hat{p}_i\rangle}{dt} = -\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{q}_i}(\langle\hat{q}\rangle, \langle\hat{p}\rangle), \quad \frac{d\langle\hat{q}_i\rangle}{dt} = +\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}_i}(\langle\hat{q}\rangle, \langle\hat{p}\rangle). \quad (13.10)$$

Оно выполняется только для квадратичных гамильтонианов (производные от которых линейны). В случае общего положения

$$\langle F(\hat{q}, \hat{p}) \rangle \neq F(\langle\hat{q}\rangle, \langle\hat{p}\rangle).$$

Уравнения (13.10) могут выполняться приблизительно, если неопределённости координат и импульсов достаточно малы по сравнению с характерным масштабом изменения функций $\frac{\partial H}{\partial q_i}$ и $\frac{\partial H}{\partial p_i}$. Более точное по сравнению с классическим приближённое описание может быть получено введением в правую часть поправок, учитывающих неопределённости координат и импульсов.

13.3.1 Отличие от классического случая*



Рис. 13.2: Волович Игорь Васильевич

Негамильтонова эволюция средних координат и импульсов, которая может показаться особенностью квантовой теории, на самом деле, как отметил И.В. Волович, появляется уже в классической динамике, если рассматривать не отдельную фазовую траекторию (классическое чистое состояние), а распределение вероятностей по координатам и импульсам (классическое смешанное состояние).

Усредняя классические уравнения Гамильтона

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \frac{dq_i}{dt} = +\frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (13.11)$$

по классическому смешанному состоянию (по распределению вероятностей по начальным координатам и импульсам) мы получаем классический аналог теоремы Эренфеста (здесь и далее до конца раздела усреднение уже не квантовое, а классическое):

$$\frac{d\langle p_i \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial H}{\partial q_i} \right\rangle, \quad \frac{d\langle q_i \rangle}{dt} = \left\langle +\frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle. \quad (13.12)$$

Как и в квантовом случае, в случае общего положения (для нелинейной функции)

$$\langle F(q, p) \rangle \neq F(\langle q \rangle, \langle p \rangle).$$

Поведение средних координат и импульсов описывается классическими уравнениями Гамильтона

$$\frac{d\langle p_i \rangle}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}(\langle q \rangle, \langle p \rangle), \quad \frac{d\langle q_i \rangle}{dt} = +\frac{\partial H}{\partial p_i}(\langle q \rangle, \langle p \rangle) \quad (13.13)$$

для квадратичных гамильтонианов, либо в пределе узкого распределения по координатам и импульсам.

Как в квантовом, так и в классическом случае мы можем разлагая правую часть формул Эренфеста в ряд оценивать поправки к классической эволюции средних

координат и импульсов, возникающие за счёт неопределённости (конечной дисперсии) координат и импульсов, а также моментов (средних отклонений переменных возведённых в степень) более высоких порядков.

Таким образом, с точки зрения теоремы Эренфеста и эволюции средних координат и импульсов, различие между классической и квантовой теорией состоит в некоммутативности квантовых переменных.

13.4 Теорема Геллмана-Фейнмана

Теорема Геллмана-Фейнмана связывает между собой производные по параметру для оператора наблюдаемой и его допустимого значения (собственного числа).

Пусть эрмитов оператор $\hat{A}(\lambda)$ (например, гамильтониан) зависит от некоторого числового параметра λ . Тогда от этого же параметра будут зависеть собственные числа $a(\lambda)$ и собственные векторы $|\psi(\lambda)\rangle$:

$$\hat{A}(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = a(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle, \quad \langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = 1. \quad (13.14)$$

Отметим, что параметр λ может быть связан с описанием квантовой системы, но не с её состоянием. Таким параметром может быть масса частицы, постоянная Планка, заряд электрона, какой-либо ещё численный коэффициент, но координата, импульс квантовой частицы, или любая другая характеристика *состояния* квантовой системы здесь не годятся. Но, например, координата потенциальной ямы или стенки может быть таким параметром, если они задаются как классические (бесконечно тяжёлые) объекты и не могут быть взяты как аргументы волновой функции.

Продифференцируем тождество (13.14) по параметру λ :

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda}|\psi\rangle + \hat{A}\frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \lambda} = \frac{\partial a}{\partial \lambda}|\psi\rangle + a\frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \lambda}. \quad (13.15)$$

Действуя слева бра-вектором $\langle\psi(\lambda)|$ получаем:

$$\langle\psi|\frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda}|\psi\rangle + \underbrace{\langle\psi|\hat{A}}_{\langle\psi|a} \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \lambda} = \langle\psi|\frac{\partial a}{\partial \lambda}|\psi\rangle + \langle\psi|a\frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \lambda}. \quad (13.16)$$

Сократив повторяющийся слева и справа член получаем *теорему Геллмана-Фейнмана*: при условии (13.14) выполняется тождество

$$\langle\psi|\frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda}|\psi\rangle = \frac{\partial a}{\partial \lambda}. \quad (13.17)$$

Теорема (13.17) полезна при вычислении средних значений от наблюдаемой, которая может быть получена как производная по параметру от другой наблюдаемой, которая определена в рассматриваемом состоянии. При использовании этого метода, полезно помнить, что если мы знаем спектр наблюдаемой $\hat{A}$, то мы знаем спектр всех наблюдаемых вида $F(\hat{A})$, например $\hat{A}^2$, $\hat{A}^3$ и т.д., и к наблюдаемым вида $F(\hat{A})$ можно применить ту же теорему:

$$\langle\psi|\frac{\partial F(\hat{A})}{\partial \lambda}|\psi\rangle = \frac{\partial F(a)}{\partial \lambda}. \quad (13.18)$$

Если рассматриваемые наблюдаемые были определены в классической теории теми же формулами (с точностью до шляпок) то полученное квантовое соотношение между их средними значениями будет совпадать с классическим.

13.5 Квазиклассическое приближение

Исторически квазиклассическое приближение («квазиклассика») предшествовало квантовой механике в её современном виде. В старых книгах ещё можно встретить такие выражения как *старая квантовая механика* и *новая квантовая механика*.

Первоначально старая квантовая механика «висела в воздухе», представляя собой набор *постулатов Бора*, которые предписывали правила, согласно которым из множества классических решений уравнений движения каким-то неведомым образом удавалось отбирать те решения, которые соответствовали разрешённым состояниям электронов в атоме.

После создания новой квантовой механики старая квантовая механика была выведена как предельный случай, отвечающий квазиклассическому приближению.

Нам редко удаётся точно решить уравнения Шрёдингера, поэтому большое значение имеют методы приближённого решения, к числу которых относится квазиклассика. Важно и то, что квазиклассика позволяет использовать классическую интуицию для квантовых систем. С учётом цели данного пособия (*понимание* квантовой механики) это особенно важно.

13.5.1 Как угадать и запомнить квазиклассическую волновую функцию

Рассмотрим одномерное стационарное уравнение Шрёдингера в предположении что на малых расстояниях справедливо приближение де Бройля, т.е. волновую функцию можно записать как

$$\psi(x) \approx C e^{\frac{i}{\hbar} p(x) x} \quad (13.19)$$

при изменении координаты x на несколько длин волн де Бройля. Это означает, что длина волны, записанная как функция от x мало меняется на расстоянии порядка длины волны

$$\left| \frac{\partial \lambda}{\partial x} \lambda \right| \ll |\lambda| \quad \Leftrightarrow \quad \left| \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right| \ll 1 \quad (13.20)$$

Здесь

$$\lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)}, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}.$$

Т.е. мы выражаем длину волны через классический импульс частицы.

В формуле (13.19) «константа» C зависит от x , поэтому удобнее переписать формулу в другом виде

$$\psi(x + \delta x) \approx \psi(x) e^{\frac{i}{\hbar} p(x) \delta x} \quad (13.21)$$

Таким образом, мы получаем

$$\begin{aligned} \psi(x_1) &\approx \psi(x_0) e^{\frac{i}{\hbar} p(x_0) \delta x} e^{\frac{i}{\hbar} p(x_0 + \delta x) \delta x} \dots e^{\frac{i}{\hbar} p(x_1 - \delta x) \delta x} \approx \\ &\approx \psi(x_0) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{\frac{x_1 - x_0}{\delta x}} p(x_0 + n\delta x) \delta x \right) \approx \\ &\approx \psi(x_0) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} p(x) dx \right) \end{aligned}$$

Таким образом, произведение px в показателе экспоненты волны де Бройля, в случае медленно меняющегося классического импульса $p(x)$ заменилось на интеграл $\int p(x) dx$.

$$\psi(x) \approx C \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right). \quad (13.22)$$

Полученная нами формула (13.22), как мы увидим далее, совпадает с первым квазиклассическим приближением.

Заметим, что волновая функция, описываемая формулой (13.22) предполагает, что $|\psi(x)|^2 = |C|^2 = \text{const}$. Насколько это хорошо?

Если классическая частица движется вдоль оси x , причём $E > U(x)$, то частица будет последовательно проходить все интервалы по x , находясь на каждом интервале dx на протяжении времени $\frac{dx}{v(x)} = m \frac{dx}{p(x)}$, где $v(x)$ — классическая скорость. (Т.е. в классическом случае отсутствует надбарьерное отражение.) Если мы ловим частицу на интервале dx не зная в какой именно момент частица стартовала, то вероятность того, что мы поймем частицу пропорциональна времени, которое частица проведет на данном отрезке. Таким образом, следует модифицировать волновую функцию так, чтобы выполнялось условие $|\psi(x)|^2 \sim \frac{1}{p(x)}$. Поэтому естественно предположить

$$\psi(x) \approx \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right). \quad (13.23)$$

Знак $\pm$ в показателе экспоненты соответствует движению частицы по x в положительном или отрицательном направлении. Как мы увидим далее, формула (13.22) совпадает со вторым квазиклассическим приближением.

Поскольку в квантовой механике частица может одновременно двигаться в обе стороны (находиться в суперпозиции состояний, отвечающих движению в разные стороны), последнюю формулу следует модифицировать:

$$\psi(x) \approx \frac{C_+}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right) + \frac{C_-}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right). \quad (13.24)$$

Таким образом, мы угадали формулу для второго квазиклассического приближения используя общезначимые соображения. Далее мы выведем ту же формулу (13.24) более строго, но и метод угадывания, не смотря на всю свою нестрогость может быть полезен, поскольку нестрогий вывод позволяет 1. понять физический смысл формул, 2. хорошо запомнить сами формулы.

Рассуждения с помощью которых мы угадали квазиклассические волновые функции применимы только в глубине классически разрешённой области $E > U(x)$, однако можно надеяться, что те же формулы будут справедливы для мнимых значений импульса $p(x)$, т.е. в глубине области $E < U(x)$.

13.5.2 Как вывести квазиклассическую волновую функцию

Выведем в одномерном случае то выражение, для квазиклассической волновой функции, которое мы угадали в предыдущем разделе. Для этого представим волновую функцию в экспоненциальном виде

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \quad (13.25)$$

и подставим её в стационарное уравнение Шрёдингера, записанное в координатном представлении.

$$\frac{1}{2m} ((S')^2 - i\hbar S'') = E - U(x), \quad (13.26)$$

или

$$S' = \sqrt{2m(E - U) + i\hbar S''} \quad (13.27)$$

Это пока точное уравнение Шрёдингера, просто переписанное для функции $S(x)$.

Мы знаем, что постоянная Планка мала в привычных нам макроскопических единицах измерения. Но на самом деле бессмысленно говорить о малости размерной величины, т.к. любая размерная величина может быть обращена в единицу выбором подходящих единиц измерения. «Малость» постоянной Планка *в привычных (макроскопических) единицах измерения* означает на самом деле малость по сравнению с привычными (макроскопическими) величинами той же размерности, т.е. по сравнению с характерными значения действия и момента импульса.

Запишем для функции $S(x)$ формальный степенной ряд по степеням постоянной Планка:

$$S = S_0 - i\hbar S_1 + (-i\hbar)^2 S_2 + \dots \quad (13.28)$$

Как правило этот ряд не сходится, но даёт хорошие приближения, если взять от него несколько первых членов.

Подставляя ряд (13.28) в уравнение (13.27) и удерживая соответствующие члены разложения получаем

$$S'_0(x) = \sqrt{2m(E - U(x))} = \pm p(x) \quad \Rightarrow \quad S_0(x) = \pm \int p(x) dx.$$

Здесь $p(x)$ — классическое выражение для импульса через координату x .

Аналогично для следующего члена разложения

$$(S_0 - i\hbar S_1)' = \sqrt{2m(E - U) + i\hbar S_0''} + o(\hbar) = \sqrt{p^2 + i\hbar p'} + o(\hbar) = p(x) + \frac{i\hbar p'(x)}{2p(x)}.$$

$$S'_1(x) = -\frac{p'(x)}{2p(x)} = -\left(\ln \sqrt{p(x)}\right)' \quad \Rightarrow \quad S_1(x) = \ln \left(\frac{C}{\sqrt{p(x)}} \right).$$

Подставляя первые два члена ряда в выражение (13.25) для волновой функции получаем выражение, которое совпадает с угаданным ранее (13.23)

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx}.$$

Чего же мы достигли, получив ранее угаданное выражение? Во-первых мы его действительно получили, а не угадали, при этом мы можем улучшить наше приближение, взяв следующие члены разложения $S(x)$ по степеням постоянной Планка. Мы можем определить область применимости полученного приближения, оценив следующий член разложения и уже более обоснованно получить ранее угаданную нами оценку (13.20)

$$\left| \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right| \ll 1.$$

Причём, если ранее полученные волновые функции и оценки их применимости были обоснованы для классически разрешённой области $E > U(x)$, $p(x) \in \mathbb{R}$, а

применимость тех же формул для классически запрещённой области $E < U(x)$ мы могли обосновывать только ссылаясь на аналогию и аналитическое продолжение, то теперь квазиклассическое приближение и критерий его применимости равно обоснованы в глубине классически запрещённых и разрешённых областей.

У границы классически разрешённой и запрещённой области, когда $p(x) \rightarrow 0$ длина волны де Бройля неограниченно возрастает и условие $|\lambda'(x)| \ll 1$ перестаёт выполняться. Области $E \sim U(x)$ ($p(x) \sim 0$) надо исследовать другими способами.

13.5.3 Квазиклассическая волновая функция у точки поворота

В классически разрешённой области квазиклассическая волновая функция представляется суперпозицией двух волн, бегущих слева направо и справа налево (13.24). Если данная энергия относится к невырожденному спектру (непрерывному или дискретному), т.е. если частица не может уйти по координате на одну из бесконечностей, то поток вероятности должен равняться нулю, а амплитуда обеих волн должна совпадать. В этом случае (даже вне зависимости от квазиклассического приближения) волновая функция может быть выбрана вещественной, т.е.

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(X) dX + \varphi_0 \right). \quad (13.29)$$

В случае, если классически разрешённая область ограничена бесконечновысокой стенкой в точке a мы имеем $\psi(a) = 0$ и мы можем записать

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(X) dX \right). \quad (13.30)$$

Если точка a является точкой поворота (для определённости — левой точкой поворота), где $U(a) = E$ (или $U(a-0) > E > U(a+0)$), то и в этом случае удобно выбрать a в качестве предела интегрирования и записать

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(X) dX + \varphi_0 \right). \quad (13.31)$$

Задача состоит в том, чтобы подобрать фазу φ_0 так, чтобы формула (13.31) правильно описывала квазиклассическую волновую функцию в глубине классически разрешённой области (вдали от точки поворота a).

Сравнивая волновые функции в ямах с бесконечновысокими стенками и со стенками конечной высоты мы можем заключить, что для левой точки поворота $\varphi_0 > 0$ (по крайней мере для этого случая). Т.е. если мы хотим заменить стенку конечной высоты, стоящую в точке a бесконечновысокой стенкой, то стенку придётся отодвинуть, чтобы к точке a волновая функция успела набрать фазу φ_0 , т.е. по сравнению с ямой с бесконечновысокой стенкой, яма с конечной стенкой «выглядит шире».

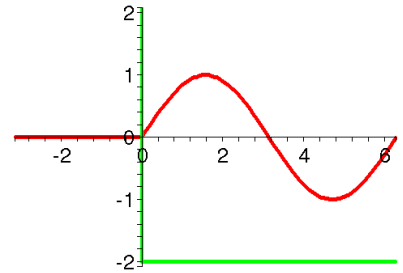


Рис. 13.3: Волновая функция у бесконечновысокой стенки

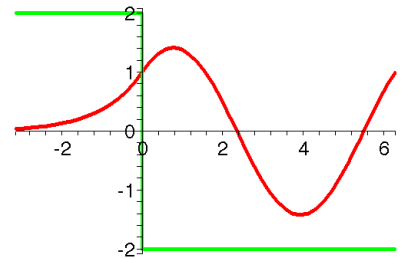


Рис. 13.4: Волновая функция у ступеньки.

Даже если в окрестности точки поворота квазиклассическое приближение не выполняется (например, $p(a) = 0$) нас, как правило, интересуют не детали поведения волновой функции в малой окрестности точки a , а её поведение на больших интервалах вдали от этой точки. Для этого достаточно знать фазу φ_0 .

В случае, если в окрестности точки поворота (там, где не работает квазиклассика) потенциал можно приблизить линейной функцией, фаза может быть вычислена (см. в следующий раздел)

$$\varphi_0 = \frac{\pi}{4},$$

т.е. яма оказывается эффективно шире на $\frac{1}{4}$ полуволны с одной стороны. Если яма с обеих сторон ограничена такими точками поворота, то в общей сложности яма оказывается эффективно шире на $\frac{1}{2}$ полуволны.

Фаза волновой функции у точки поворота*

Введённая выше (13.31) фаза φ_0 зависит не только от того, как потенциал ведёт себя в окрестности точки поворота a , но и от того, как потенциал себя ведёт левее: стоит ли где-то при конечном $x < a$ бесконечновысокая стенка, или где-то при $x < a$ есть другая классически разрешённая область, или классически запрещённая область тянется до $-\infty$.

Мы рассмотрим случай, когда вся полуось левее точки a является классически запрещённой областью, причём в окрестности точки поворота, там где не работает квазиклассика и немного там, где квазиклассика уже работает, потенциал меняется практически линейно.

Нам надо сплести квазиклассическую волновую функцию слева от точки поворота, которая имеет вид возрастающей вещественной экспоненты (в классически запрещённой области величина $p(x)$ — чисто мнимая)

$$\psi(x) = \frac{C_-}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p(X)| dX\right), \quad x \ll a \quad (13.32)$$

с квазиклассической волновой функцией справа от точки поворота

$$\psi(x) = \frac{C_+}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(X) dX + \varphi_0\right), \quad x \gg a. \quad (13.33)$$

и с точным решением уравнения Шрёдингера с линейным потенциалом в малой области вокруг точки поворота:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} F(x - a) = 0, \quad F = -U'(a), \quad x \sim a. \quad (13.34)$$

При этом нам надо установить коэффициент пропорциональности между C_+ и C_- (в силу линейности уравнения Шрёдингера они должны быть пропорциональны друг другу), а также фазу φ_0 .

Искомый ответ:

$$\varphi_0 = \frac{\pi}{4}, \quad C_+ = C_-.$$

Эта задача может быть решена различными способами:

- Решение уравнения (13.34) с помощью функции Эйри и сравнение асимптотик функции Эйри при «больших» (но всё равно в пределах линейности потенциала) аргументах с квазиклассическими волновыми функциями (13.32) и (13.33) (метод наиболее прямой и обоснованный).
- Продолжение волновой функции на комплексные значения x и получение двух комплексных экспонент (образующих $\sin$ в классически разрешённой области) при обходе точки $x = a$ по верхней и по нижней полуплоскости (метод Цваана).
- Вырезание проблемной области $x \sim a$ (замена её ступенькой, симметричной относительно точки поворота) и сшивка квазиклассических волновых функций (13.32) и (13.33) напрямую позволяет определить правильное значение φ_0 , но не даёт правильного отношения амплитуд $C_{\pm}$.

Мы воспользуемся третьим методом.

$|p(x)|$ в малой окрестности (где потенциал линеен) зависит только от $|x - a|$. При этом $|p(a - \delta)| = p(a + \delta) = p_0 \gg \frac{\hbar}{\delta}$. Как раз такая ситуация изображена на Рис.13.4.

$$\psi_{-}(x) \approx \frac{C_{-}}{2\sqrt{p_0}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} p_0(a - x)\right), \quad (13.35)$$

$$\psi_{+}(x) \approx \frac{C_{+}}{\sqrt{p_0}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} p_0(x - a) + \varphi_0\right). \quad (13.36)$$

Для определения фазы приравняем логарифмические производные функций $\psi_{\pm}$ в точке a :

$$\frac{\psi'_{-}(a)}{\psi_{-}(a)} = \frac{p_0}{\hbar} = \frac{\psi'_{+}(a)}{\psi_{+}(a)} = \frac{p_0}{\hbar} \operatorname{tg} \varphi_0 \quad \Rightarrow \quad \varphi_0 = \frac{\pi}{4}.$$

13.5.4 Квазиклассическое квантование

В квазиклассическом приближении волновые функции выписываются через функцию $p(x)$, описывающую соответствующую классическую траекторию (а также через мнимое продолжение функции $p(x)$ на классически запрещённую область). Мы знаем, как поведение потенциала на бесконечности позволяет выделить непрерывный спектр. Теперь мы хотим по классическому движению частицы определить дискретный спектр.

Пусть частица движется в потенциальной яме, причём классически разрешённая область представляет собой отрезок $[a, b]$.

Интеграл

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(X) dX$$

даёт приращение фазы между точками a и b . В случае бесконечновысоких стенок в точках a и b набег фазы должен быть кратен числу π (целое число полувольт). Если потенциал вблизи точек поворота близок к линейному, то, как мы определили ранее, ширина ямы с каждой стороны эффективно увеличивается на четверть полувольты и мы получаем

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(X) dX + \frac{\pi}{2} = n, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Повторим те же рассуждения более аккуратно выписывая промежуточные формулы. В классически разрешённой области мы можем записать волновую функцию двумя разными способами, которые должны быть согласованы:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{C_a}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(X) dX + \frac{\pi}{4} \right) = \\ &= \frac{C_b}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(X) dX - \frac{\pi}{4} \right) = \\ &= \frac{C_a}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(X) dX + \frac{1}{\hbar} \int_b^x p(X) dX + \frac{\pi}{4} \right)\end{aligned}\quad (13.37)$$

Согласованность возможна при

$$C_a = \pm C_b,$$

если разность аргументов синуса составляет целое число полупериодов:

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(X) dX + \frac{\pi}{2} = \pi(n+1), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

На фазовой плоскости (x, p) интеграл от a до b представляет собой интеграл по полупериоду — половину площади траектории, ограниченной кривой $(x(t), p(t))$. Пройдя из a в b частице, чтобы замкнуть период, надо ещё вернуться обратно, при этом импульс будет принимать те же значения с противоположным знаком $-p(x)$. Поэтому правило квантовая обычно пишут через интеграл по периоду

$$\oint p(X) dX = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (13.38)$$

Это правило называют *правилом (квазиклассического) квантования Бора-Зоммерфельда*. Исторически оно предшествовало созданию последовательной квантовой теории и было одним из основных положений так называемой *старой квантовой механики*.

Мы можем обобщить правило Бора-Зоммерфельда, записав

$$\oint p(X) dX = \hbar(2\pi n + 2[\pi - \varphi_a - \varphi_b]), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (13.39)$$

Здесь φ_a и φ_b — фазы волновой функции вблизи точек поворота (φ_0 в уравнении (13.31)).

13.5.5 Спектральная плотность квазиклассического спектра

Оценим интервал между соседними уровнями энергии при условии применимости правила квазиклассического квантования Бора-Зоммерфельда.

С учётом параллельности $d\mathbf{x}$ и $\mathbf{p}$ вдоль траектории запишем правило Бора-Зоммерфельда

$$J[E, \mathbf{x}(l)] = \oint_{\Gamma} \mathbf{p} d\mathbf{x} = \oint_{\Gamma} |\mathbf{p}| \cdot \underbrace{|d\mathbf{x}|}_{dl} = \oint_{\Gamma} \underbrace{\sqrt{2m(E - U(\mathbf{x}))}}_{|\mathbf{p}|} dl = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

здесь $J[E, \mathbf{x}(l)]$ — адиабатический инвариант, как функция энергии и траектории в конфигурационном пространстве.

Проварьируем это равенство

$$\delta J[E, \mathbf{x}(l)] = \frac{\delta J}{\delta E} \delta E + \underbrace{\oint_{\Gamma} \frac{\delta J}{\delta \mathbf{x}(l)} \delta \mathbf{x}(l) dl}_{=0 \text{ на классич. } \mathbf{x}(l)} = 2\pi\hbar\delta n.$$

Вариация по траектории для решений классических уравнений движения даёт нуль. Остаётся

$$\delta J[E, \mathbf{x}(l)] = \frac{\delta J}{\delta E} \delta E = \delta E \oint_{\Gamma} \frac{\partial}{\partial E} \sqrt{2m(E - U(\mathbf{x}))} dl = \delta E \oint_{\Gamma} \underbrace{\frac{m}{\sqrt{2m(E - U(\mathbf{x}))}}}_{\frac{m}{|\mathbf{p}|} = \frac{1}{v}} dl.$$

Здесь $v = \frac{|\mathbf{p}|}{m} = \frac{dl}{dt}$ — скорость.

$$\delta J[E, \mathbf{x}(l)] = \delta E \oint_{\Gamma} \frac{dl}{v} = \delta E \oint_{\Gamma} dt = \delta E \cdot T = 2\pi\hbar\delta n.$$

$T = \frac{2\pi}{\omega}$ — период классического движения по траектории Γ .

Пусть $\delta n = 1$, что соответствует изменению номера уровня на один, тогда δE — расстояние между уровнями:

$$\delta E \cdot T = \delta E \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi\hbar \quad \Leftrightarrow \quad \delta E = \hbar\omega.$$

Спектральная плотность — число уровней на единичный интервал энергии — величина обратная к δE :

$$\rho(E) = \frac{1}{\delta E} = \frac{1}{\hbar\omega}.$$

δE соответствует также энергии фотона, который должна излучить частица, чтобы перейти на уровень ниже, а ω — частота этого фотона, которая оказывается равна частоте обращения частицы. Это равенство частоты обращения частицы и частоты излучаемой электромагнитной волны естественно в классической электродинамике, но в квантовой механике частота фотона связана исключительно с его энергией. В квазиклассическом пределе эти частоты совпали, т.е. предсказания квантовой механике переходят в предсказания классической теории, как и должно быть согласно *принципу соответствия*.

13.5.6 Квазистационарные состояния в квазиклассике

Применяя правило квантования Бора-Зоммерфельда (13.38) или (13.39) мы можем получить «лишние» состояния дискретного спектра, которых с точки зрения квантовой механики быть не должно. Это состояния, соответствуют классическому периодическому движению с энергией, для которой возможно также убежание частицы на бесконечность (см. Рис.13.5).

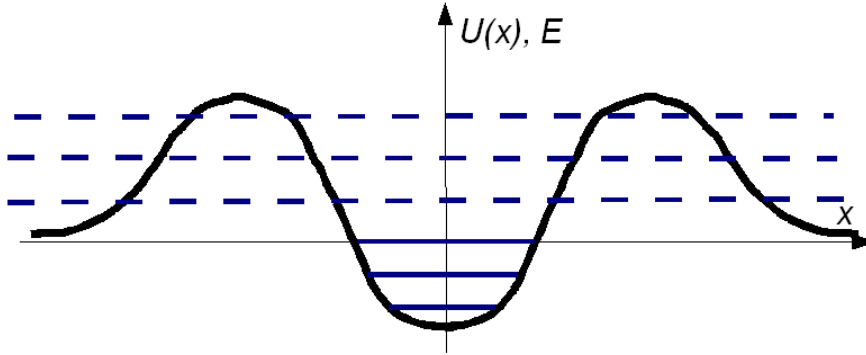


Рис. 13.5: Стационарные (сплошные) и квазистационарные (пунктирные) уровни.

Эти «лишние» уровни — *квазистационарные состояния*. В соответствии с классической теорией помещённая в квазистационарное состояние система может на протяжении длительного времени оставаться в этом состоянии, однако на больших временах проявляются квантовые свойства, и система может протуннелировать через потенциальный барьер и уйти на бесконечность.

Время жизни квазистационарного состояния мы можем оценить зная вероятность туннелирования (D , мы оцениваем её в разделе 13.5.7 «Квазиклассическая вероятность туннелирования») и классический период колебаний системы (T). Если частица может убежать через обе стенки с вероятностями $D_1 \ll 1$ и $D_2 \ll 1$, то за период T вероятность убегания составляет $D = D_1 + D_2$. Таким образом, вероятность убегания в единицу времени (обратная в времени жизни состояния τ_0)

$$\frac{1}{\tau_0} = \frac{D}{T} \Rightarrow \tau_0 = \frac{T}{D} \gg T.$$

Благодаря соотношению неопределённости (7.9), квазистационарный уровень имеет ширину (7.13)

$$\delta E_0 = \frac{\hbar}{2\tau_0}.$$

Зависимость от времени квазистационарного состояния включает, помимо обычной комплексной экспоненты, ещё и вещественную экспоненту, обеспечивающую экспоненциальное затухание (распад) уровня с характерным временем τ :³

$$\psi(t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} e^{-\frac{t}{2\tau_0}} = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} (E_0 - i \frac{\hbar}{2\tau_0}) t}.$$

Мы видим, что для временной эволюции квазистационарного состояния энергия получает мнимую добавку:

$$E = E_0 - i \frac{\hbar}{2\tau_0} = E_0 - i \delta E_0.$$

Встречающиеся в физике квазистационарные состояния могут иметь времена жизни от исчезающе малых, до очень больших (превышающих возраст Вселенной). Все нестабильные частицы и радиоактивные ядра следует рассматривать как квазистационарные состояния. Современные физики не уверены даже в протоне: является ли протон стационарным или только квазистационарным состоянием с

³При вычислении вероятности амплитуда возводится в квадрат, так что показатели экспоненты для амплитуды и для вероятности отличаются в два раза.

большим временем жизни. Таким образом, нахождение квазистационарных состояний (хотя эта задача труднее формализуется математически) может быть не менее важно, чем нахождение настоящих стационарных состояний. При распаде квазистационарных состояний продукты распада обычно вылетают с энергиями недостаточными для преодоления потенциального барьера, т.е. они вылетают благодаря туннельному эффекту.

Правило Бора-Зоммерфельда также требует поправок, если потенциальная яма разделена барьером, через который частица может туннелировать туда-сюда. Ниже такая ситуация упоминается в разделе 13.5.8 «Несколько слов об инстантонах**».

13.5.7 Квазиклассическая вероятность туннелирования

Рассмотрим в квазиклассическом приближении одномерную задачу рассеяния. Прежде всего отметим, что в классически разрешённой области квазиклассическая волновая функция ($S(x)$ с точностью до второго члена по $\hbar$) (13.23)

$$\psi(x) \approx \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right)$$

описывает частицу, которая по всей оси движется в одну сторону с постоянной плотностью потока вероятности.

Таким образом, надбарьерное отражение ($E > U(x)$) квазиклассическим приближением ($S(x)$ с точностью до второго члена по $\hbar$) не описывается.

Если высота потенциального барьера больше E , то мы можем воспользоваться квазиклассическим приближением.

Мы рассмотрим случай широкого потенциального барьера, с точками входа и выхода a и b ($E = U(a) = U(b)$). При этом естественный масштаб ширины барьера — длина затухания волновой функции внутри него:

$$l(x) = \frac{\hbar}{|p(x)|}.$$

Поскольку масштаб $l(x)$ внутри барьера, как правило, переменный, критерий ширины записывается через набегающую внутри барьера фазу (мнимую) волновой функции:

$$L = \int_a^b \underbrace{\frac{dX}{l(X)}}_{\text{мера } dX} = \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(X)| dX \gg 1.$$

L — интервал от a до b измеренный линейкой переменной длины $l(x)$ (в длинах затухания).

Для широкого барьера мы имеем коэффициент отражения близкий к 1, т.е. суперпозиция падающей и отражённой волн приблизительно задаётся через $\sin$, как у границы потенциальной ямы (13.33). При этом внутри барьера, как и ранее при рассмотрении потенциальной ямы, преобладает затухающая экспонента.

Величина экспоненты внутри барьера снижается в e^{-L} раз. Поскольку эта величина связана с амплитудой вероятности, то соответствующий вклад в коэффициент прохождения составляет

$$D_0 = e^{-2L}.$$

Однако мы пока не учли вклад в коэффициент прохождения предэкспоненциального множителя $\frac{1}{\sqrt{p(x)}}$ и условий сшивки в точках входа и выхода.

Как мы уже обсуждали ранее (13.5.1 «Как угадать и запомнить квазиклассическую волновую функцию») предэкспоненциальный множитель учитывает переменную скорость частицы, летящей в переменном потенциале, тогда как экспонента задаёт поток частиц. Таким образом, изменение предэкспоненциального множителя не даёт вклада в поток и коэффициент прохождения.

Условия сшивки волновой функции в точках входа и выхода могут дать дополнительные множители порядка 1:

$$D = D_0 \cdot D_a \cdot D_b, \quad D_a, D_b \sim 1.$$

Если точки входа и выхода «устроены одинаково», и в окрестностях обоих потенциал может быть приближен линейной функцией, то, в силу симметрии входа в барьер и выхода из него,

$$D_b = \frac{1}{D_a}.$$

В этом случае

$$D = D_0 = e^{-2L} = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(X)| dX \right). \quad (13.40)$$

Заметим, что формулу (13.40) мы не столько вывели, сколько угадали. Строгий вывод требует более аккуратного рассмотрения условий сшивки в точках входа и выхода, и в частности доказательства возможности пренебречь внутри барьера возрастающим членом волновой функции.

13.5.8 Несколько слов об инстантонах**

Внимательно рассмотрим показатель экспоненты в формуле для квазиклассического коэффициента прохождения через барьер:

$$\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx = -i \frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(E - U(x))} dx = \frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(-E + U(x))} dx.$$

Последнее выражение может быть переписано как $\frac{1}{\hbar}$ умножить на действие по периоду для для колебания между точками a и b с зависимостью импульса от координаты $p_-(x) = \pm \sqrt{2m(-E + U(x))}$:

$$\frac{1}{\hbar} \oint p_-(x) dx = 2 \frac{1}{\hbar} \int_a^b p_-(x) dx.$$

Такая зависимость $p_-(x)$ может быть получена из обычной изменением знака энергии:

$$E \rightarrow -E, \quad U(x) \rightarrow -U(x).$$

Мнимое действие (интеграл от мнимого импульса) можно также описать как движение с мнимой скоростью. А поскольку перемещение между точками a и b вещественно, такая скорость соответствует мнимому изменению времени.

Если вспомнить, что амплитуда вероятности, соответствующая движению с действием S задаётся как (3.17)

$$e^{\frac{i}{\hbar}S},$$

то мы получаем возможность рассматривать туннелирование через барьер не суммируя обычные (классически запрещённые) траектории (вклад которых практически компенсируется, в результате чего формула сходится очень медленно), а беря одну классически разрешённую траекторию с мнимым временем движения:

$$D = \left| e^{\frac{i}{\hbar}S} \right|^2, \quad S = \frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(E - U(x))} dx.$$

Движение через потенциальный барьер с мнимым временем называют *инстантонным движением*.

Если мы имеем потенциальную яму, разделённую барьером на две половины, то туннелирование через барьер приводит в тому, что система, помещённая в одну половину ямы начинает колебаться, поочерёдно туннелируя туда-сюда. Такое состояние называют *инстантоном*.

Инстантоны возникают в различных задачах теории конденсированного состояния и квантовой теории поля, они, в частности, могут возникать при спонтанном нарушении симметрии как колебания вакуумного поля.

13.6 Сохранение вероятности и уравнение непрерывности

Как мы уже писали ранее (5.1.1 «Унитарная эволюция и сохранение вероятности») сохранение полной вероятности является одним из фундаментальных принципов квантовой теории. При этом сохранение полной вероятности (вместе с линейностью и обратимостью) приводит к унитарности эволюции замкнутой системы.

Однако полная вероятность может быть записана как интеграл от плотности вероятности в конфигурационном пространстве. В силу непрерывности уравнений квантовой механики представляется интересным переписать условие сохранения вероятности в дифференциальной форме, как уравнение непрерывности для плотности вероятности.

Таким образом, мы имеем вектор состояния, заданный, как волновая функция $\psi(Q)$ на конфигурационном пространстве. Здесь Q — совокупность обобщённых координат Q^n (координат в конфигурационном пространстве).

Мы знаем, что

$$\varrho(Q) = |\psi(Q)|^2, \quad \int \varrho(Q) dQ = 1 = \text{const}$$

— плотность вероятности в конфигурационном пространстве.

Уравнение непрерывности должно иметь вид

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0. \quad (13.41)$$

Где $\text{div } \mathbf{j} = \sum_n \frac{\partial j_n}{\partial Q^n}$ — дивергенция в конфигурационном пространстве от вещественного векторного поля $\mathbf{j}$, которое задаёт *плотность потока вероятности*.

Стоящая перед нами задача — выразить $\mathbf{j}$ через ψ и показать, что найденное выражение удовлетворяет уравнению непрерывности (13.41).

13.6.1 Как угадать и запомнить плотность потока вероятности

Прежде чем приступить к строгим выкладкам угадаем ответ.
Для классического распределения частиц

$$\mathbf{j}(Q) = \varrho(Q) \mathbf{v}(Q),$$

где $\mathbf{v}(Q)$ — скорость частиц в данной точке.

Для волны де Бройля

$$\hat{p}\psi = p\psi = m\mathbf{v}\psi.$$

Эта же формула приближённо справедлива для квазиклассической волновой функции, но теперь $\mathbf{v}$ уже является функцией от координат:

$$\hat{p}\psi(Q) \approx m\mathbf{v}(Q)\psi(Q)$$

Умножая полученную формулу на $\psi^*(Q)$ получаем

$$\psi^*(Q)\hat{p}\psi(Q) \approx m\mathbf{v}\psi(Q)\psi^*(Q) = m\mathbf{v}\rho(Q)$$

Таким образом, для волн де Бройля мы можем написать

$$\mathbf{j}(Q) = \rho(Q) \mathbf{v}(Q) = \frac{1}{m} \psi^*(Q) \hat{p}\psi(Q).$$

Эта же формула должна быть по крайней мере приближённо справедлива для квазиклассических волновых функций, но выражение $\psi^*(Q)\hat{p}\psi(Q)$ в общем случае является комплексным. Поэтому возьмём от получившегося выражения вещественную часть. Новая гипотеза такова:

$$\mathbf{j}(Q) = \frac{1}{m} \operatorname{Re} \psi^*(Q) \hat{p}\psi(Q) = \frac{1}{2m} (\psi^*(Q) \hat{p}\psi(Q) + \psi(Q) (\hat{p}\psi(Q))^*).$$

Как мы убедимся далее, это и есть искомая формула для гамильтониана вида $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(Q)$. В учебниках по квантовой механике, с учётом $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, её обычно записывают в следующем виде:

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (-\psi^*\nabla\psi + \psi\nabla\psi^*). \quad (13.42)$$

Если параметризовать волновую функцию через плотность вероятности $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ и фазу $\varphi(x) = \arg \psi(x)$, то

$$\psi(x) = \sqrt{\rho(x)} e^{i\varphi(x)} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{j} = \rho(x) \underbrace{\frac{\hbar}{m} \nabla \varphi(x)}_{\text{скорость}}, \quad (13.43)$$

это соответствует тому, что плотность потока вероятности оказывается равна плотности вероятности $\rho(x)$, умноженной на скорость $\frac{\hbar}{m} \nabla \varphi(x)$, которая выражается через *градиент фазы* $\nabla \varphi(x)$. Это позволяет придать физический смысл фазе волновой функции, записанной в координатном представлении.

13.6.2 Многочастичный случай

Рассмотрим гамильтониан следующего вида:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(M^{-1})^{nk}\hat{p}_n\hat{p}_k + U(Q) = -\frac{\hbar^2}{2}(M^{-1})^{nk}\nabla_n\nabla_k + U(Q). \quad (13.44)$$

Здесь мы ввели симметричную матрицу обратной массы $(M^{-1})^{nk}$. По повторяющимся индексам n и k подразумевается суммирование⁴.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} = \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} = \psi\left(\frac{\hat{H}\psi}{i\hbar}\right)^* + \psi^*\left(\frac{\hat{H}\psi}{i\hbar}\right) = \\ &= \psi\frac{1}{-i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2}(M^{-1})^{nk}\nabla_n\nabla_k + U(Q)\right)\psi^* + \\ &\quad + \psi^*\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2}(M^{-1})^{nk}\nabla_n\nabla_k + U(Q)\right)\psi = \\ &= \psi\frac{1}{-i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2}(M^{-1})^{nk}\nabla_n\nabla_k\right)\psi^* + \psi^*\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2}(M^{-1})^{nk}\nabla_n\nabla_k\right)\psi = \\ &= -\frac{i\hbar}{2}(M^{-1})^{nk}(\psi\nabla_n\nabla_k\psi^* - \psi^*\nabla_n\nabla_k\psi) = \\ &= -\nabla_n\left[\frac{i\hbar}{2}(M^{-1})^{nk}(\psi\nabla_k\psi^* - \psi^*\nabla_k\psi)\right] = -\nabla_n j^n. \end{aligned}$$

Таким образом, (13.41) выполняется для плотности потока вероятности, компоненты которой задаются так:

$$j^n = \frac{i\hbar}{2}(M^{-1})^{nk}(\psi\nabla_k\psi^* - \psi^*\nabla_k\psi) = \frac{1}{2}(M^{-1})^{nk}(\psi(\hat{p}_k\psi)^* + \psi^*\hat{p}_k\psi). \quad (13.45)$$

Если ввести оператор скорости как $\hat{v}^n = \frac{d\hat{Q}^n}{dt} = (M^{-1})^{nk}\hat{p}_k$, то выражение упрощается, причём как и раньше, оно может быть записано через плотность вероятности $\rho = |\psi|^2$ и фазу $\varphi = \arg \psi$:

$$j^n = \frac{1}{2}(\psi(\hat{v}^n\psi)^* + \psi^*\hat{v}^n\psi) = \text{Re}(\psi^*\hat{v}^n\psi) = \rho \underbrace{(i\hat{v}^n\varphi)}_{\text{скорость}}. \quad (13.46)$$

13.6.3 Поток вероятности в присутствии электромагнитного поля*

В присутствии электромагнитного поля в гамильтониане появляются скалярные и векторные потенциалы, относящиеся к тем точкам, в которых находятся заряженные частицы. Эти потенциалы выступают как фиксированные функции, если мы рассматриваем внешние поля, либо как операторы, если мы рассматриваем квантованные поля.

⁴Сделаем специальное замечание для тех, кто хорошо знаком с тензорами. Матрица $(M^{-1})^{nk}$ и обратная к ней матрица M_{nk} выступают в роли обратной и прямой метрики. Компоненты импульса $\hat{p}_n$ — компоненты ковектора, компоненты скорости $\hat{v}^k = \hat{p}_n(M^{-1})^{nk}$ — компоненты вектора, получающегося из импульса поднятием индекса с помощью обратной метрики $(M^{-1})^{nk}$. Кинетическая энергия $\hat{T} = \frac{1}{2}(M^{-1})^{nk}\hat{p}_n\hat{p}_k = \frac{1}{2}M_{nk}\hat{v}^n\hat{v}^k$ — половина скалярного квадрата от вектора $\hat{\mathbf{v}}$, или ковектора $\hat{\mathbf{p}}$.

Скалярный потенциал к потенциальной энергии частицы с номером a даёт добавку $e_a\varphi(\mathbf{r}_a)$. Векторный потенциал изменяет выражение для кинетической энергии, заменяя импульс на более сложное выражение $\hat{\mathbf{p}}_a \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_a - \frac{e_a}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_a)$.

$$\hat{H} = \sum_a \frac{1}{2m_a} \left(\hat{\mathbf{p}}_a - \frac{e_a}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \right)^2 + U(Q) + \sum_a e_a\varphi(\mathbf{r}_a). \quad (13.47)$$

Тем не менее, мы можем использовать для плотности потока вероятности прежнее выражение (13.46), если переопределим оператор скорости

$$\hat{\mathbf{v}}_a = \frac{d\hat{\mathbf{r}}_a}{dt} = \frac{1}{m_a} \left(\hat{\mathbf{p}}_a - \frac{e_a}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \right).$$

Такое переопределение соответствует связи между импульсом и скоростью в классическом случае.

Мы можем рассматривать модификацию гамильтониана в присутствии векторного потенциала как *удлинение производной*.

$$\hat{\mathbf{p}}_a \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_a - \frac{e_a}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_a), \quad \nabla_a \rightarrow \nabla_a^{\mathbf{A}} = \nabla_a - \frac{ie_a}{c\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{r}_a),$$

Удлинённая производная называется также *ковариантной производной*. Аналогичная модификация производной применяется в теориях калибровочных полей.

13.6.4 Почему координатное представление?*

Почему при выводе уравнения непрерывности для вероятности мы ограничились координатным представлением?

Во-первых, для того, чтобы писать уравнение непрерывности, надо, чтобы спектр наблюдаемых, которые выбраны как аргументы волновой функции, был непрерывным.

Во-вторых, необходимо, чтобы под действием гамильтониана выбранные переменные менялись непрерывно со временем. Для рассмотренных выше гамильтонианов это обеспечивается диагональностью потенциальной энергии, которая уходит из уравнения непрерывности вне зависимости от своего конкретного вида, и конкретным видом кинетической энергии.

Если, например, рассматривать импульсное представление, то при выводе кинетическая энергия сократится, но станет существенной конкретная форма потенциала $U(\hat{Q})$. В случае общего положения потенциал в импульсном представлении действует на волновую функцию свёрткой

$$U(\hat{Q})\psi(p) = \int \tilde{U}(p-p')\psi(p')dp'.$$

В общем случае эта операция нелокальна, и мы вообще не можем записать стандартное (с локальной плотностью потока) уравнение непрерывности в импульсном пространстве.

Тем не менее, если потенциал хорошо разлагается в ряд Тейлора (радиус сходимости покрывает область допустимых импульсов), то он оказывается дифференциальным оператором

$$U\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right) = \sum_{n=0}^N \frac{\partial^n U}{\partial Q^n} \Big|_{Q=0} \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n.$$

В этом случае мы можем записать уравнение непрерывности в импульсном пространстве, но плотность потока вероятности зависит от вида потенциала и содержит производные от волновой функции вплоть до порядка $N - 1$. При $N = \infty$ выражение для плотности потока вероятности может оказаться нелокальным (невыразимым через переменные в данной точке импульсного пространства).

13.7 От матрицы плотности к плотности вероятности**

Смешанное состояние системы в классической теории описывается распределением вероятности в $2N$ -мерном фазовом пространстве $\varrho(q, p)$, а в квантовой теории — матрицей плотности $\hat{\rho}$. Однако запись матрицы плотности в виде функции

$$\rho(q_1, q_2) = \langle q_1 | \hat{\rho} | q_2 \rangle, \quad \rho(p_1, p_2) = \langle p_1 | \hat{\rho} | p_2 \rangle$$

мало похожа на функцию распределения, т.к. оба аргумента оказываются одного сорта, а кроме того, функция оказывается, как правило, комплексной.

Квантовый аналог распределения вероятностей называют *функция Вигнера* и определяется с помощью преобразования Фурье координатного представления матрицы плотности по разности аргументов:

$$W(q, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int \rho(q - x/2, q + x/2) e^{\frac{i}{\hbar} p x} d^N x. \quad (13.48)$$

Функция Вигнера во многом похожа на классическую функцию распределения. Она вещественна, это легко видеть, т.к. при комплексном сопряжении x в подынтегральном выражении меняет знак. Интегрирование функции Вигнера по одному из наборов аргументов позволяет получить распределение вероятности по другому набору аргументов (проверьте!):

$$\rho(q, q) = \int W(p, q) d^N p, \quad \rho(p, p) = \int W(p, q) d^N q.$$

Однако функция Вигнера не может рассматриваться как совместное распределение вероятностей по координатам и импульсам, потому, что для некоторых состояний она может принимать отрицательные значения.



Рис. 13.6: Юджин Вигнер (1902–1995)

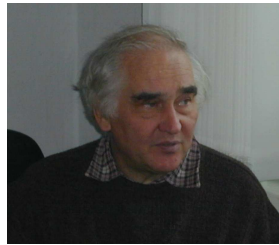


Рис. 13.7: Владимир Иванович Манько

При переходе от квантовой механики к классической распределение вероятностей $\varrho(q, p)$ получается из сглаженной функции Вигнера, при этом сглаживание должно размывать функцию Вигнера примерно на соотношение неопределённостей, т.е. усреднять надо по фазовому объёму порядка $(2\pi\hbar)^N$.

Функцию Вигнера можно записать как среднее от зависящего от параметров q, p эрмитового оператора $\hat{A}(q, p)$:

$$\hat{A}(q, p) = \int |q + x/2\rangle e^{\frac{i}{\hbar} p x} \langle q - x/2| d^N x.$$

$$\hat{q}_\alpha |q\rangle = q_\alpha |q\rangle, \quad \langle q|q'\rangle = \delta^N(q - q')$$

$$W(q, p) = \langle \hat{A}(q, p) \rangle_\rho = \text{tr}(\hat{A}(q, p) \hat{\rho}). \quad (13.49)$$

Интегрируя функцию Вигнера по разным направлениям в фазовом пространстве можно получить распределения вероятностей по всевозможным переменным q или p , таким, что они получаются из переменных q, p на произвольном линейном каноническим преобразованием.

$$w(X, \mu, \nu) = \int W(q, p) d^N(\mu q + \nu p), \quad (13.50)$$

здесь μ и ν — матрицы $N \times N$, такие, что $\text{rank}(\mu, \nu) = N$. Компоненты $\hat{X}$ и $\hat{p}' = \mu\hat{q} + \nu\hat{p}$ связаны каноническими коммутационными соотношениями:

$$[\hat{X}_\alpha, \hat{p}'_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N.$$

Переход (13.50) от функции Вигнера $W(q, p)$ к функции $w(X, \mu, \nu)$ называется *преобразованием Радона*, а сама функция $w(X, \mu, \nu)$ — *квантовой томограммой*.

Преобразование Радона обратимо, так что по томограмме можно восстановить функцию Вигнера и матрицу плотности, т.е. томограмма — другое представление смешанного состояния квантовой системы. Томограмма имеет хороший физический смысл: она задаёт распределения вероятностей для всевозможных линейных комбинаций координат и импульсов.

Формулировка квантовой механики в терминах квантовой томографии разрабатывается в настоящее время группой В.И. Манько в МФТИ и ФИАНе.

Глава 14

Симметрии-2* (группы и представления)

В главе 11 «Симметрии-1» мы уже обсуждали роль симметрий в квантовой механике. Здесь мы изучим симметрии более глубоко, введя для этого более изощрённый математический аппарат. Можно сказать, что ранее мы изучали эффект какой-то одной симметрии (*однопараметрической группы симметрий*), а теперь, мы рассматриваем случай, когда симметрий много (есть нетривиальная *группа симметрий*).

При первом чтении большую часть этой главы можно пропустить. При последующих прочтениях этот раздел призван дать более последовательный математический взгляд на симметрии в квантовой теории, в частности, на повороты и моменты импульса в трёхмерном пространстве.

14.1 Группы и их представления (л)

Как уже отмечалось ранее (11 «Симметрии-1»), симметрия системы в квантовой механике задаётся набором унитарных преобразований, коммутирующих с гамильтонианом системы. При этом между собой эти преобразования могут и не коммутировать.

Преобразования симметрий мы можем рассматривать с двух точек зрения:

- Как симметрии комбинируются между собой? Что получится если последовательно выполнить преобразования симметрии $\hat{U}_1$ и $\hat{U}_2$: $\hat{U}_2\hat{U}_1 = ?$
- Как симметрии действуют на интересующие нас объекты? В квантовой механике нас интересует, как операторы симметрии $\hat{U}$ действуют на векторы состояния ψ : $\hat{U}\psi = ?$

Первая точка зрения — *теория групп*. Ей посвящён раздел 14.2 «Группы (л)».

Вторая точка зрения — *теория представлений групп* (или просто: *теория представлений*). Ей посвящён раздел 14.4 «Представления групп (л)».

14.2 Группы (л)

14.2.1 Определение и смысл (л)

Группа G — множество, на котором задана следующая структура:

- Единичный элемент (единица) $E \in G$,
- Операция умножения $\circ : G \times G \rightarrow G$, т.е. $g_2 \circ g_1 = g_3$, где $g_1, g_2, g_3 \in G$. Умножение $\forall g, g_1, g_2, g_3 \in G$ удовлетворяет условиям:

$$E \circ g = g \circ E = g, \quad (g_3 \circ g_2) \circ g_1 = g_3 \circ (g_2 \circ g_1).$$

- Операция взятия обратного элемента $(\cdot)^{-1} : G \rightarrow G$, т.е. $\forall g \in G$ определено $g^{-1} \in G$. Операция взятия обратного элемента удовлетворяет условию

$$g^{-1} \circ g = g \circ g^{-1} = E.$$

(Фл) Сразу опишем физический смысл этих понятий. Группа — набор преобразований, удовлетворяющий следующим условиям:

- В группу входит единичный элемент — тождественное преобразование.
- Если выполнить последовательно преобразования g_1 и g_2 , то получится преобразование g_3 , также принадлежащее группе. g_3 задаётся как произведение преобразований g_1 и g_2 в обратном порядке (!!!): $g_3 = g_2 \circ g_1$. Следующие свойства для преобразований выполняются автоматически:

$$E \circ g = g \circ E = g, \quad (g_3 \circ g_2) \circ g_1 = g_3 \circ (g_2 \circ g_1).$$

- Операция взятия обратного элемента — замена преобразования g на обратное g^{-1} . Т.е. все преобразования, входящие в группу, должны быть обратимы, причём для всякого преобразования $g \in G$, обратное преобразование также входит в группу $g^{-1} \in G$. Автоматически выполняется свойство

$$g^{-1} \circ g = g \circ g^{-1} = E.$$

Почему мы положили, что умножение преобразований соответствует их выполнению в обратном порядке? Потому, что при действии оператора на состояние мы пишем оператор слева от состояния: $\hat{A}\psi$. Если на результат подействовать ещё одним оператором, то получится $\hat{B}\hat{A}\psi$ и мы получили слева от ψ комбинацию $\hat{B}\hat{A}$ в которой операторы написаны в обратном порядке, по сравнению с тем порядком, в котором они действуют. Естественно считать, что и групповое умножение преобразований выполняется в том же порядке. Это позволяет опускать значок « $\circ$ », обозначающий групповое умножение.

Может показаться, что группа, определённая как набор преобразований — частный случай группы вообще, однако это не так. Любая группа может быть представлена, как группа преобразований самой себя: элемент группы g преобразует группу с помощью умножения слева (*левых сдвигов*) $g : G \rightarrow G$

$$g : h \mapsto g \circ h, \quad \forall g, h \in G. \quad (14.1)$$

В теории групп естественно рассматривать отображение $f : G \rightarrow H$ группы G на группу H , при котором сохраняется групповая структура, т.е.

$$f(E_G) = E_H, \quad \forall g_1, g_2 \in G \quad f(g_1) \circ f(g_2) = f(g_1 \circ g_2), \quad f(g_1^{-1}) = f(g_1)^{-1}. \quad (14.2)$$

Такое отображение называется *гомоморфизм* (*гомоморфное отображение*).

Иногда, реальная группа симметрий оказывается не той группой, которую мы (ф) ожидали с самого начала, а её гомоморфным отображением. Например, если у нас есть симметрия, относительно группы поворотов, а рассматриваемые состояния тождественно переходят в себя при любом повороте, то симметрия таких состояний описывается не группой поворотов, а группой из одного тождественного преобразования.

Если гомоморфное отображение является ещё и взаимнооднозначным, то оно называется *изоморфизмом*, а группы G и H считаются одинаковыми (*изоморфными*). Изоморфизм обозначается так: $G \simeq H$.

Одинаковые (*изоморфные*) группы могут быть по-разному *представлены* как группы преобразований. В *теории групп* изучаются свойства не зависящие от изоморфного *представления* группы, как группы преобразований. Таким образом, с точки зрения теории групп, группа преобразований по сравнению с абстрактной группой наделена «лишней» структурой, которая задаёт действие элементов группы как преобразований некоторого пространства. Различные представления группы как группы преобразований изучаются *теорией представлений*.

14.2.2 Коммутативность и некоммутативность (л)

Коммутативными (*абелевыми*) называются группы, для которых результат умножения не зависит от порядка множителей:

$$\forall g_1, g_2 \in G \quad g_1 \circ g_2 = g_2 \circ g_1.$$

Для абелевых групп групповую операцию могут называть не умножением, а *сложением*, а единичный элемент не единицей, а *нулём*.

Для того, чтобы определить насколько данные элементы группы коммутируют или не коммутируют друг с другом вводят такой объект, как *групповой коммутатор*

$$g_1 \circ g_2 \circ g_1^{-1} \circ g_2^{-1}.$$

Если данные элементы группы коммутируют, то групповой коммутатор равен единичному элементу E . Для абстрактной группы мы не можем определить матричный коммутатор $[g_1, g_2] = g_1 g_2 - g_2 g_1$, т.к. для элементов группы не определено вычитание.

(ф) Для квантовой механики коммутативная группа симметрии наиболее проста: гамильтониан коммутирует одновременно со всеми преобразованиями группы, а преобразования коммутируют между собой. Таким образом, все групповые преобразования и гамильтониан можно диагонализировать одновременно.

14.2.3 Подгруппы (л)

Подгруппой H группы G называется её подмножество, замкнутое относительно групповых операций группы G , т.е.

$$\forall g, h \in H \subset G \quad E, g^{-1}, g \circ h \in H.$$

Таким образом, подгруппа $H \subset G$ тоже является группой, причём групповые операции в ней те же, что и в G .

(ф) Если первоначальная симметрия системы нарушается добавлением в гамильтониан лишнего члена, то новый гамильтониан имеет уже меньшую симметрию, задаваемую уже не исходной группой, а какой-то её подгруппой. Например,

если первоначально мы имеем частицу в сферически симметричном потенциале (атом), то симметрия системы описывается группой вращений. Если мы поместим атом во внешнее поле, то направление поля задаст в пространстве выделенное направление и в результате сохранятся только те симметрии, из первоначальной группы, которые переводят это направление в себя. Т.е. от первоначальной группы всех поворотов $SO(3)$ останется подгруппа поворотов относительно фиксированной оси $SO(2) \subset SO(3)$.

Задание подгруппы H позволяет разбить группу G на левые и правые классы эквивалентности:

$$\begin{aligned} \forall g_0 \in G \quad [g_0]_{\text{л}} &= g_0 H = \{g \in G | g = g_0 \circ h, h \in H\}, \\ [g_0]_{\text{п}} &= H g_0 = \{g \in G | g = h \circ g_0, h \in H\}. \end{aligned}$$

g_0 называют *представителем класса эквивалентности*.

Множество левых классов эквивалентности G/H и множество правых классов эквивалентности $H \backslash G$ для произвольной подгруппы H могут не быть группами и не совпадать.

Среди подгрупп особенно важны подгруппы, удовлетворяющие условию

$$\forall g \in G \quad g^{-1} H g = H$$

— *нормальные подгруппы*. Нормальная подгруппа может также называться *инвариантной подгруппой*, или *нормальным делителем* группы.

У коммутативной группы все подгруппы являются нормальными.

Нормальность подгруппы — необходимое и достаточное условие того, что левые и правые классы эквивалентности совпадают $H \backslash G = G/H$. В этом случае на них вводится групповая структура:

$$E_{G/H} = [E], \quad [g]^{-1} = [g^{-1}], \quad [g_1] \circ [g_2] = [g_1 \circ g_2].$$

Результат операции не зависит от того, какой представитель класса эквивалентности мы используем. Получившаяся подгруппа называется *факторгруппой* группы G по модулю нормальной подгруппы H и обозначается G/H .

Всякая группа G имеет по крайней мере две нормальных подгруппы: всю группу G и подгруппу состоящую из единицы $\{E\}$ (*тривиальная подгруппа*). Если других нормальных подгрупп нет, то такая группа называется *простой группой*.

Если задан некоторый гомоморфизм (14.2) $f : G \rightarrow L$, то множество всех элементов, отображающихся на единицу группы L называют *ядром гомоморфизма*:

$$f^{-1}(E_L) = \{g \in G | f(g) = E_L\}.$$

Легко проверяется, что ядро $f^{-1}(E_L)$ всегда является нормально подгруппой группы G .

Теорема о гомоморфизме¹: Пусть задан гомоморфизм $f : G \rightarrow L$, тогда группа L изоморфна факторгруппе по ядру гомоморфизма

$$L \simeq G/f^{-1}(E_L).$$

¹Есть старый физматшкольный стишок, для запоминания Теоремы о гомоморфизме:

Гомоморфный образ группы!
Будь, во имя коммунизма,
Изоморфен факторгруппе
По ядру гомоморфизма!

Теорема о гомоморфизме позволяет классифицировать все возможные гомоморфизмы, если мы знаем все нормальные подгруппы данной группы. ((Ф): Это будет полезно при изучении теории представлений групп, а в квантовой механике нас интересуют именно представления групп симметрии с помощью унитарных операторов.) В частности, для простых групп гомоморфизмы бывают двух типов: (1) изоморфизмы (ядро — тривиальная подгруппа) и (2) отображения на тривиальную группу из одного элемента (ядро — вся группа).

14.2.4 Конечные группы (л)

Любая группа G с конечным числом элементов $|G|$ может быть представлена как группа *перестановок* не более чем $|G|$ элементов. Такое представление реализуется если группа действует сама на себя умножением слева.

Таким образом, любая конечная группа изоморфна некоторой подгруппе *группы* всех *перестановок*, множества из N элементов, которая обозначается как S_N , причём $|S_N| = N!$

(Ф) Группа S_N в физике естественно возникает как группа перестановок N тождественных (одного сорта) бозонов, поскольку состояния отличающиеся друг от друга перестановкой (перенумерацией) бозонов одного сорта принципиально неразличимы.

Любая перестановка может быть представлена как матрица $N \times N$, в которой в каждой строке и каждом столбце присутствует одна единица, а остальные элементы — нули. Определители таких матриц всегда равны ± 1 . Умножению перестановок при этом соответствует умножение матриц. Поскольку при перемножении матриц их определители также перемножаются, из группы S_N выделяется в качестве нормальной подгруппы *группа чётных перестановок* A_N , элементы которой представимы матрицами с определителем $+1$, причём $|A_N| = \frac{1}{2}N!$ (при $N > 1$).

(Ф) Группа A_N в физике естественно возникает как группа перестановок N тождественных (одного сорта) фермионов, поскольку состояния отличающиеся друг от друга перестановкой (перенумерацией) фермионов одного сорта принципиально неразличимы, но при этом вектор состояния (волновая функция) меняет знак, при каждой перестановке пары одинаковых фермионов.

Любая перестановка может быть представлена как комбинация (произведение) *парных перестановок*, т.е. перестановок меняющих местами два элемента, и оставляющих остальные элементы неподвижными. Определитель матрицы парной перестановки равен -1 , так что, хотя число парных перестановок, на которые разлагается данный элемент, определено неоднозначно, чётность этого числа неизменна. *Чётными* называют перестановки, разлагающиеся на чётное число парных перестановок ($\det = +1$), *нечётными* — перестановки, разлагающиеся на нечётное число парных ($\det = -1$).

(Ф) Конечная подгруппа группы вращений естественным образом представляема как группа перестановок вершин некоторого многогранника, переводящая этот многогранник в себя. Такие группы в физике естественным образом возникают как группы симметрий различных молекул. Знание представлений таких групп облегчает нахождение спектров соответствующих молекул. В классической механике это соответствует нахождению частот собственных колебаний, а в квантовой — собственных уровней энергий. В частности до исследования гамильтониана обладающего соответствующей симметрией мы сразу можем назвать кратности собственных чисел.

Простейшая нетривиальная (состоящая более чем из одного элемента) группа состоит из целых степеней некоторого элемента группы:

$$\{g_0^n | n \in \mathbb{Z}\}$$

— *циклическая группа*. Бесконечная циклическая группа называется *свободной*, она изоморфна группе целых чисел относительно сложения $\mathbb{Z}$ (**(Ф)**: группа симметрий одномерной периодической решётки). Конечная циклическая группа из N элементов изоморфна группе остатков от деления на N относительно сложения и может быть получена как факторгруппа целых чисел относительно сложения по подгруппе целых чисел, делящихся на N

$$\mathbb{Z}_N = \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}.$$

Циклическая группа $\mathbb{Z}_N$ проста только для конечного простого N .

14.2.5 Стандартные матричные группы (Л)

Стандартные непрерывные группы — это подгруппы группы комплексных квадратных невырожденных ($\det M \neq 0$) матриц $N \times N$, которая обозначается $GL(\mathbb{C}, N)$, где GL означает общие (**G**eneral) линейные (**L**inear) преобразования. Групповые структуры (единичный элемент, умножение и взятие обратного элемента) понимаются как это стандартно принято для матриц.

Буквенные обозначения стандартных непрерывных групп строятся из стандартных блоков:

- S — **S**pecial — специальная — $\det M = 1$,
- U — **U**nitary — унитарная — $M^\dagger = M^{-1}$,
- O — **O**rthogonal — ортогональная — $M^T = M^{-1}$
- L — **L**inear — линейная — иногда дописывается для красоты,
- G — **G**eneral — общая — дописывается для красоты, если нет никаких условий.

После буквенного кода в круглых скобках могут указываться дополнительные параметры:

- размер матрицы (число),
- сигнатура метрики (два числа — число положительных собственных чисел и число отрицательных), остающейся инвариантной под действием преобразований из данной группы (в этом случае должна использоваться буква O, но матрицы будут уже не ортогональные, а *псевдоортогональные*)
- множество чисел, из которых строится матрица (чаще всего $\mathbb{C}$ или $\mathbb{R}$)
 - $\mathbb{C}$ — комплексные (для унитарных матриц опускается),
 - $\mathbb{R}$ — вещественные (для ортогональных матриц опускается),
 - $\mathbb{Q}$ — рациональные,
 - $\mathbb{Z}$ — целые,
 - $\mathbb{N}$ — натуральные.

Примеры

- $GL(\mathbb{R}, N)$ — невырожденные, вещественные, $N \times N$;
- $SL(N)$ — вещественные, $\det M = 1$, $N \times N$;
- $O(1,3)$ — группа Лоренца — $M \operatorname{diag}(+1, -1, -1, -1) M^T = \operatorname{diag}(+1, -1, -1, -1)$ — вещественные матрицы, сохраняют вид метрики Минковского (у метрики Минковского 1 положительное собственное число и 3 отрицательных);
- $O(3)$ — вещественные ортогональные матрицы 3×3 — $MM^T = E$ — повороты и их комбинации с отражениями;
- $SO(3)$ — вещественные ортогональные матрицы 3×3 , $\det M = 1$ — **собственные повороты** (без отражений);
- $U(N)$ — унитарные матрицы $N \times N$;
- $SU(2)$ — унитарные матрицы 2×2 , $\det M = 1$ — **квантовые повороты** (поворот на 2π даёт умножение на -1);
- $O(\mathbb{N}, N) = S_N$ — группа перестановок множества из N элементов;
- $SO(\mathbb{N}, N) = A_N$ — группа чётных перестановок множества из N элементов.

Для всех подгрупп группы $GL(\mathbb{C}, N)$ мы можем сразу записать линейное N -мерное представление, при котором они действуют слева как матрицы на столбец длины N .

14.3 «Симметрии-1» и «Симметрии-2». В чём различие?*

В этом разделе мы посмотрим на главу 11 «Симметрии-1» (которая производила впечатление вполне законченного изложения) с точки зрения текущей главы и посмотрим, чего же нам на самом деле не хватает.

14.3.1 Однопараметрические группы*

Ранее, в главе 11 «Симметрии-1» мы ограничивались рассмотрением однопараметрических групп симметрии. Такая симметрия всегда описывается одним эрмитовым оператором — *генератором* однопараметрической группы $\hat{A}$, порождающим для разных значений параметра $\alpha \in \mathbb{R}$ преобразования симметрии вида $\hat{U}_\alpha = \exp(i\alpha\hat{A})$. При этом всегда выполняется свойства

$$\hat{U}_\alpha \hat{U}_\beta = \hat{U}_{\alpha+\beta}, \quad \hat{U}_\alpha^{-1} = \hat{U}_{-\alpha}, \quad \hat{U}_0 = \hat{1}.$$

Следует заметить, что с точки зрения теории групп в однопараметрических группах мало интересного, все они устроены одним из двух способов:

- как вещественные числа с операцией сложения — между вещественными значениями параметра α и элементами группы есть взаимно-однозначное соответствие (пример — группа сдвигов по оси x);

- как точки на окружности с операцией сложения поворотов — между вещественными значениями параметра α и элементами группы есть соответствие, при котором значения параметра отличающиеся на период эквивалентны $\exp(i\alpha\hat{A}) = \exp(i(\alpha + 2\pi)\hat{A})$. Умножая генератор на число, периоду можно придать любое ненулевое значение, например 2π (пример — группа поворотов вокруг оси z).

Таким образом, у нас есть всего две однопараметрические группы: $\mathbb{R}(+)$ — группа вещественных чисел, относительно операции сложения и $SO(2)$ — группа поворотов плоскости. Однако эти группы в разных случаях были представлены разными операциями симметрии, т.е. разными унитарными операторами.

14.3.2 Группы и алгебры Ли*

Конечно, мы всегда можем выделить из более сложной группы непрерывных симметрий одну однопараметрическую подгруппу, задаваемую элементами вида $\exp(i\alpha\hat{A}_k)$ ($\alpha \in \mathbb{R}$, $\hat{A}_k = \hat{A}_k^\dagger$), или вставить дискретную симметрию в однопараметрическую группу, однако такой подход будет хотя и допустим, но неполон.

Мы можем включить все преобразования нашей группы в однопараметрические подгруппы, но использовать для нумерации квантовых состояний мы сможем только такие генераторы симметрий $\hat{A}_k$, которые коммутируют друг с другом ($[\hat{A}_k, \hat{A}_l] = 0$), например для группы поворотов нам придётся оставить только повороты вокруг одной выбранной оси (обычно выбирают ось z , тогда проекция момента импульса $\hat{J}_z$ задаёт повороты: $\exp(i\alpha\hat{J}_z)$). Как мы увидим далее, из квантовых симметрий можно извлечь больше информации, дополнив набор коммутирующих генераторов некоторой **нелинейной** комбинацией генераторов (такая комбинация уже не будет генератором). Для группы поворотов в дополнение к $\hat{J}_z$ можно взять $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$.

Пусть группа симметрий системы представляет собой некоторую D -мерную *группу Ли* — группу, локально параметризуемую с помощью D непрерывных параметров, такую, что групповые операции (умножение и взятие обратного элемента) непрерывны относительно вводимой параметризации.

Далее в качестве примера мы обсудим группу вращений в трёхмерном пространстве — $SO(3)$.

Симметрии, близкие к тождественному преобразованию (к единице группы) представляются как операторные экспоненты от *генераторов группы*, которые образуют D -мерное линейное пространство — *алгебру Ли* группы

$$\hat{U} = \exp\left(i \sum_{k=1}^D \alpha_k \hat{A}_k\right)$$

Групповые преобразования $\hat{U}$ представляются унитарными операторами. D штук линейно-независимых генераторов $\hat{A}_k$ представляются эрмитовыми операторами.

Алгебра Ли для данной группы обозначается тем же символом, что и сама группа, с заменой больших букв на маленькие. Например $SO(3)$ — классическая группа вращений, $SU(2)$ — квантовая группа вращений, им соответствует одна и та же (изоморфная) алгебра Ли для которую можно обозначать как $so(3)$ или $su(2)$. Генераторы алгебры вращений — операторы проекций момента импульса и их линейные комбинации.

Слово «представляются» выделено не случайно. Элементы группы Ли и её алгебры Ли принадлежат некоторым абстрактным пространствам, тогда как наши симметрии — операторы на линейном пространстве. Одна и та же группа и её алгебра могут быть по-разному реализованы (представлена) как группа преобразований линейного пространства. Таким образом, нам надо изучать не группы сами по себе, а *линейные представления групп* — отображение элементов группы на подгруппу линейных преобразований линейного пространства некоторой размерности N , при котором произведению элементов группы соответствует последовательно выполнение линейных преобразований.

Представление называется *тривиальным*, если все элементы группы представляются тождественным преобразованием. Представление называется *точным*, если каждому элементу группы соответствует одно линейное преобразование, отличное от представлений других элементов группы. Представление называется *неприводимым*, если в линейном пространстве нет инвариантных подпространств, кроме подпространства состоящего из единичного элемента и всего пространства.

Все генераторы группы симметрий коммутируют с гамильтонианом, но они могут не коммутировать между собой. Поэтому, когда мы строим набор одновременно измеримых (совместимых) наблюдаемых, нам приходится выбирать, какие из генераторов мы в него включим.

Группы вращений $SO(3)$ трёхмерна, и нас имеется три линейно-независимых генератора поворотов — проекции момента импульса на оси координат $\hat{j}_\alpha$. Проекция момента импульса на разные оси не коммутируют друг с другом и только одна из них может быть включена в набор совместимых наблюдаемых.

Алгебра Ли замкнута относительно операции взятия коммутатора с умножением на мнимую единицу, т.е. коммутатор любых двух генераторов даёт снова линейную комбинацию генераторов:

$$[\hat{A}_k, \hat{A}_l] = i \sum_{m=1}^D C_{kl}^m \hat{A}_m.$$

Коэффициенты C_{kl}^m называются *структурными константами*. Структурные константы зависят только от самой группы, но не от её представления. Для изоморфных алгебр Ли структурные константы могут быть сделаны одинаковыми заменой базиса.

Для группы вращений

$$[\hat{j}_\alpha, \hat{j}_\beta] = i \sum_{\gamma=1}^3 e_{\alpha\beta\gamma} \hat{j}_\gamma.$$

Группы Ли, алгебры Ли которых описываются одинаковым набором структурных констант в окрестностях единицы устроены одинаково. Например, сразу понятно, что группа собственных поворотов $SO(3)$ и группа $O(3)$ ортогональных матриц 3×3 (группа несобственных поворотов, включающая также комбинации поворотов с отражениями) одинаково устроены вблизи единицы (бесконечно малых отражений не бывает). Менее тривиально, что группа $SO(3)$ одинаково устроена с группой $SU(2)$, в которой поворот на полный угол 2π соответствует умножению на -1 , и только поворот на 4π даёт тождественное преобразование. И именно группа $SU(2)$ оказывается «настоящей» квантовой группой поворотов.

14.4 Представления групп (Л)

Представление f группы G — её отображение на группу преобразований $f(G)$ некоторого пространства $\mathbf{M}$, сохраняющее групповую структуру (14.2), но не обязательно взаимнооднозначное. Такое отображение, как уже упоминалось ранее, называется *гомоморфизмом*.

Если представление задаётся взаимнооднозначным отображением на группу преобразований (*изоморфизмом*), то такое представление называется *точным представлением*.

Если представление отображает все элементы группы на тождественное преобразование пространства $\mathbf{M}$, то оно называется *тривиальным представлением*.

Согласно теореме о гомоморфизме простая группа имеет только точные и тривиальные представления.

Если пространство представления $\mathbf{M}$ является линейным, и преобразования группы $f(G)$ также линейны, то и представление f называется *линейным*. Размерность $\dim \mathbf{M}$ при этом называется размерностью представления.

(Ф) В квантовой теории, когда нас интересуют преобразования линейного пространства состояний $\mathcal{H}$ нам нужны именно линейные представления групп. Более того, поскольку пространство $\mathcal{H}$ не только линейное, но и гильбертово (обладает структурой комплексного скалярного произведения), то нам нужны представления группы унитарными операторами — *унитарные представления*.

14.4.1 Существование*

Мы уже упоминали, что для любой группы G существует точное представление её как группы преобразований самой себя с помощью умножения слева (14.1). Однако для квантовой теории нам интереснее существование унитарного представления.

Точное унитарное представление произвольной группы мы тоже можем легко построить, если сопоставим каждому элементу группы вектор из некоторого ортонормированного базиса, получив пространство $\mathbf{M} = \mathbb{C}^G$. На этом пространстве группа действует переставляя номера базисных векторов с помощью умножения слева²

$$\forall g, h \in G, \quad g : \vec{e}_h \rightarrow \vec{e}_{gh}.$$

(фф) В данной формуле мы видим сразу два представления группы G : представление левыми сдвигами на номерах базисных векторов и линейное представление. Аналогичная процедура применяется при переходе от классической теории к квантовой: то, что раньше было (полным) набором состояний становится базисом нового пространства состояний. В частности так мы переходим от дискретного пространства состояний классического компьютера, к линейному пространству состояний квантового компьютера, допускающего всевозможные суперпозиции.

14.4.2 Приводимость и инвариантные подпространства (Л)

Пространство $\mathcal{H}$ линейного представления f группы G может содержать *инвариантные подпространства* $\mathcal{H}_{(1)} \subset \mathcal{H}$, которые переходят в себя под действием

²Для непрерывной группы строгое определение такой конструкции потребует введения на группе меры интегрирования инвариантной относительно левых сдвигов.

всех преобразований группы:

$$\forall g \in G \quad f(g)\mathcal{H}_{(1)} = \mathcal{H}_{(1)} \quad \Leftrightarrow \quad \forall g \in G, \psi \in \mathcal{H}_{(1)} \quad f(g)\psi \in \mathcal{H}_{(1)}.$$

Всегда имеются тривиальные инвариантные подпространства: подпространство из нулевого элемента $\{0\}$ и всё пространство $\mathcal{H}$. Если других инвариантных подпространств нет, то представление f называется *неприводимым представлением*.

(Ф) В при изучении симметрий определённого вида (т.е. при изучении представлений конкретной группы симметрий) очень полезно иметь полную классификацию неприводимых представлений. Такая классификация позволяет представлять любое представление группы, т.е. любое действие симметрии данного вида, как комбинацию неприводимых представлений.

Если линейное представление f приводимо, то каждое нетривиальное инвариантное подпространство $\mathcal{H}_{(1)}$ данного представления можно рассматривать как пространство нового представления $f_{(1)}$ (подпредставления), которое получается из f , если ограничить отображения $f(G)$ на $\mathcal{H}_{(1)}$.

(Ф) Если мы выделили из пространства состояний инвариантное подпространство меньшей размерности, причём оно также переходит в себя под действием гамильтониана, то далее мы можем рассматривать действие нашего гамильтониана на этом подпространстве. Диагонализировать гамильтониан на подпространстве меньшей размерности может быть проще, чем на всём пространстве состояний, а если подпространство конечномерно, то задача сведётся к диагонализации обычной матрицы.

14.4.3 Разложение представления в сумму неприводимых (л)

Если исходное представление f конечномерно, то размерность подпредставления $f_{(1)}$ строго меньше, чем размерность исходного:

$$\infty > \dim \mathcal{H} > \dim \mathcal{H}_{(1)} > 0.$$

Для любого конечномерного линейного представления мы можем получить последовательность вложенных инвариантных пространств и соответствующих им представлений:

$$\infty > \dim \mathcal{H} > \dim \mathcal{H}_{(1)} > \dots > \dim \mathcal{H}_{(n)} > 0.$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{(0)} \supset \mathcal{H}_{(1)} \supset \dots \supset \mathcal{H}_{(n)} \supset \{0\}.$$

В этой цепочке на каждом шаге размерность строго уменьшается, и для конечномерного f цепочка должна быть конечной. Последнее представление в цепочке $f_{(n)}$, действующее на пространстве $\mathcal{H}_{(n)}$ обязано быть неприводимым. Таким образом, для всякого конечномерного приводимого представления существует неприводимое подпредставление.

Нас интересуют унитарные представления, сохраняющие скалярное произведение в пространстве $\mathcal{H}$. Это позволяет сразу заключить, что ортогональное дополнение $\mathcal{H}_{(n)}^\perp$ к инвариантному подпространству $\mathcal{H}_{(n)}$ также инвариантно. Это позволяет продолжить процедуру: выделив из приводимого представления f неприводимое представление $f_{(n)}$, можно одновременно определить представление $f_{(n)}^\perp$ действующее на $\mathcal{H}_{(n)}^\perp$, причём $\dim \mathcal{H}_{(n)}^\perp < \dim \mathcal{H}$. Далее $f_{(n)}^\perp$ либо неприводимо (процедура заканчивается), либо приводимо, тогда из него снова выделяется неприводимое представление и ортогональное дополнение меньшей размерности.

В результате мы разлагаем пространство $\mathcal{H}$, на котором действует конечномерное унитарное представление f , в ортогональную сумму минимальных инвариантных подпространств $\mathcal{H}_n$, на каждом из которых представление f действует как неприводимое:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}_k, \\ \dim \mathcal{H} &= \dim \mathcal{H}_1 + \dim \mathcal{H}_2 + \cdots + \dim \mathcal{H}_k, \\ f &= f_1 \oplus f_2 \oplus \cdots \oplus f_k.\end{aligned}$$

Здесь мы ввели понятие суммы представлений. Если ввести базис на каждом из пространств $\mathcal{H}_n$ ($1 < n < k$), то базис в пространстве $\mathcal{H}$ можно ввести как объединение базисов на подпространствах. Вектор в $\mathcal{H}$ может быть представлен как набор столбцов высотой $\dim \mathcal{H}_n$, отвечающих подпредставлениям, поставленных друг на друга, а матрицы $f(g)$ ($g \in G$) — как блочно-диагональные матрицы, каждый из блоков имеет размер $\dim \mathcal{H}_n \times \dim \mathcal{H}_n$ действует на своё подпространство:

$$\begin{aligned}\psi &= \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_k \end{pmatrix} = \underbrace{\psi_1}_{\in \mathcal{H}_1} \oplus \underbrace{\psi_2}_{\in \mathcal{H}_2} \oplus \cdots \oplus \underbrace{\psi_k}_{\in \mathcal{H}_k} \in \mathcal{H}, & f(g)\psi &= \begin{pmatrix} f_1(g)\psi_1 \\ f_2(g)\psi_2 \\ \vdots \\ f_k(g)\psi_k \end{pmatrix}. \\ f(g) &= \left(\begin{array}{c|c|c|c} f_1(g) & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & f_2(g) & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \ddots & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & f_k \end{array} \right) = f_1(g) \oplus f_2(g) \oplus \cdots \oplus f_k(g).\end{aligned}$$

()** С точки зрения теории множеств ортогональная сумма пространств $\mathcal{H}_n$ — это прямое произведение множеств, на которых задана структура линейного пространства.

(Ф) Группа симметрий некоторого гамильтониана всегда переводит состояния с некоторой энергией в состояние, с той же энергией. Таким образом, подпространства состояний с определённой энергией являются инвариантными подпространствами соответствующей группы симметрий. Если разбиение представления на неприводимые единственно,³ то каждое минимальное инвариантное подпространство группы симметрий обязано быть собственным подпространством гамильтониана, обладающего соответствующей симметрией. Таким образом, если мы разложили наше представление группы симметрий на неприводимые, и показали единственность разложения, то большая часть работы по диагонализации гамильтониана уже выполнена: уже найден базис (т.е. набор стационарных состояний, годится любой базис, полученный объединением базисов в минимальных инвариантных подпространствах), осталось только найти собственные числа.

14.4.4 Умножение представлений (лф*)

Помимо суммы представлений вводится также операция умножения. Умножению представлений соответствует тензорное умножение соответствующих линей-

³Пример неединственности разложения представления на неприводимые — представление группы $\{-1, +1\}$ на пространстве одномерных волновых функций $L_2(\mathbb{R})$ операторами $\hat{I}$ (инверсия по координате) и $\hat{1}$.

ных пространств и операторов:

$$[f_1(g) \otimes f_2(g)](\underbrace{\psi_1}_{\in \mathcal{H}_1} \otimes \underbrace{\psi_2}_{\in \mathcal{H}_2}) = (\underbrace{f_1(g)\psi_1}_{\in \mathcal{H}_1}) \otimes (\underbrace{f_2(g)\psi_2}_{\in \mathcal{H}_2}).$$

При сложении представлений их размерности складываются, а при умножении — умножаются.

(Ф) Физически умножение представлений соответствует объединению подсистем, на которые действуют преобразования симметрии. Например, если в центральном поле ядра имеются два электрона, то мы можем написать два представления f_1 и f_2 группы вращений, соответствующих вращениям первого и второго электрона соответственно. Одновременному одинаковому вращению обоих электронов будет соответствовать произведение представлений $f_1 \otimes f_2$. Взаимодействие между электронами нарушает вращательную симметрию отдельного электрона, но сохраняет вращательную симметрию системы в целом, поэтому и законы сохранения оказываются связанными с одновременным поворотом обоих электронов (сохранение *суммарного* момента импульса). Как всегда, разделение системы на подсистемы не обязательно связано с пространственным разнесением компонент, например вместо орбитального движения двух электронов мы можем рассматривать орбитальное движение и спин (собственный момент импульса) одного и того же электрона. Например, далее (см. 15.5 «Сложение моментов») мы составим таблицы умножения неприводимых представлений квантовой группы вращений $SU(2)$.

При изучении конкретной группы симметрий помимо составления классификации неприводимых представлений полезно также составить *таблицу умножения представлений*: произведение каждой пары неприводимых представлений снова разлагается в сумму неприводимых представлений.

(Ф) После разложения произведения представлений на неприводимые слагаемые мы, как правило, уже не можем связать отдельное слагаемое с той или иной подсистемой. Практически всегда каждое из слагаемых представлений действует на обе подсистемы одновременно.

Глава 15

Вращения и моменты

С главе 14 «Симметрии-2» мы обсудили применение теории групп и их представлений для описания симметрий в квантовой механике. Данная глава иллюстрирует «Симметрии-2», но может читаться и независимо. Здесь разбирается конкретный важный пример симметрии относительно поворотов, и соответствующих этой симметрии операторов момента импульса.

15.1 Группа вращений

В данном разделе мы выясним некоторые свойства поворотов, которые зависят от того, как повороты комбинируются друг с другом. Действие поворотов на состояния квантовых систем здесь обсуждаться не будет. Т.е. мы обсуждаем абстрактную группу вращений, но не касаемся её представлений.

15.1.1 Что такое поворот (л)

Вращения собственные и несобственные (л)

Поворот — преобразование координат, которое оставляет неподвижным начало координат и сохраняет расстояние в трёхмерном евклидовом пространстве:

$$\mathbf{x}' = R\mathbf{x}, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \quad (\mathbf{x}', \mathbf{x}') = (\mathbf{x}')^T \mathbf{x}' = \mathbf{x}^T R^T R \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{x} = (\mathbf{x}, \mathbf{x}).$$

Поскольку вектор $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ произволен, мы получаем условие на матрицу R

$$R^T R = E. \tag{15.1}$$

Такие матрицы называются *ортогональными*. Множество ортогональных матриц 3×3 обозначается $O(3)$, имеет структуру группы и называется *группой вращений*.

Если взять определитель от равенства (15.1), то получится условие

$$(\det R)^2 = 1, \quad \Leftrightarrow \quad \det R = \pm 1.$$

Это условие разбивает все повороты R на два класса, в зависимости от знака определителя. Повороты с определителем $+1$ называются *собственными вращениями*. Множество собственных вращений обозначается $SO(3)$, является нормальной подгруппой $O(3)$ и называется *группой собственных вращений*. Собственные вращения — обычные повороты, которые можно выполнить непрерывно поворачивая тело вокруг некоторой оси. Несобственные вращения, для которых $\det R = -1$, выполнить

непрерывно вращая тело нельзя, т.к. при непрерывном вращении матрица R меняется непрерывно, непрерывно меняется и $\det R$, а значит определитель не сможет перепрыгнуть от значения $+1 = \det E$ к значению -1 . Несобственные вращения представляют собой комбинации собственных вращений и зеркальных отражений.

Топология вращений (л)

Группа $O(3)$ состоит из двух связных кусков: $SO(3)$ — группа собственных поворотов, и $\hat{P}SO(3)$ (напомним, $\hat{P}$ — оператор пространственной инверсии 11.4.2 — отражение по всем трём осям, здесь пока можно считать, что $\hat{P} = -E$) — несобственные повороты (группу не образуют, т.к. $(-1)^2 = +1$ произведение двух несобственных поворотов всегда даёт собственный).

Группы $O(3)$ и $SO(3)$ трёхмерны: их можно параметризовать тремя непрерывными параметрами.

$SO(3)$ параметризуется заданием вектора вдоль оси поворота (направление вектора выбираем по правилу правого винта), длина которого равна углу поворота. Углы поворота можно брать в диапазоне $[0, \pi]$. При этом поворот на π вокруг вектора $\mathbf{n}$ и вокруг вектора $-\mathbf{n}$ — это одинаковые повороты, поэтому их надо отождествить.

Таким образом, мы параметризовали все собственные вращения точками трёхмерного шара радиуса π , при этом диаметрально противоположные точки на поверхности сферы описывают одинаковые повороты и должны быть попарно отождествлены.

Мы получили, что группа $SO(3)$ имеет топологию проективного пространства — топологию трёхмерного шара у которого склеены (отождествлены) диаметрально противоположные точки на границе.

Топологически группа $O(3)$ состоит из двух несвязанных кусков, каждый из которых устроен как $SO(3)$.

Генераторы вращений (л)

Собственные вращения могут быть представлены как матричные экспоненты от *генераторов вращений*. Поскольку пространство поворотов трёхмерно, у нас есть три линейно независимых генератора, например, генераторы, отвечающие вращениям вокруг осей координат.

Поворот на угол φ вокруг оси x может быть записан как действие матрицы на столбец:

$$\mathbf{x}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & \sin \varphi \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}}_{R_x(\varphi)} \underbrace{\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}}_{\mathbf{x}} = R_x(\varphi) \mathbf{x} = e^{i\varphi j_x} \mathbf{x}.$$

$\hbar j_x$ — генератор поворота вокруг оси x . Как мы уже упоминалось ранее 11.3.2, поворот (сдвиг по обобщённой угловой координате) порождается обобщённым импульсом по этой координате. Для угла φ это момент импульса в проекции на ось x . Таким образом, j_x — проекция момента импульса, делённая на $\hbar$ (измеренная в единицах $\hbar$).

Обратите внимание! Мы сейчас обсуждаем групповые свойства вращений, но не их представления! Т.е. мы обсуждаем, как повороты комбинируются друг с

другом, но пока не интересуемся тем, как они действуют на волновые функции! Представления группы вращений мы обсудим позже.

Матрицу ij_x мы можем определить продифференцировав $R_x(\varphi)$ по углу φ в нуле

$$ij_x = \left. \frac{dR_x}{d\varphi} \right|_{\varphi=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Мы можем легко проверить, что экспонента от ij_x воспроизводит исходную матрицу поворота, если учтём, что

$$j_x^3 = j_x \quad \Rightarrow \quad \forall n = 0, 1, 2, \dots \quad j_x^{2n+2} = j_x^2 \neq j_x^0 = E, \quad j_x^{2n+1} = j_x. \quad (15.2)$$

Это свойство относится только к представлению вращений матрицами 3×3 ! (См. также 15.4 «Спин 1».)

Аналогично для других генераторов (проекций момента импульса)

$$ij_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad ij_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Запишем теперь собственный поворот общего вида $R_{\mathbf{n}}(\varphi)$ — поворот вокруг оси, задаваемой единичным вектором $\mathbf{n}$ на угол φ .

$$R_{\mathbf{n}}(\varphi) = e^{i\varphi \mathbf{j}_{\mathbf{n}}}.$$

Здесь $\mathbf{j}_{\mathbf{n}} = (\mathbf{j}, \mathbf{n}) = n_x j_x + n_y j_y + n_z j_z$, где $\mathbf{j}$ — вектор с компонентами (j_x, j_y, j_z) .

Мы можем вывести коммутационные соотношения для компонент момента импульса просто посчитав коммутаторы соответствующих матриц 3×3 :

$$[j_x, j_y] = ij_z \quad \text{и циклические перестановки } x, y, z.$$

$$[j_\alpha, j_\beta] = ie_{\alpha\beta\gamma} j_\gamma, \quad \alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3. \quad (15.3)$$

$$e_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} 0, & \text{среди } \alpha, \beta, \gamma \text{ есть совпадающая пара индексов} \\ +1, & (\alpha, \beta, \gamma) \text{ — чётная перестановка } (1, 2, 3) \\ -1, & (\alpha, \beta, \gamma) \text{ — нечётная перестановка } (1, 2, 3) \end{cases}.$$

По повторяющимся индексам в формуле (15.3) подразумевается суммирование, причем, в сумме здесь (при заданных α, β) не больше одного ненулевого члена.

Найденные коммутационные соотношения не зависят от представления группы вращений, а характеризуют группу как таковую. Символ $e_{\alpha\beta\gamma}$ задаёт структурные константы группы $SO(3)$.

Используя коммутационные соотношения легко убедиться, что оператор квадрата момента импульса $\hat{j}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$ коммутирует со всеми генераторами:

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_\alpha] = 0. \quad (15.4)$$

В теории представлений такой оператор называется *оператором Казимира* и используется для нумерации представлений (для *разделения переменных*, путём разбиения пространства состояний на инвариантные относительно действия $\hat{j}_\alpha$ подпространства).

15.1.2 Квантовые вращения**

Данный раздел призван объяснить, почему при дальнейшем изучении вращений квантовых систем мы не будем беспокоиться о том, чтобы эти вращения описывались группой собственных вращений $SO(3)$, а будем следить лишь за тем, чтобы генераторы вращений вели себя как компоненты момента импульса (чтобы алгебра Ли совпадала с алгеброй $so(3)$).

До сих пор мы рассматривали вращение как математическое преобразование, связывающее начальное и конечное состояния системы. Было упомянуто, что собственные повороты, в отличие от несобственных (содержащих нечётное число отражений), можно осуществить непрерывно, начиная с тождественного преобразования, т.е. это не просто преобразования описания системы, а преобразования которые можно осуществить на эксперименте.

Описывая последовательность в которой мы совершаем собственное вращение на эксперименте, как непрерывное преобразование, нам мало задать конечное преобразование, а надо задать непрерывную последовательность всех промежуточных поворотов от тождественного преобразования до конечного поворота.

Представим себе, что у нас имеется ряд одинаковых наблюдателей, каждый из которых повернут относительно предыдущего на малый угол (в пределе — бесконечно малый), и поворот осуществляется путём перехода от точки зрения одного наблюдателя, к точке зрения следующего. (Мы подразумеваем, что эти наблюдатели ничего не измеряют, а лишь переписывают со своей точки зрения состояние системы.)

Таким образом, экспериментальная реализация вращения задаётся не одной точкой пространства собственных поворотов (группы $SO(3)$), а непрерывной кривой $R(l)$ от тождественного преобразования E , до конечного поворота $R_n(\varphi)$:

$$R(\cdot) : [0, 1] \rightarrow SO(3), \quad R(0) = E, \quad R(1) = R_n(\varphi).$$

И если мы задаём вопрос о преобразовании состояния системы при реальном, проведённом экспериментально, повороте, то это преобразование должно *непрерывно* зависеть не только от конечного поворота $R_n(\varphi)$, но и от всей последовательности промежуточных поворотов $R(l)$. Таким образом, мы имеем новый набор преобразований, связанных уже не с вращениями, а с траекториями $R(l)$.

Тем не менее, обращаясь к нашей картине ряда наблюдателей, мы можем утверждать, что физически значимые выводы последнего наблюдателя не должны зависеть от ориентации промежуточных наблюдателей. Это означает, что каков бы не был ряд промежуточных наблюдателей, преобразование от первого наблюдателя к последнему может меняться не более чем на фазовый множитель.

Примем следующее упрощающее предположение: пусть конечное преобразование не меняется при непрерывных деформациях с фиксированными концами траектории $R(l)$. Другое предположения, приводящее к тому же результату: пусть группа преобразований квантовых состояний, связанных с путями в пространстве вращений $R(l)$ локально (когда траектория $R(l)$ не выходит из малой окрестности единицы E) устроена так же, как группа $SO(3)$, т.е. алгебра генераторов (алгебра Ли) новой группы должна совпадать с алгеброй Ли группы $SO(3)$.

Итак, в окрестности единицы преобразования однозначно определяются конечной точкой траектории $R(l)$. Однако глобально одному элементу $SO(3)$ может соответствовать несколько разных преобразований волновых функций. Число таких преобразований для данного элемента $SO(3)$ не более числа различных способов

(с точностью до непрерывных деформаций), которыми можно провести путь до данного элемента из единицы.

Если два пути $R(l)$ с фиксированным концом деформируемы друг в друга, то пройдя из единицы до конечной точки по первому пути, а вернувшись по второму мы получим замкнутый путь (петлю) из E в E , который может быть непрерывно стянут в точку. Если две траектории с фиксированным концом не деформируемы друг в друга, то полученная из них петля не может быть стянута в точку. Таким образом, изучение различных путей $R(l)$ ведущих в данную точку сводится к изучению петель, из E в E , проходящих через данную точку $R(1)$.

Однако на связном пространстве (а $SO(3)$ связно) при изучении стягиваемости петель в точку нам не важно в какую точку петля стягивается, и через какую точку проходит начальная петля. Мы можем любую петлю с помощью непрерывной деформации пропустить через любую точку, если прежде чем проходить саму петлю сходим в эту точку и вернёмся обратно по тому же пути (эта добавка, очевидно, стягиваема в точку). Таким образом, нам достаточно исследовать непрерывные замкнутые петли проходящие через E (или любую другую точку), не накладывая на дополнительных условий.

Классы эквивалентности таких петель (эквивалентны петли, которые непрерывно деформируемы друг в друга) образуют *фундаментальную группу* пространства. Единичная петля — петля стягиваемая в точку, обратная петля — прохождение петли в обратном направлении, произведение петель — петля, образованная последовательным проходом сперва первой, а потом второй петли.

Для пространства $SO(3)$ (проективного пространства) фундаментальная группа состоит из двух элементов: $\mathbb{Z}_2 = \{+1, -1\}$. Элементу -1 этой группы соответствует петля, которая нечётное число раз пересекает поверхность поворота на угол π (см. 15.1.1 «Топология вращений»). Другими словами, поворот на 2π не стягивается в точку, а потому может давать преобразование состояний, отличное от тождественного, а поворот на 4π в точку стягивается, и должен соответствовать тождественному преобразованию.

Повороту на 2π может соответствовать умножение на фазовый множитель P . Поворот на 4π получается двухкратным повторением поворота на 2π , т.е. соответствовать умножению на P^2 , но поворот на 4π должен быть тождественным преобразованием, т.к. соответствующая петля стягивается в точку. Поэтому

$$P^2 = 1, \quad P = \pm 1.$$

Выбор $P = +1$ соответствует исходной группе $SO(3)$. Выбор $P = -1$ соответствует квантовой группе поворотов, различающей повороты на 2π и 4π . Как мы увидим далее, при изучении спина $\frac{1}{2}$, квантовые повороты описываются группой $SU(2)$.

15.2 Представления вращений

Теперь, получив некоторое представление о том, что такое «поворот вообще», т.е. обсудив группу вращений как абстрактную группу, посмотрим как вращения действуют на те или иные квантовые системы, то есть обсудим конкретные представления группы вращений.

15.2.1 Орбитальные моменты

Рассмотрим момент импульса, связанный с движением точечной частицы. В классической механике момент импульса частицы задаётся как

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ zp_y - yp_z \end{pmatrix}.$$

Поскольку во всех компонентах $\mathbf{L}$ все перемножаемые координаты и импульсы относятся к разным осям, то проблем с упорядочением множителей не возникает, и квантовые операторы проекций момента импульса получаются из классических формул приписыванием шляпок. Как и раньше, при обсуждении группы поворотов и её генераторов, сразу обезразмерим квантовые моменты импульса, поделив их на $\hbar$ (по повторяющимся индексам снова подразумевается суммирование):

$$\begin{aligned} \hat{l}_\alpha &= \frac{1}{\hbar} e_{\alpha\beta\gamma} \hat{x}_\beta \hat{p}_\gamma = -i e_{\alpha\beta\gamma} x_\beta \partial_\gamma, \\ \hat{l}_x &= \frac{1}{\hbar} (\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y) = -i(y \partial_z - z \partial_y), \\ \hat{l}_y &= \frac{1}{\hbar} (\hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z) = -i(z \partial_x - x \partial_z), \\ \hat{l}_z &= \frac{1}{\hbar} (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) = -i(x \partial_y - y \partial_x). \end{aligned}$$

Здесь мы сразу переписали операторы $\hat{l}_\alpha$ как дифференциальные операторы в координатном представлении, $\partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial x^\alpha}$.

Проверим коммутационные соотношения для компонент орбитального момента импульса $\hat{l}_\alpha$.

$$\begin{aligned} [\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= \frac{1}{\hbar^2} [\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y, \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z] = \\ &= \frac{1}{\hbar^2} ([\hat{y} \hat{p}_z, \hat{z} \hat{p}_x] - \underbrace{[\hat{y} \hat{p}_z, \hat{x} \hat{p}_z]}_0 - \underbrace{[\hat{z} \hat{p}_y, \hat{z} \hat{p}_x]}_0 + [\hat{z} \hat{p}_y, \hat{x} \hat{p}_z]) = \\ &= \frac{1}{\hbar^2} (\hat{y} \underbrace{[\hat{p}_z, \hat{z}]}_{(-i\hbar)} \hat{p}_x + \hat{x} \underbrace{[\hat{z}, \hat{p}_z]}_{i\hbar} \hat{p}_y) = i \frac{1}{\hbar} (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) = i \hat{l}_z. \end{aligned}$$

С помощью циклических перестановок x, y, z получаем коммутационные соотношения, совпадающие с (15.3):

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta] = i e_{\alpha\beta\gamma} \hat{l}_\gamma.$$

Сферические координаты

Операторы $\hat{l}_\alpha$ являются операторами производных вдоль векторных полей¹

$$\begin{aligned}\vec{l}_x &= -i(0, -z, y), \\ \vec{l}_y &= -i(z, 0, -x), \\ \vec{l}_z &= -i(-y, x, 0).\end{aligned}$$

Эти векторные поля с точностью до множителя $-i$ представляют собой поля скоростей при вращении вокруг соответствующих осей координат с единичной угловой скоростью. Экспоненты от операторов $\hat{l}_\alpha$ будут как раз соответствовать движению вдоль этих векторных полей $i\vec{l}_\alpha$.

При вращении вокруг координатных осей расстояние от точки до начала координат не меняется, поэтому может быть удобно выписать поля $\vec{l}_\alpha$ и операторы $\hat{l}_\alpha$ в сферических координатах. Следует ожидать, что в сферических координатах орбитальные моменты могут быть выражены с использованием только угловых координат, без использования координаты r .

Сферические координаты — это расстояние до начала координат r , широта θ (отсчитывается не от плоскости экватора, как в географии, а от оси z), долгота φ (отсчитывается от плоскости xz , направление отсчёта связано с направлением оси z правым винтом).

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \varphi, \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi, \\ z &= r \cos \theta.\end{aligned}$$

Базисные векторы в сферических координатах можно легко представить, определив как смещается точка при бесконечно малом изменении соответствующей координаты. Вектор смещения при изменении координаты x^a на величину dx^a будет равен $\vec{e}_a \cdot dx^a$ (индексы подчеркнуты, чтобы показать, что суммы по повторяющемуся индексу a в данной формуле нет).

$$\begin{aligned}\vec{e}_r &= (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta), & \vec{e}_r^2 &= 1, \\ \vec{e}_\theta &= (r \cos \theta \cos \varphi, r \cos \theta \sin \varphi, -r \sin \theta), & \vec{e}_\theta^2 &= r^2, \\ \vec{e}_\varphi &= (-r \sin \theta \sin \varphi, r \sin \theta \cos \varphi, 0), & \vec{e}_\varphi^2 &= r^2 \sin^2 \theta.\end{aligned}$$

Матрица скалярных произведений векторов $\vec{e}_a$ даёт метрический тензор, однако его проще определить через элемент длины, выраженный в новых координатах:

$$dl^2 = dr^2 + r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2) \Leftrightarrow g_{ab} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix}. \quad (15.5)$$

¹В дифференциальной геометрии принято считать, что вектор и производная вдоль этого вектора — один и тот же объект, т.к. между ними естественным образом устанавливается взаимно-однозначное соответствие: $\partial_v = v^a \partial_a$. При этом операторы частной производной вдоль координат $\partial_a = \frac{\partial}{\partial x^a}$ выступают в роли базисных векторов (координатный базис). Такой базис в общем случае не является ни ортогональным, ни нормированным. Компоненты вектора, разложенного по координатному базису при замене координат преобразуются по тому же закону, что и бесконечно малый радиус-вектор с компонентами dx^a , соединяющий две бесконечно близкие точки.

Компоненты полей $\vec{l}_\alpha$ по векторам нового базиса определяются как $\frac{(\vec{l}_\alpha, \vec{e}_a)}{\vec{e}_a^2}$.

$$\begin{aligned}\hat{l}_x &= -i(-\sin \varphi \partial_\theta - \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \partial_\varphi), \\ \hat{l}_y &= -i(\cos \varphi \partial_\theta - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \partial_\varphi), \\ \hat{l}_z &= -i \partial_\varphi.\end{aligned}$$

Как и следовало ожидать, $\hbar \hat{l}_z$ имеет стандартный вид импульса (генератора сдвига) по координате φ (долготе).

Оператор $\hat{l}^2$ в сферических координатах с точностью до знака совпадает с оператором Бельтрами-Лапласа (обобщением лапласиана) на единичной сфере:

$$\hat{l}^2 = - \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] = -\Delta_{\theta\varphi}.$$

15.2.2 Спектр оператора $\hat{j}_z$

Различные проекции момента импульса не коммутируют друг с другом, поэтому в набор одновременно измеримых величин мы можем включить только одну из них и суммарный квадрат момента импульса (оператор Казимира алгебры моментов). Традиционно из всех проекций момента импульса принято выбирать проекцию на ось z . Однако все выводы останутся справедливыми и при замене оси z на любое другое направление.

Пусть m — собственное число оператора $\hat{j}_z$

$$\hat{j}_z \psi_m = m \psi_m.$$

Под действием оператора поворота на угол 2π собственная функция ψ_m либо переходит в себя, либо меняет знак (15.1.2 «Квантовые вращения**»)

$$e^{i2\pi \hat{j}_z} \psi_m = e^{i2\pi m} \psi_m = \pm \psi_m.$$

Таким образом, m должно быть целым, или полуцелым

$$m \in \mathbb{Z}, \quad \text{или} \quad m + \frac{1}{2} \in \mathbb{Z}.$$

Причём собственные функции для целых и полуцелых m удобнее отнести к разным пространствам, т.к. иначе их линейная комбинация при повороте на 2π не умножалась бы на фиксированный множитель ± 1 .

Для орбитального момента в роли $\hat{j}_z$ выступает оператор $\hat{l}_z$. Экспонента от него задаёт сдвиг по углу φ (поворот)

$$e^{i\alpha \hat{l}_z} \psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi + \alpha).$$

С учётом 2π -периодических условий по φ мы должны выбрать

$$m \in \mathbb{Z}, \quad \psi_m(r, \theta, \varphi) = C_m(r, \theta) e^{im\varphi}.$$

15.2.3 Операторы $\hat{j}_{\pm}$

Для дальнейшего исследования моментов импульса полезно ввести операторы

$$\hat{j}_{\pm} = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y = \hat{j}_{\mp}^{\dagger}.$$

Для орбитальных моментов получаем

$$\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y = e^{\pm i\varphi} (\pm \partial_{\theta} + i \operatorname{ctg} \theta \partial_{\varphi}).$$

Через операторы $\hat{j}_{\pm}$ удобно выражать $\hat{j}_x$ и $\hat{j}_y$, подобно тому, как через лестничные операторы $\hat{a}$, $\hat{a}^{\dagger}$ удобно выражать $\hat{P}$, $\hat{Q}$ для гармонического осциллятора (12.7). Для векторного оператора компоненты $+$, $-$ и z часто оказываются более удобными, чем x , y и z .

Подобно тому, как оператор номера уровня для гармонического осциллятора удобно выразить через $\hat{a}$ и $\hat{a}^{\dagger}$, оператор $\hat{j}^2$ удобно выразить через $\hat{j}_{\pm}$ и $\hat{j}_z$:

$$\begin{aligned} \hat{j}_- \hat{j}_+ &= \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + i[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 - \hat{j}_z, \\ \hat{j}_+ \hat{j}_- &= \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 - i[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z. \end{aligned}$$

Отсюда легко видеть, что

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hat{j}_z, \quad (15.6)$$

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_- \hat{j}_+ + \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z = \hat{j}_+ \hat{j}_- + \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z. \quad (15.7)$$

Используя коммутационные соотношения (15.3) и (15.4) получаем

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}] = \hat{j}_{\pm}, \quad (15.8)$$

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_{\pm}] = 0. \quad (15.9)$$

Подобно тому, как операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^{\dagger}$ уменьшают и увеличивают числа заполнения для гармонического осциллятора (12.13), $\hat{j}_{\pm}$ увеличивают и уменьшают значение проекции $\hat{j}_z$:

$$\hat{j}_z(\hat{j}_{\pm}\psi_m) = (\hat{j}_{\pm}\hat{j}_z + [\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}])\psi_m = (\hat{j}_{\pm} m \pm \hat{j}_{\pm})\psi_m = (m \pm 1)(\hat{j}_{\pm}\psi_m) \quad (15.10)$$

Как и для гармонического осциллятора (12.13), мы можем сделать вывод, что выражение $\hat{j}_{\pm}\psi_m$ либо обращается в нуль, либо оказывается собственным вектором, отвечающим собственному числу $(m \pm 1)$.

15.2.4 Собственные векторы операторов $\hat{j}_z$, $\hat{j}^2$

Ранее мы обсуждали спектр собственных состояний оператора $\hat{j}_z$ (15.2.2 «Спектр оператора $\hat{j}_z$ ») не накладывая на состояния каких-либо дополнительных ограничений. Теперь мы потребуем, чтобы рассматриваемые состояния были одновременно собственными для оператора $\hat{j}^2$, коммутирующего с $\hat{j}_z$.

$$\hat{j}_z\psi_{\lambda m} = m\psi_{\lambda m}, \quad \hat{j}^2\psi_{\lambda m} = \lambda\psi_{\lambda m}.$$

Поскольку $\hat{j}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$, мы сразу заключаем, что $\lambda > |m|^2$. Таким образом, спектр разрешённых значений m при фиксированном λ ограничен сверху и снизу.

Пусть j — максимальное значение m при данном λ , тогда (см. (15.10), (15.7))

$$\begin{aligned}\hat{j}_z \psi_{\lambda j} &= j \psi_{\lambda j}, \\ \hat{j}_+ \psi_{\lambda j} &= 0, \\ \hat{j}^2 \psi_{\lambda j} &= (\hat{j}_- \hat{j}_+ + \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z) \psi_{\lambda j} = (0 + j^2 + j) \psi_{\lambda j} = \lambda \psi_{\lambda j}.\end{aligned}$$

Таким образом, $\lambda = j(j+1)$. Аналогично, проверяется, что минимальное разрешённое значение m — это $-j$.

$$\begin{aligned}\hat{j}_z \psi_{\lambda -j} &= -j \psi_{\lambda -j}, \\ \hat{j}_- \psi_{\lambda -j} &= 0, \\ \hat{j}^2 \psi_{\lambda j} &= (\hat{j}_+ \hat{j}_- + \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z) \psi_{\lambda j} = (0 + j^2 - (-j)) \psi_{\lambda -j} = \lambda \psi_{\lambda -j}.\end{aligned}$$

Поскольку j — неотрицательное целое или полуцелое число, то для нумерации состояний удобнее использовать не $\lambda = j(j+1)$, а само j . Ортонормированные состояния с определёнными значениями m и j принято обозначать как $|j, m\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{j}_z |j, m\rangle &= m |j, m\rangle, \\ \hat{j}^2 |j, m\rangle &= j(j+1) |j, m\rangle, \\ \langle j_1, m_1 | j_2, m_2 \rangle &= \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}, \\ 2j &\in \mathbb{N} \cup \{0\}, \quad m \in \{-j, -j+1, \dots, +j\}.\end{aligned}$$

Уравнение (15.10) даёт

$$\hat{j}_{\pm} |j, m\rangle = C_{\pm} |j, m \pm 1\rangle.$$

Для определения коэффициентов $C_{\pm}$ воспользуемся соотношениями (15.7).

$$\begin{aligned}\hat{j}_+ |j, m\rangle &= C_+ |j, m+1\rangle, \\ \langle j, m | \hat{j}_- &= \langle j, m | C_+^*, \\ \langle j, m | \hat{j}_- \hat{j}_+ |j, m\rangle &= \langle j, m+1 | C_+^* C_+ |j, m+1\rangle = |C_+|^2, \\ \langle j, m | \hat{j}_- \hat{j}_+ |j, m\rangle &= \langle j, m | \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z |j, m\rangle = j(j+1) - m(m+1).\end{aligned}$$

Мы определили, что $|C_+| = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$, но фазу этого коэффициента вычислить невозможно, т.к. условия нормировки позволяют умножать разные базисные состояния на разные фазовые множители, при этом будет меняться фаза и у C_+ . Раньше подобные рассуждения мы использовали для введения формулы (12.22) для гармонического осциллятора.

Не имея возможности *вычислить* фазовые множители для C_+ , мы имеем возможность *выбрать* их по своему произволу. Мы выберем все C_+ вещественными неотрицательными числами. Это зафиксирует большую часть произвола, теперь мы можем умножать наши векторы только на *одинаковые* фазовые множители, C_+ теперь — фиксированные числа.

Определив фазу у множителей $C_{+,j,m}$ мы тем самым определили фазу и у множителей $C_{-,j,m}$.

$$\begin{aligned}\hat{j}_+ |j, m\rangle &= C_{+,j,m} |j, m+1\rangle, \\ \langle j, m+1 | \hat{j}_+ |j, m\rangle &= C_{+,j,m}, \\ \langle j, m+1 | \hat{j}_+ |j, m\rangle^* &= C_{+,j,m}^*, \\ \langle j, m+1 | \hat{j}_+ |j, m\rangle^* &= \langle j, m | \hat{j}_- |j, m+1\rangle = C_{-,j,m+1}, \\ C_{-,j,m+1} &= C_{+,j,m}^*.\end{aligned}$$

Таким образом все коэффициенты $C_{\pm}$ оказываются вещественными неотрицательными:

$$\begin{aligned}\hat{j}_+|j, m\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}|j, m+1\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j, m+1\rangle, \\ \hat{j}_-|j, m\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|j, m-1\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle.\end{aligned}$$

Как и для лестничных операторов гармонического осциллятора, множители обращаются в нуль при попытке вывести собственное число m из разрешённого диапазона.

Матричные элементы операторов $\hat{j}_{\pm}$ для базисных векторов имеют вид

$$\begin{aligned}\langle j', m'|\hat{j}_+|j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\delta_{jj'}\delta_{m, m'-1} \quad \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \quad \langle j, m|\hat{j}_-|j', m'\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\delta_{jj'}\delta_{m, m'-1}\end{aligned}$$

Это позволяет представить операторы при фиксированном значении j в виде матриц $(2j+1) \times (2j+1)$

$$\begin{aligned}\hat{j}_+ &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{(2j)1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{(2j-1)2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{(2j-2)3} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \sqrt{1(2j)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{j}_- &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \sqrt{(2j)1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{(2j-1)2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{(2j-2)3} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sqrt{1(2j)} & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Столбцы и строки нумеруются здесь целыми числами начиная с $+j$ до $-j$ в порядке убывания.

Отсюда находятся также матрицы $\hat{j}_x = \frac{\hat{j}_+ + \hat{j}_-}{2}$ и $\hat{j}_y = \frac{\hat{j}_+ - \hat{j}_-}{2i}$.

Матрицы $\hat{j}_z$ и $\hat{j}^2$, поскольку мы взяли их собственные векторы в качестве базиса, оказываются диагональными, причём матрица квадрата момента (оператора Казимира) оказывается пропорциональной единичной матрице $\hat{j}^2 = j(j+1)\hat{E}$. $\hat{j}_z$, при выбранной нумерации строк и столбцов, имеет вид:

$$\hat{j}_z = \begin{pmatrix} j & 0 & \dots & 0 \\ 0 & j-1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -j \end{pmatrix}.$$

(*) Мы описали неприводимое $(2j+1)$ -мерное представление группы вращений. Если j целое, то это представление групп $SO(3)$ и $SU(2)$ одновременно, а если j полуцелое, то это представление относится только к группе $SU(2)$.

15.2.5 Орбитальные и спиновые моменты

Введённые выше операторы орбитального момента одной частицы $\hat{l}_{a\alpha}$ (a — номер частицы) действуют только на координаты этой частицы. В частности, операторы поворота $e^{i\alpha\hat{l}_{an}}$ поворачивают вокруг начала координат только эту частицу, оставляя другие частицы на месте. Если мы хотим повернуть все частицы, то необходимо каждую из них повернуть на один и тот же угол. Поскольку орбитальные моменты разных частиц действуют на разные координаты, то они коммутируют друг с другом и мы можем определить суммарный орбитальный момент $\hat{L}_\alpha$ (генератор одновременного поворота координат всех частиц) как сумму орбитальных моментов отдельных частиц

$$e^{i\alpha\hat{l}_{1n}}e^{i\alpha\hat{l}_{2n}}\dots e^{i\alpha\hat{l}_{Nn}} = e^{i\alpha\sum_a\hat{l}_{an}} = e^{i\alpha\hat{L}_n}, \quad \hat{L}_n = \sum_{a=1}^N \hat{l}_{an}.$$

Очевидно, что т.к. моменты разных частиц коммутируют между собой, для суммарного орбитального момента справедливы те же коммутационные соотношения (15.3), что и для орбитальных моментов отдельных частиц $[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] = i e_{\alpha\beta\gamma} \hat{L}_\gamma$.

Обратите внимание, что мы пишем *суммарный орбитальный момент*, а не *суммарный момент импульса*. Это связано с тем, что помимо орбитального момента частиц, связанного с движением частиц как целого, существует ещё спиновый (внутренний) момент импульса $\hat{s}_\alpha$ — *спин*. Классическим аналогом спина был бы момент импульса, связанный с вращением частицы вокруг своей оси, однако для элементарных частиц такая наивная интерпретация не работает, т.к. скорости вращения должны были бы быть слишком велики (больше скорости света), а кроме того, спин имеется у частиц, для которых не наблюдается никаких признаков внутренней структуры.

Спин принято считать некоторым внутренним невыводимым свойством частиц. Для частиц определённого сорта величина квадрата спина $\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$ определена и равна $s(s+1)$, где s — целое или полуцелое неотрицательное число. Для описания спина волновая функция кроме обычных переменных, описывающих движение каждой частицы как целого, имеет также дискретные спиновые переменные, которые пробегает значения от $-s$ до $+s$ с шагом 1.

Подобно тому, как операторы орбитального момента действуют только на координаты частиц, операторы спина действуют только на спиновые переменные. Поскольку спиновые переменные дискретны, спиновые операторы представляют собой матрицы. Спиновые операторы для частицы со спином s — матрицы $(2s+1) \times (2s+1)$.

15.2.6 Коммутаторы моментов импульса

Для того, чтобы определить, как коммутируют операторы момента импульса с каким-либо оператором, нам надо определить, как ведёт себя этот оператор при вращениях (11.2):

$$\frac{d\hat{A}_{\text{повёрн.}}}{d\alpha} = \frac{d}{d\alpha} \left[e^{i\alpha\hat{j}_\mu} \hat{A} e^{-i\alpha\hat{j}_\mu} \right] \Big|_{\alpha=0} = i[\hat{j}_\mu, \hat{A}].$$

Так что если мы знаем как оператор ведёт себя при вращениях, то мы знаем как он коммутирует с моментами импульса. Формулу мы записали для вращения

оператора «вместе» с состоянием (для вращения «вместо» достаточно поменять знаки в показателях экспонент, см. 11.2 «Преобразования операторов “вместе” и “вместо”»).

Скаляры

Сразу можно сделать вывод, что любой скалярный оператор (оператор, не меняющийся при поворотах) коммутирует со всеми компонентами $\hat{j}_\mu$:

$$[\hat{j}_\mu, \hat{A}] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{A} \text{ — скаляр.}$$

В частности скаляром оказывается оператор Казимира $\hat{j}^2$.

Векторы

Для того, чтобы записать преобразование вектора при вращении нам нет необходимости знать, что это за вектор. Само слово «вектор» подразумевает вполне определённые трансформационные свойства. (Так что сейчас самое сложное — не запутаться в знаках, определяя что относительно чего вращается.) Нам достаточно записать бесконечномалый поворот вокруг $\mathbf{e}_\lambda$ на угол α :

$$\hat{A}_\mu \rightarrow \hat{A}_\mu - \alpha e_{\lambda\mu\nu} \hat{A}_\nu + O(\alpha^2)$$

Мы рассматриваем поворот «вместе», так что он осуществляется в противоположном направлении, по сравнению с тем, как поворачиваются аргументы волновой функции в разделе 15.1.1 «Генераторы вращений».²

$$i[\hat{j}_\lambda, \hat{A}_\mu] = \frac{d\hat{A}_\mu}{d\alpha} = -e_{\lambda\mu\nu} \hat{A}_\nu$$

Таким образом, компоненты произвольного векторного оператора коммутирует с компонентой момента импульса по следующему закону:

$$[\hat{j}_\lambda, \hat{A}_\mu] = [\hat{A}_\lambda, \hat{j}_\mu] = i e_{\lambda\mu\nu} \hat{A}_\nu \quad (15.11)$$

Эта формула обобщает коммутационное соотношение (15.3), которое воспроизводится, если подставить вместо $\hat{A}_\lambda$ компоненту момента импульса $\hat{j}_\lambda$. Это означает, что компоненты момента импульса, как и в классической механике, образуют вектор.

Из формулы (15.11) следуют такие полезные коммутаторы:

$$[\hat{A}_z, \hat{j}_\pm] = [\hat{j}_z, \hat{A}_\pm] = \pm \hat{A}_\pm, \quad (15.12)$$

$$[\hat{A}_+, \hat{j}_-] = [\hat{j}_+, \hat{A}_-] = 2\hat{A}_z. \quad (15.13)$$

Обратите внимание, что коммутатор $[\hat{j}_z, \hat{A}_\pm] = \pm \hat{A}_\pm$ (15.12) означает, что под действием оператора $\hat{A}_\pm$ проекция момента импульса на ось z изменяется на ± 1 (сравни с (15.10)), также как под действием $\hat{j}_\pm$. Однако

$$\begin{aligned} [\hat{A}_\lambda, \hat{j}^2] &= i e_{\lambda\mu\nu} (\hat{j}_\mu \hat{A}_\nu + \hat{A}_\nu \hat{j}_\mu), \\ [\hat{A}_\pm, \hat{j}^2] &= \pm (\hat{A}_z \hat{j}_\pm + \hat{j}_\pm \hat{A}_z - \hat{A}_\pm \hat{j}_z - \hat{j}_z \hat{A}_\pm). \end{aligned}$$

²Для проверки знака, с учётом того, что все векторы вращаются одинаково можно, например, проверить коммутатор $[\hat{x}_1, \hat{l}_2] = i\hat{x}_3$.

Если $\hat{A}_\pm$ не коммутируют с $\hat{j}^2$, то они не только сдвигают m на ± 1 , но также «портят» квантовое число j . Также могут «портиться» другие квантовые числа, например состояния с определённым орбитальным моментом (заданы собственные числа для $\hat{l}^2$ и $\hat{l}_z$) под действием $\hat{l}_\pm$ меняют только угловую зависимость при фиксированном $\hat{l}^2$, а под действием $\hat{x}_\pm$ изменится не только $\hat{l}_z$, но также состояние перестанет быть собственным для $\hat{l}^2$, и изменится зависимость волновой функции от радиальной переменной.

Вместо операторов суммарного момента импульса $\hat{j}_\alpha$ мы можем брать операторы момента импульса подсистемы при условии что данный вектор вращается при поворотах этой подсистемы, т.е. что операторы $\hat{A}_\alpha$ действуют на переменные описывающие данную подсистему и только на них, например орбитальный момент поворачивает импульс и мы имеем $[\hat{p}_\alpha, \hat{l}_\beta] = [\hat{l}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{p}_\gamma$. Если же оператор действует на переменные другой подсистемы, то он коммутирует с моментом импульса данной подсистемы, например спин не поворачивает орбитальный момент и координаты $[\hat{s}_\alpha, \hat{l}_\beta] = [\hat{s}_\alpha, \hat{x}_\beta] = 0$.

15.2.7 Лестничные операторы для осциллятора $\hat{a}^\pm$ и момента импульса $\hat{j}_\pm$ **

Очевидно сходство между лестничными операторами для осциллятора $\hat{a}^\pm$ и операторами $\hat{j}_\pm$ для момента импульса. Это сходство не случайно, и мы можем построить операторы момента импульса из осцилляторных операторов.

Введём гильбертово пространство $\mathcal{H}$ как тензорное произведение двух пространств $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$, на которых действуют два комплекта осцилляторных операторов

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2, \\ \hat{a}_1^\pm &= \hat{a}^\pm \otimes \hat{1}, \\ \hat{a}_2^\pm &= \hat{1} \otimes \hat{a}^\pm, \\ \hat{N}_1 &= \hat{N} \otimes \hat{1} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \otimes \hat{1}, \\ \hat{N}_2 &= \hat{1} \otimes \hat{N} = \hat{1} \otimes \hat{a}^\dagger \hat{a}.\end{aligned}$$

Базис в пространстве $\mathcal{H}$ естественно нумеровать двумя числами заполнения:

$$|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle, \quad n_1, n_2 \in \{0, 1, 2, 3, \dots\}.$$

Перенумеруем базисные векторы новыми квантовыми числами $j = \frac{n_1+n_2}{2}$ и $m = \frac{n_1-n_2}{2}$ (см. Рис.15.1):

$$|j, m\rangle = |j+m\rangle \otimes |j-m\rangle, \quad j \in \left\{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\right\}, \quad m \in \{+j, +j-1, \dots, -j\}.$$

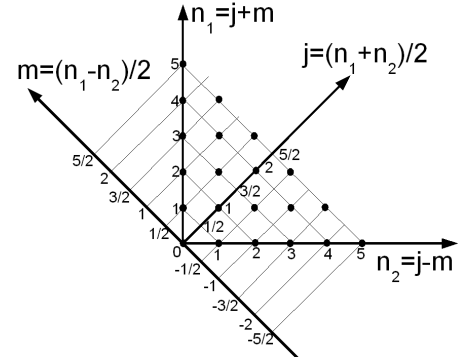


Рис. 15.1: Связь чисел заполнения n_1 и n_2 с j и m .

Новая нумерация базисных векторов сразу подсказывает, как определить операторы момента импульса:

$$\begin{aligned}\hat{j}_z &= \frac{\hat{N}_1 - \hat{N}_2}{2}, \\ \hat{j}_+ &= \hat{a}^\dagger \otimes \hat{a}, \\ \hat{j}_- &= \hat{a} \otimes \hat{a}^\dagger.\end{aligned}$$

Мы можем определить оператор $\hat{j}$, с собственными числами j :

$$\begin{aligned}\hat{j} &= \frac{\hat{N}_1 + \hat{N}_2}{2}, \\ \hat{j}^2 &= \hat{j}(\hat{j} + 1).\end{aligned}$$

Легко проверить, как действуют операторы момента на базисные состояния $|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle = \left| \frac{n_1+n_2}{2}, \frac{n_1-n_2}{2} \right\rangle = |j, m\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{j}_z |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle &= \frac{n_1 - n_2}{2} |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle = m |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle, \\ \hat{j}_+ |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle &= \hat{a}^\dagger \otimes \hat{a} |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle = \sqrt{(n_1+1)n_2} |n_1+1\rangle \otimes |n_2-1\rangle = \\ &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle, \\ \hat{j}_- |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle &= \hat{a} \otimes \hat{a}^\dagger |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle = \sqrt{n_1(n_2+1)} |n_1-1\rangle \otimes |n_2+1\rangle = \\ &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle.\end{aligned}$$

Мы представили гильбертово пространство как прямую сумму $(2j+1)$ -мерных подпространств для всех возможных целых и полуцелых j .

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots} \mathbb{C}^{2j+1} = \mathbb{C}^1 \oplus \mathbb{C}^2 \oplus \mathbb{C}^3 \oplus \mathbb{C}^4 \oplus \dots$$

На каждое подпространство соответствует определённое значение j . На языке теории представлений каждое подпространство соответствует определённому неприводимому представлению группы квантовых вращений $SU(2)$. Тем самым мы получили каждое неприводимое представление группы квантовых вращений $SU(2)$ по одному разу.

15.3 Спин $\frac{1}{2}$

Волновая функция частицы со спином $\frac{1}{2}$ может быть представлена как функция $\psi(\mathbf{r}, \sigma)$ от координат $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ и спиновой переменной (проекция спина на ось z) $\sigma \in \{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\}$. При этом удобно считать, что σ нумерует строки столбца из двух элементов. Можно также считать, что аргумент у волновой функции по прежнему один — $\mathbf{r}$, зато значением функции в точке считается не комплексное число, а комплексный столбец из двух строк:

$$\psi(\mathbf{r}, \cdot) = \begin{pmatrix} \psi(\mathbf{r}, +\frac{1}{2}) \\ \psi(\mathbf{r}, -\frac{1}{2}) \end{pmatrix} = \psi(\mathbf{r}).$$

Мы можем считать, что спиновая переменная — это такая координата, описывающая дополнительную дискретную спиновую степень свободы. Более того, часто

удобно считать что спин и движение частицы как целого — отдельные невзаимодействующие (или слабо взаимодействующие) подсистемы. Отсутствие взаимодействия координат и спина — это отсутствие в гамильтониане слагаемых, которые действуют одновременно на спин и координаты.

В пределе отсутствия взаимодействия, как и для любых других невзаимодействующих подсистем, если волновая функция факторизуется (разлагается на множители, зависящие от отдельных координат) в начальный момент времени, то она остаётся факторизованной и во все последующие моменты времени, причём множители эволюционируют независимо.

Т.е., если гамильтониан представим в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathbf{r}} \otimes \hat{1}_s + \hat{1}_{\mathbf{r}} \otimes \hat{H}_s,$$

где операторы с индексом $\mathbf{r}$ действуют только на координаты частицы, а с индексом s — только на спин, то волновая функция может разлагаться на слагаемые вида

$$\psi(\mathbf{r}, \sigma) = \phi(\mathbf{r}) \cdot \chi(\sigma), \quad i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \hat{H}_{\mathbf{r}} \phi, \quad i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \hat{H}_s \chi.$$

$\phi(\mathbf{r})$ называют *координатной волновой функцией*, а $\chi(\sigma)$ — *спиновой волновой функцией*.

В соответствии с процедурой, описанной выше (15.2.4 «Собственные векторы операторов $\hat{j}_z, \hat{j}^2$ ») мы можем выписать операторы компонент для спина $\frac{1}{2}$

$$\hat{s}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- = \hat{s}_+^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\hat{s}_x = \frac{\hat{s}_+ + \hat{s}_-}{2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hat{s}_+ - \hat{s}_-}{2i} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Базисные состояния с определённым значением σ (проекции на ось z) принято обозначать по-разному:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle = |1\rangle, \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle = |0\rangle. \end{aligned}$$

Последний вариант $|0\rangle$ и $|1\rangle$ обычно применяется в квантовой теории информации, когда спин используется в качестве *квантового бита* (*кубита*).

15.3.1 Матрицы Паули

Пространство эрмитовых матриц 2×2 четырёхмерно: два диагональных элемента вещественны, два комплексных элемента вне главной диагонали комплексно сопряжены друг другу. В качестве базиса в пространстве эрмитовых матриц 2×2 можно выбрать, например, три матрицы $\hat{s}_\alpha$, для спина $\frac{1}{2}$ и единичную матрицу E .

Однако матрицы $\hat{s}_\alpha$ имеют собственные числа $\pm \frac{1}{2}$, что не слишком удобно: удобнее чтобы собственные числа равнялись по модулю единице. Поэтому, вместо спиновых матриц $\hat{s}_\alpha$ вводятся σ -матрицы Паули, отличающиеся от спиновых матриц умножением на 2. Иногда в качестве σ -матрицы номер 0 рассматривают единичную матрицу E :

$$\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z), \quad \sigma_\alpha = 2\hat{s}_\alpha, \quad \alpha \in \{1, 2, 3\}, \quad \sigma_0 = E,$$

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Матрицы Паули могут применяться не только для спинов $\frac{1}{2}$, но и для любых двухуровневых (с двумерным пространством состояний) систем, т.е. для любых *кубитов*. Любая эрмитова матрица 2×2 разлагается по единичной матрице и матрицам Паули с вещественными коэффициентами разложения, а произвольная матрица 2×2 разлагается по тому же базису с комплексными коэффициентами разложения. Если ограничиться матрицами с нулевым следом, то из базиса выкидывается единичная матрица.

При вычислениях с матрицами 2×2 , разложенными по σ -матрицам мы можем не перемножать матриц явно, если воспользуемся *таблицей умножения матриц Паули*.

2-й множитель $\rightarrow$		σ_x	σ_y	σ_z
1-й множитель : σ_x		E	$i\sigma_z$	$-i\sigma_y$
σ_y		$-i\sigma_z$	E	$i\sigma_x$
σ_z		$i\sigma_y$	$-i\sigma_x$	E

Эту же таблицу можно записать в виде одной формулы:

$$\sigma_\alpha \sigma_\beta = E \delta_{\alpha\beta} + i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma, \quad \alpha, \beta, \gamma \in \{1, 2, 3\}. \quad (15.14)$$

С помощью матриц Паули удобно представлять трёхмерные векторы в виде эрмитовых бесследовых матриц 2×2 (предполагается, что компоненты вектора — числа, или операторы не действующие на спиновые переменные, т.е. коммутирующие с операторами спина).

$$(\mathbf{A}, \vec{\sigma}) = A_\alpha \sigma_\alpha = \begin{pmatrix} A_z & A_x - iA_y \\ A_x + iA_y & -A_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_z & A_- \\ A_+ & -A_z \end{pmatrix}.$$

Произведение таких матриц (его легко вычислить по правилу (15.14)) содержит как скалярное, так и векторное произведение:

$$(\mathbf{A}, \vec{\sigma})(\mathbf{B}, \vec{\sigma}) = (\mathbf{A}, \mathbf{B}) + i([\mathbf{A} \times \mathbf{B}], \vec{\sigma}). \quad (15.15)$$

Для единичного вектора $\mathbf{n}$ получаем, что $(\mathbf{n}, \vec{\sigma})^2 = (\mathbf{n}, \mathbf{n})E = E = (\mathbf{n}, \vec{\sigma})^{2k}$, $k = 0, 1, 2, \dots$, т.е. все чётные степени дают единичную матрицу. Соответственно все нечётные степени дают исходную матрицу $(\mathbf{n}, \vec{\sigma})^{2k+1} = (\mathbf{n}, \vec{\sigma}) = \sigma_{\mathbf{n}}$.

Используя это легко записать спиновый оператор поворота вокруг произвольной оси:

$$R_{\mathbf{n}}(\alpha) = e^{i\alpha \hat{s}_{\mathbf{n}}} = e^{i\frac{\alpha}{2} \sigma_{\mathbf{n}}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\alpha/2)^k}{k!} \sigma_{\mathbf{n}}^k = E \underbrace{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\alpha/2)^{2k}}{(2k)!}}_{\cos \frac{\alpha}{2}} + \sigma_{\mathbf{n}} \underbrace{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\alpha/2)^{2k+1}}{(2k+1)!}}_{i \sin \frac{\alpha}{2}},$$

$$R_{\mathbf{n}}(\alpha) = E \cos \frac{\alpha}{2} + i \sigma_{\mathbf{n}} \sin \frac{\alpha}{2} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} + n_z i \sin \frac{\alpha}{2} & n_- i \sin \frac{\alpha}{2} \\ n_+ i \sin \frac{\alpha}{2} & \cos \frac{\alpha}{2} - n_z i \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}.$$

Как мы и ожидали, для полуцелого спина $\frac{1}{2}$, поворот на полный угол 2π соответствует оператору $-E$.

Получившаяся спиновая матрица поворота $R_{\mathbf{n}}(\alpha)$ является матрицей 2×2 , унитарна (как экспонента от эрмитовой матрицы, умноженной на i) и имеет единичный определитель, таким образом

$$R_{\mathbf{n}}(\alpha) \in \text{SU}(2).$$

15.3.2 Кватернионы**

Читатель знакомый с понятием кватернионов должен был почувствовать в предыдущем разделе что-то смутно знакомое, особенно в формуле (15.15), в которой перемешались скалярное и векторное произведение.

Это сходство можно сделать изоморфизмом, если ввести соответствие между матрицами 2×2 и кватернионными единицами:

$$\begin{aligned} E &\rightarrow 1, \\ -i\sigma_x &\rightarrow \mathbf{i}, \\ -i\sigma_y &\rightarrow \mathbf{j}, \\ -i\sigma_z &\rightarrow \mathbf{k}. \end{aligned}$$

Теперь таблица умножения σ -матриц превращается в стандартную таблицу умножения базисных кватернионов:

2-й множитель $\rightarrow$	1	$\mathbf{i}$	$\mathbf{j}$	$\mathbf{k}$
1-й множитель :	1	$\mathbf{i}$	$\mathbf{j}$	$\mathbf{k}$
$\mathbf{i}$	$\mathbf{i}$	-1	$\mathbf{k}$	$-\mathbf{j}$
$\mathbf{j}$	$\mathbf{j}$	$-\mathbf{k}$	-1	$\mathbf{i}$
$\mathbf{k}$	$\mathbf{k}$	$\mathbf{j}$	$-\mathbf{i}$	-1

Кватернион общего вида получается как линейная комбинация базисных с вещественными коэффициентами:

$$A = A_0 + A_x \mathbf{i} + A_y \mathbf{j} + A_z \mathbf{k} = A_0 + \mathbf{A}.$$

При этом A_0 называют скалярной частью кватерниона, а $\mathbf{A} = A_x \mathbf{i} + A_y \mathbf{j} + A_z \mathbf{k}$ — векторной частью.

Кватернионы являются обобщением комплексных чисел, при котором вместо одной мнимой оси вводится трёхмерное пространство. Это пространство изотропно, в том смысле, что собственные вращения в нём не меняют алгебраических соотношений между кватернионами. Более того, любая двумерная плоскость в пространстве кватернионов, содержащая вещественную ось устроена также, как обычная комплексная плоскость.

Для кватернионов определено сложение, вычитание, умножение и взятие обратного элемента (от ненулевых элементов). Причём, поскольку умножение кватернионов некоммукативно, определено два разных деления: левое (умножение на обратный элемент слева) и правое (умножение на обратный элемент справа).

Для кватернионов определяют сопряжённый кватернион, абсолютную величину, обратный элемент

$$\begin{aligned} \bar{A} &= A_0 - \mathbf{A} = -\frac{1}{2} (A + \mathbf{i}A\mathbf{i} + \mathbf{j}A\mathbf{j} + \mathbf{k}A\mathbf{k}), \\ |A|^2 &= A_0^2 + \mathbf{A}^2 = A\bar{A}, \\ A^{-1} &= \frac{\bar{A}}{|A|^2}. \end{aligned}$$

Обратите внимание, в отличие от комплексного сопряжения, кватернионное сопряжение выражается через сложение и умножение, из-за этого над кватернионами не удаётся создать интересной теории аналитических функций (т.к. аналитические

и антианалитические функции совпадают). Таким образом, хотя кватернионы и были придуманы как «обобщённые комплексные числа» в надежде на то, что с их помощью можно будет столь же удобно решать трёхмерное уравнение Лапласа, как в двумерии с помощью аналитических функций, это ожидание не оправдалось.³

Если построить кватернион с произвольными комплексными компонентами (*комплексный кватернион*), то мы потеряем деление — обратный элемент не будет определён не только для нуля, но и для других элементов. Этого и следовало ожидать, т.к. кватернионному умножению мы сопоставили матричное умножение, а кватернионам с произвольными комплексными коэффициентами соответствуют произвольные матрицы 2×2 , в том числе и необратимые.

Векторная часть кватерниона представляется как антиэрмитова матрица 2×2 , таким образом спиновый оператор вращения, с учётом соответствия $i\sigma_{\mathbf{n}} \rightarrow -\mathbf{n}$, естественным образом переписывается как единичный (по модулю) кватернион:

$$R_{\mathbf{n}}(\alpha) = e^{-\frac{\alpha}{2}\mathbf{n}} = \cos \frac{\alpha}{2} - \mathbf{n} \sin \frac{\alpha}{2}, \quad |R_{\mathbf{n}}(\alpha)| = 1.$$

15.3.3 Геометрия чистых состояний кубита**

Состояния квантовой системы определены с точностью до произвольного ненулевого множителя, так что хотя пространство спиновых состояний (или состояний любой другой двухуровневой системы) — это двумерное комплексное пространство $\mathbb{C}^2$, для нумерации физически различных состояний нам не надо задавать два комплексных числа, а достаточно их отношения. Таким образом, любое спиновое состояние, кроме единственного состояния $|\downarrow\rangle$ может быть представлено в виде

$$|\chi\rangle = |\uparrow\rangle + \lambda |\downarrow\rangle, \quad \lambda \in \mathbb{C}.$$

Состояние $|\downarrow\rangle$ соответствует пределу $\lambda \rightarrow \infty$.

Т.е. топологически пространство чистых состояний для спина $\frac{1}{2}$ получается из комплексной плоскости $\mathbb{C}$ добавлением бесконечной точки, и мы получаем сферу Римана $\bar{\mathbb{C}}$.

Оказывается, что в данном случае сфера Римана имеет также хорошую физическую интерпретацию.

Пусть точка $\lambda = x + iy$ откладывается на плоскость (x, y) , как на комплексной плоскости. Как принято в теории функций комплексного переменного, спроецируем точку λ с плоскости (x, y) на единичную сферу, с центром в начале координат. Проекцию будем проводить из южного полюса сферы, т.е. из точки с координатами $(0, 0, -1)$. Такая

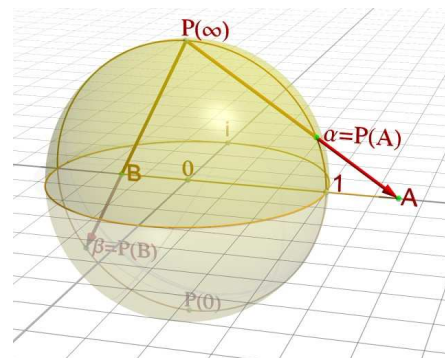


Рис. 15.2: Проекция комплексной плоскости на сферу Римана. Вид снизу в зеркальном отражении.

[Jean-Christophe BENOIST cc W]

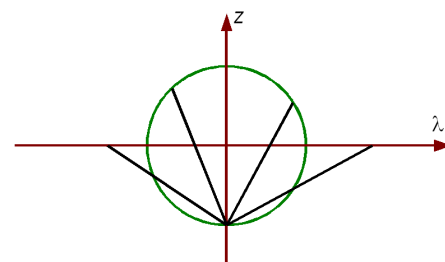


Рис. 15.3: Сечение проекции комплексной плоскости (ось λ) на сферу Римана из южного полюса.

³Кватернионы были придуманы У.Р. Гамильтоном 16 октября 1843 года во время прогулки с женой по берегу Королевского канала в Дублине. Уравнения $\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = \mathbf{ijk} = -1$ были написаны им на камне Брукхемского моста.

проекция даст нам взаимно-однозначное соответствие между точками сферы (кроме южного полюса) и точками комплексной (экваториальной) плоскости⁴ $\mathbb{C}$ (без бесконечной точки). Бесконечная точка на $\bar{\mathbb{C}}$ соответствует южному полюсу сферы Римана.

При этом, как можно легко убедиться, точка на сфере в точности соответствует вектору поляризации $\vec{P} = \langle \vec{\sigma} \rangle$ для спина в состоянии χ :

$$\langle \sigma_x \rangle = \frac{\operatorname{Re} \lambda}{1 + |\lambda|^2}, \quad \langle \sigma_y \rangle = \frac{\operatorname{Im} \lambda}{1 + |\lambda|^2}, \quad \langle \sigma_z \rangle = \frac{1 - |\lambda|^2}{1 + |\lambda|^2}.$$

При стремлении λ к бесконечности $\vec{P}$ стремится к направлению вдоль оси z .

Если мы будем измерять проекцию спина на вектор $\vec{P}$, то мы с вероятностью 1 получим, что спин направлен вдоль $\vec{P}$, и его проекция на $\vec{P}$ равна $+\frac{1}{2}$. Таким образом спин в некотором смысле направлен вдоль $\vec{P}$.

15.3.4 Геометрия смешанных состояний кубита**

Смешанное состояние спина $\frac{1}{2}$ (или для любой другой двухуровневой системы) задаётся матрицей плотности 2×2 . Матрица плотности должна быть эрмитовой, положительно определённой (вероятности положительны) и иметь единичный след (суммарная вероятность равна 1).

Как мы уже упоминали ранее (15.3.1 «Матрицы Паули») любая эрмитова матрица 2×2 разлагается по базису из матриц Паули и единичной матрицы с вещественными коэффициентами. При этом след матриц Паули равен нулю, так что мы можем написать

$$\rho = \frac{E + (\vec{P}, \vec{\sigma})}{2}, \quad \vec{P} = (P_x, P_y, P_z) \in \mathbb{R}^3, \quad |\vec{P}| \leq 1.$$

Коэффициент $\frac{1}{2}$ перед единичной матрицей фиксирован условием $\operatorname{tr} \rho = 1$. Любой вектор является собственным для единичной матрицы с собственным числом 1. Таким образом, собственные векторы матрицы ρ совпадают с собственными векторами матрицы $(\vec{P}, \vec{\sigma})$. Поскольку собственные числа матрицы $(\vec{P}, \vec{\sigma})$ равны $\pm |\vec{P}|$, то собственные числа матрицы ρ имеют вид

$$p_{\pm} = \frac{1 \pm |\vec{P}|}{2} \geq 0.$$

Условие положительности требует, чтобы $|\vec{P}| \leq 1$.

Мы получили, что спиновая матрица плотности параметризуется вектором, лежащим внутри единичной сферы. При этом поверхность сферы соответствует обращению в 1 одного из собственных чисел (другое при этом обращается в нуль), т.е. поверхности сферы соответствуют чистые состояния, как в и предыдущем разделе (15.3.3 «Геометрия чистых состояний спина $\frac{1}{2}$ »).

Для того, чтобы определить физический смысл вектора $\vec{P}$ вычислим среднее $\langle \vec{\sigma} \rangle$ по состоянию ρ .

$$\langle \sigma_{\alpha} \rangle = \operatorname{tr}(\sigma_{\alpha} \rho) = \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\sigma_{\alpha} + \sigma_{\alpha} P_{\beta} \sigma_{\beta}) = \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\delta_{\alpha\beta} E P_{\beta}) = P_{\alpha} \frac{1}{2} \operatorname{tr} E = P_{\alpha}.$$

⁴В нашем случае комплексная плоскость рассекает сферу Римана по экватору, но в литературе иногда сфера Римана касается плоскости одним из полюсов. Различие между такими проекциями — масштабный фактор 2, т.к. в последнем случае плоскость в 2 раза дальше от точки проекции.

Мы использовали формулу (15.14) умножения σ -матриц и тот факт, что след от любой σ -матрицы равен 0.

Таким образом, вектор $\vec{P}$ имеет смысл среднего вектора поляризации по состоянию ρ

$$\vec{P} = \langle \vec{\sigma} \rangle = \text{tr}(\rho \vec{\sigma}).$$

Для чистых состояний (точек на поверхности сферы) это полностью соответствует результатам полученным ранее.

15.4 Спин 1

Всё, что было сказано в начале раздела 15.3 «Спин $\frac{1}{2}$ » о координатных и спиновых волновых функциях применимо и к спину 1, и к любому другому спину до тех пор, пока не используется явно величина спина.

Волновая функция частицы со спином 1 может быть представлена как функция $\psi(\mathbf{r}, \sigma)$ от координат $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ и спиновой переменной (проекция спина на ось z) $\sigma \in \{+1, 0, -1\}$:

$$\psi(\mathbf{r}, \cdot) = \begin{pmatrix} \psi(\mathbf{r}, +1) \\ \psi(\mathbf{r}, 0) \\ \psi(\mathbf{r}, -1) \end{pmatrix} = \psi(\mathbf{r}).$$

Теперь спиновая волновая функция — столбец из трёх строк, а спиновые операторы — матрицы 3×3

В соответствии с процедурой, описанной выше (15.2.4 «Собственные векторы операторов $\hat{j}_z, \hat{j}^2$ ») мы можем выписать операторы компонент для спина 1

$$\begin{aligned} \hat{s}_+ &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- = \hat{s}_+^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \\ \hat{s}_x &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ i\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -i\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & i\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \\ (\mathbf{A}, \vec{s}) &= \begin{pmatrix} +A_z & \frac{A_x - iA_y}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{A_x + iA_y}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{A_x - iA_y}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{A_x + iA_y}{\sqrt{2}} & -A_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +A_z & \frac{A_-}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{A_+}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{A_-}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{A_+}{\sqrt{2}} & -A_z \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Собственные числа проекции спина на любую ось $\hat{s}_{\mathbf{n}} = (\mathbf{n}, \vec{s}) = +1, 0, -1$, так что вводить какие-либо вспомогательные матрицы наподобие σ -матриц Паули нет причин.⁵

Базисные состояния с определённым значением σ (проекция на ось z) принято обозначать по-разному:

$$|1, +1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

⁵ σ -матрицы — исключительная особенность двумерия и для спинов отличных от $\frac{1}{2}$ их пытаются писать по принципу $\sigma = 2\hat{s}$ только студенты, начинающие сдавать задания по квантовой механике. К моменту экзамена это обычно проходит.

15.4.1 Вращения для спина 1 и для векторов

Оператор поворота для спина 1, как и для любого другого момента задаётся формулой

$$R_{\mathbf{n}}(\varphi) = e^{i\varphi \hat{s}_{\mathbf{n}}}.$$

Поскольку собственные числа $\hat{s}_{\mathbf{n}}$ равны $+1, 0, -1$, их третья степень, как и для σ -матриц даёт исходную матрицу. Таким образом,

$$s_{\mathbf{n}}^3 = s_{\mathbf{n}} \Rightarrow \forall n = 0, 1, 2, \dots \quad s_{\mathbf{n}}^{2n+2} = s_{\mathbf{n}}^2 \neq s_{\mathbf{n}}^0 = E, \quad s_{\mathbf{n}}^{2n+1} = s_{\mathbf{n}}. \quad (15.16)$$

Аналогичные соотношения мы получали ранее, для генераторов матриц поворота в трёхмерном пространстве (15.2). В этом состоит специфика спина 1.

Разлагая экспоненту в ряд получаем

$$\begin{aligned} R_{\mathbf{n}}(\varphi) &= e^{i\varphi \hat{s}_{\mathbf{n}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\varphi \hat{s}_{\mathbf{n}})^n}{n!} = E + \underbrace{\hat{s}_{\mathbf{n}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\varphi)^{2n+1}}{(2n+1)!}}_{i \sin \varphi} + \underbrace{\hat{s}_{\mathbf{n}}^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\varphi)^{2n}}{(2n)!}}_{(\cos \varphi - 1)} \\ R_{\mathbf{n}}(\varphi) &= E + \hat{s}_{\mathbf{n}} i \sin \varphi + \hat{s}_{\mathbf{n}}^2 (\cos \varphi - 1). \end{aligned}$$

$$\hat{s}_{\mathbf{n}} = \begin{pmatrix} +n_z & \frac{n_-}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{n_+}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{n_-}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{n_+}{\sqrt{2}} & -n_z \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_{\mathbf{n}}^2 = \begin{pmatrix} \frac{1+n_z^2}{2} & \frac{n_z n_-}{\sqrt{2}} & \frac{n_-^2}{2} \\ \frac{n_z n_+}{\sqrt{2}} & 1 - n_z^2 & \frac{-n_z n_-}{\sqrt{2}} \\ \frac{n_+^2}{2} & \frac{-n_z n_+}{\sqrt{2}} & \frac{1+n_z^2}{2} \end{pmatrix}.$$

Выше (см. 15.1.1 «Генераторы вращений») мы уже получали трёхмерное неприводимое представление группы вращений с помощью обычных ортогональных матриц поворотов. Вернулись ли мы к тому же самому представлению в иной форме, или получили что-то новое?

Если мы следующим образом свяжем базис состояний $\{|1, m\rangle\}_{m=-1}^{+1}$ с базисом единичных векторов вдоль декартовых осей координат $\{\mathbf{e}_{\alpha}\}_{\alpha=1}^3$, то матрицы j_{α} , генерирующие ортогональные матрицы поворотов перейдут в матрицы компонент $\hat{s}_{\alpha}$ спина 1:

$$|1, +1\rangle = \frac{-\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y}{\sqrt{2}} = -\frac{\mathbf{e}_+}{\sqrt{2}}, \quad |1, 0\rangle = \mathbf{e}_z, \quad |1, -1\rangle = \frac{\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y}{\sqrt{2}} = \frac{\mathbf{e}_-}{\sqrt{2}}. \quad (15.17)$$

$$\mathbf{e}_x = \frac{-|1, +1\rangle + |1, -1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad \mathbf{e}_y = \frac{i|1, +1\rangle + i|1, -1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad \mathbf{e}_z = |1, 0\rangle. \quad (15.18)$$

Таким образом, представление группы вращений для спина 1 с точностью до комплексной замены базиса совпадает с привычным нам из стереометрии и классической механики векторным представлением группы вращений, когда повороты отождествляются с матрицами собственных вращений, действующими на векторы из $\mathbb{R}^3$.

15.4.2 Спин и поляризация фотона

Фотон — квант электромагнитного поля. Как мы обсуждали в разделе 12.9 «Квантованные поля (ϕ^*)», при квантовании электромагнитного поля в ящике

с периодическими граничными условиями, каждой моде колебаний, характеризующейся волновым числом $\mathbf{k}$ и поляризацией σ ставится в соответствие гармонический осциллятор с частотой равной частоте моды. Число заполнения данного осциллятора рассматривается как число фотонов с данными $\mathbf{k}$ и σ .

Каков спин фотона? Этот вопрос эквивалентен вопросу о том, как переменная, характеризующая фотон, но не связанная с его движением (т.е. поляризация) преобразуются при вращениях.

Поляризация σ электромагнитной волны описывается с помощью вектора поляризации $\mathbf{e}_\sigma$. Как мы установили выше (15.17), (15.18) вектор преобразуется по представлению спина 1. Т.е. фотон — векторная частица — частица со спином 1.

Однако у частицы со спином 1 должно быть 3 поляризации, а у фотона — только 2. Какая поляризация пропала?

Рассмотрим одну конкретную моду колебаний. Пусть волновой вектор $\mathbf{k}$ (и импульс $\hbar\mathbf{k}$) направлен по оси z . В соответствии с уравнениями (15.18) спиновые состояния соответствуют следующим поляризациям:

- $|1, +1\rangle = \frac{-\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y}{\sqrt{2}}$ — спин направлен вдоль импульса — правая круговая поляризация (вращение поля связано с направлением $\mathbf{k}$ правым винтом);
- $|1, -1\rangle = \frac{\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y}{\sqrt{2}}$ — спин направлен против импульса — левая круговая поляризация (вращение поля связано с направлением $\mathbf{k}$ левым винтом);
- $|1, 0\rangle = \mathbf{e}_z$ — проекция спина на импульс равна нулю — продольная поляризация (поле колеблется вдоль импульса).

Однако электромагнитная волна — поперечная волна и продольная поляризация для неё отсутствует. Если мы задаём поляризацию электромагнитной волны направлением вектора $\mathbf{E}$, то продольная поляризация отсутствует с самого начала, а если направлением векторного потенциала $\mathbf{A}$, то вклад в поле продольной части $\mathbf{A}_\parallel$ в точности компенсируется вкладом скалярного потенциала φ . Так и для квантованного электромагнитного поля (в зависимости от используемого формализма): продольная поляризация либо отсутствует с самого начала, либо нефизична (не даёт вклада).

Такая ситуация является типичной для любых безмассовых (движущихся со скоростью света) частиц: вне зависимости от спина имеется две поляризации: по часовой стрелке (проекция спина на импульс $+s$) и против часовой стрелки (проекция спина на импульс $-s$). Это связано с тем, что мы не можем выбрать для такой частицы систему покоя, в любой системе отсчёта есть выделенное направление (вдоль импульса), и симметрия оказывается ниже, чем стандартная $SU(2)$. Иногда для таких частиц избегают применять слово спин и говорят *спиральность*.

15.5 Сложение моментов*

Пусть система состоит из двух подсистем, для каждой из которых определены операторы момента импульса $\hat{j}_1$ и $\hat{j}_2$. Пусть также для каждой из подсистем определён квадрат момента импульса ($j_1(j_1 + 1)$ и $j_2(j_2 + 1)$ соответственно). Для системы мы можем ввести базис, состоящий из состояний вида

$$|m_1\rangle|m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle.$$

(В обозначении $|m_1\rangle|m_2\rangle$ мы опустили фиксированные квантовые числа j_1 и j_2 .)

Таким образом, мы имеем базис собственных векторов для операторов $\hat{j}_1^2, \hat{j}_{1z}, \hat{j}_2^2, \hat{j}_{2z}$. Наша задача — построить базис собственных векторов для операторов суммарного момента $\hat{J}^2 = (\hat{\vec{j}}_1 + \hat{\vec{j}}_2)^2$ и $\hat{J}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$.

(*) С точки зрения теории представлений, мы имеем произведение двух неприводимых представлений группы $SU(2)$, отвечающих моментам j_1 и j_2 , и нам надо разложить произведение в сумму неприводимых представлений.

Проще всего с оператором $\hat{J}_z$. Базисные состояния $|m_1\rangle|m_2\rangle$ для него уже являются собственными:

$$\hat{J}_z|m_1\rangle|m_2\rangle = (\hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z})|m_1\rangle|m_2\rangle = \underbrace{(m_1 + m_2)}_M|m_1\rangle|m_2\rangle = M|m_1\rangle|m_2\rangle.$$

Если отложить по осям координат квантовые числа m_1 и m_2 , то новое квантовое число M надо будет откладывать по оси, направленной по диагонали (см. рис.15.4). При этом, M пробегает с шагом 1 все значения от $-(j_1 + j_2)$ до $j_1 + j_2$. Кратность различных значений M (число точек, на тонких линиях поперёк оси M на рис.15.4) меняется от 1 (при $M = \pm(j_1 + j_2)$) до $2j_1 + 1$, где j_1 — наименьший из двух моментов.

Начнём с состояния с максимальным значением проекции момента. Такое состояние только одно: $|j_1\rangle|j_2\rangle$. Под действием оператора $\hat{J}_+ = \hat{j}_{1+} + \hat{j}_{2+}$ оно обнуляется

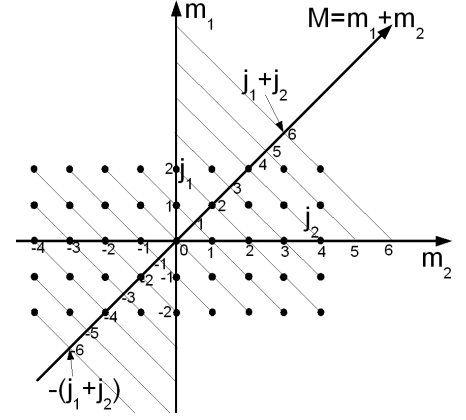


Рис. 15.4: Связь M с m_1 и m_2 .

$$\hat{J}_+|j_1\rangle|j_2\rangle = (\hat{j}_{1+} + \hat{j}_{2+})|j_1\rangle|j_2\rangle = \underbrace{(\hat{j}_{1+}|j_1\rangle)}_0|j_2\rangle + |j_1\rangle\underbrace{(\hat{j}_{2+}|j_2\rangle)}_0 = 0,$$

значит в этом состоянии проекция момента достигает максимальной величины и мы можем записать первый вектор нового базиса:

$$|\underbrace{j_1 + j_2}_J, \underbrace{j_1 + j_2}_M\rangle = |j_1\rangle|j_2\rangle.$$

Действуя $2(j_1 + j_2)$ раз на состояния $|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle$ понижающим оператором $\hat{J}_- = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ мы можем найти остальные состояния, для которых $J = j_1 + j_2$, а M меняется от $-J$ до $+J$ с шагом 1. ((*): Тем самым мы выделяем первое неприводимое представление, отвечающее моменту $j_1 + j_2$.)

В частности однократное применение понижающего оператора даёт:

$$\begin{aligned} \hat{J}_-|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle &= \sqrt{2(j_1 + j_2)}|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \\ &= (\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-})|j_1\rangle|j_2\rangle = (\hat{j}_{1-}|j_1\rangle)|j_2\rangle + |j_1\rangle(\hat{j}_{2-}|j_2\rangle) = \\ &= \sqrt{2j_1}|j_1 - 1\rangle|j_2\rangle + \sqrt{2j_2}|j_1\rangle|j_2 - 1\rangle, \end{aligned}$$

$$|\underbrace{j_1 + j_2}_J, \underbrace{j_1 + j_2 - 1}_M\rangle = \frac{\sqrt{j_1}|j_1 - 1\rangle|j_2\rangle + \sqrt{j_2}|j_1\rangle|j_2 - 1\rangle}{\sqrt{j_1 + j_2}}$$

У нас имеется два линейно независимых состояния, для которых $M = j_1 + j_2 - 1$ (см. рис.15.4). Если из тех же состояний составить комбинацию, ортогональную состоянию $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$, то мы получим

$$|\underbrace{j_1 + j_2 - 1}_J, \underbrace{j_1 + j_2 - 1}_M\rangle = \frac{\sqrt{j_2}|j_1 - 1\rangle|j_2\rangle - \sqrt{j_1}|j_1\rangle|j_2 - 1\rangle}{\sqrt{j_1 + j_2}}.$$

То, что в данном состоянии $J = M$ проверяется с помощью повышающего оператора:

$$\hat{J}_+(\sqrt{j_2}|j_1 - 1\rangle|j_2\rangle - \sqrt{j_1}|j_1\rangle|j_2 - 1\rangle) = \underbrace{\sqrt{2j_1j_2}|j_1\rangle|j_2\rangle}_{j_1+|\dots\rangle} - \underbrace{\sqrt{2j_1j_2}|j_1\rangle|j_2\rangle}_{j_2+|\dots\rangle} = 0.$$

Из состояния $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$ с помощью понижающего оператора $\hat{J}_-$ мы получаем остальные состояния с $J = j_1 + j_2 - 1$ и другими M .

Таким образом, мы из соображений ортогональности находим все состояния вида $|J, J\rangle$ при $J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$. С помощью оператора $\hat{J}_-$ мы получаем все состояния $|J, M\rangle$, для которых $M < J$. Общее число состояний нового базиса такое же как у старого:

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = \underbrace{(j_1 + j_2 - |j_1 - j_2| + 1)}_{\text{число слагаемых}} \underbrace{(j_1 + j_2 + |j_1 - j_2| + 1)}_{\text{среднее слагаемое}} = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1).$$

(*) Таким образом, мы разлагаем произведение неприводимых представлений группы вращений отвечающих моментам j_1 и j_2 в сумму неприводимых представлений, отвечающих моментам $j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$.

Коэффициенты разложения векторов нового базиса по старому

$$\langle m_1, m_2 | J, M \rangle$$

называются *коэффициентами векторного сложения* или *коэффициентами Клебша–Гордана*, они образуют унитарную матрицу, т.к. описывают ортонормированную замену координат. Как и всякие скалярные произведения ортонормированных волновых функций, коэффициенты Клебша–Гордана задают амплитуды перехода между соответствующими состояниями.

15.5.1 Сложение спинов $\frac{1}{2} + \frac{1}{2}$

Проиллюстрируем процедуру сложения моментов импульса на простейшем случае двух спинов $\frac{1}{2}$.

В соответствии с общей схемой, начнём с состояния с максимальной проекцией момента:

$$|1, 1\rangle = |+\rangle|+\rangle.$$

$$\hat{S}_-|1, 1\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle = (\hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-})|+\rangle|+\rangle = \underbrace{(\hat{s}_{1-}|+\rangle)}_{|-\rangle}|+\rangle + |+\rangle\underbrace{(\hat{s}_{2-}|+\rangle)}_{|-\rangle} = |-\rangle|+\rangle + |+\rangle|-\rangle,$$

$$|1, 0\rangle = \frac{|-\rangle|+\rangle + |+\rangle|-\rangle}{\sqrt{2}}.$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_-|1, 0\rangle &= \sqrt{2}|1, -1\rangle = (\hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-}) \frac{|-\rangle|+\rangle + |+\rangle|-\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|-\rangle(\hat{s}_{2-}|+\rangle) + (\hat{s}_{1-}|+\rangle)|-\rangle}{\sqrt{2}} \\ |1, -1\rangle &= |-\rangle|-\rangle.\end{aligned}$$

Состояние $|0, 0\rangle$ получаем как линейную комбинацию состояний $|+\rangle|-\rangle$ и $|-\rangle|+\rangle$ (состояния с нулевой проекцией спина), ортогональную состоянию $|1, 0\rangle$:

$$|0, 0\rangle = \frac{|-\rangle|+\rangle - |+\rangle|-\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Все состояния с суммарным спином 1 оказались чётными, относительно перестановки спинов, а состояние с суммарным спином 0 — нечётным.

Если спины относятся к двум тождественным частицам (фермионам, т.к. спин $\frac{1}{2}$), то волновая функция должна быть нечётной (менять знак) относительно перестановки двух частиц:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) = -\psi(\mathbf{r}_2, \sigma_2; \mathbf{r}_1, \sigma_1).$$

Мы можем отделить спиновую волновую функцию от координатной, если волновая функция факторизуется:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) = \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \chi(\sigma_1, \sigma_2).$$

Условие нечётности принимает вид

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \chi(\sigma_1, \sigma_2) = -\phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \cdot \chi(\sigma_2, \sigma_1).$$

Таким образом, если

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \pm \chi(\sigma_2, \sigma_1)$$

(«+» для спина 1, «-» для спина 0) то

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mp \phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1).$$

Т.е. в данном случае чётность координатной части волновой функции двух тождественных частиц соответствует чётности суммарного спина («+» для спина 0, «-» для спина 1). Подробнее этот вопрос разобран в следующем разделе

15.5.2 Чётность при сложении двух одинаковых спинов

Пусть складываются два одинаковых момента импульса $s_1 = s_2 = s$.

Введём оператор перестановки спинов $\hat{P}_s$:

$$\hat{P}_s|m_1\rangle|m_2\rangle = |m_2\rangle|m_1\rangle.$$

Оператор обратим и сохраняет скалярное произведение, т.е. он унитарен $\hat{P}_s^\dagger = \hat{P}_s^{-1}$. Кроме того, оператор совпадает со своим обратным $\hat{P}_s = \hat{P}_s^{-1}$, следовательно он одновременно эрмитов. Унитарный эрмитов оператор может иметь собственные числа только ± 1 .

Состояние с максимальной проекцией момента оказывается чётным, относительно их перестановки:

$$|2s, 2s\rangle = |s\rangle|s\rangle.$$

Оператор $\hat{S}_- = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-}$ переводит чётные состояния снова в чётные, а нечётные — в нечётные, т.е. $\hat{S}_-$ сохраняет чётность:

$$[\hat{S}_-, \hat{P}_s] = 0.$$

Таким образом, все состояния с максимальным спином

$$|2s, M\rangle, \quad M = -s, \dots, +s$$

оказываются чётными.

Состояние с суммарным спином $2s - 1$ строится как ортогональное к состоянию

$$|2s, 2s - 1\rangle = \frac{|s - 1\rangle|s\rangle + |s\rangle|s - 1\rangle}{\sqrt{2}},$$

т.е.

$$|2s - 1, 2s - 1\rangle = \frac{|s - 1\rangle|s\rangle - |s\rangle|s - 1\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Таким образом, состояние $|2s - 1, 2s - 1\rangle$ оказалось нечётным. Поскольку $\hat{S}_-$ сохраняет чётность, все состояния

$$|2s - 1, M\rangle, \quad M = -s + 1, \dots, +s - 1$$

оказываются нечётными.

Вообще, из того, что $\hat{S}_-$ сохраняет чётность следует, что все состояния с одинаковым суммарным спином имеют одинаковую чётность (если чётность определена).

Покажем по индукции, что и далее чётные и нечётные состояния будут чередоваться по мере уменьшения суммарного спина.

Предположим, что для наибольших K значений спина ($2s$ до $2s - K + 1$) чётность чередуется (для $K = 1$ мы это уже доказали)

$$\hat{P}_s|2s - k, M\rangle = (-1)^k|2s - k, M\rangle, \quad k = 0, \dots, K - 1.$$

Обозначим $\mathcal{H}_K$ ($K = 0, \dots, 2s$) — $(K + 1)$ -мерное подпространство состояний, для которых $M = 2s - K$.

Состояние $|2s - K, 2s - K\rangle$ находится из условия ортогональности состояниям $|S, 2s - K\rangle$ ($S = 2s, \dots, 0$).

1) Покажем, что состояние $|2s - K, 2s - K\rangle$ должно иметь определённую чётность.

$$\langle S, 2s - K | \hat{P}_s | 2s - K, 2s - K \rangle = \pm \langle S, 2s - K | 2s - K, 2s - K \rangle = 0, \quad S = 2s, \dots, 2s - K + 1.$$

Состояние $\hat{P}_s|2s - K, 2s - K\rangle$ ортогонально K базисным векторам из $K + 1$, таким образом оно обязано быть пропорционально оставшемуся базисному вектору $|2s - K, 2s - K\rangle$, т.е. оно имеет определённую чётность.

2) Вычислим размерность подпространства чётных состояний $\mathcal{H}_K^+ \subset \mathcal{H}_K$. В подпространстве $\mathcal{H}_K$ имеется $K + 1$ базисное независимое состояние вида $|m_1\rangle|m_2\rangle$ ($m_1 + m_2 = M = 2s - K$). Линейно независимые состояния вида

$$|m_1\rangle|m_2\rangle + \hat{P}_s|m_1\rangle|m_2\rangle = |m_1\rangle|m_2\rangle + |m_2\rangle|m_1\rangle$$

образуют базис в подпространстве чётных состояний. Состояния, отличающиеся перестановкой m_1 и m_2 попарно совпадают, так что

$$\dim \mathcal{H}_K^+ = \left[\frac{K}{2} \right] + 1,$$

где квадратные скобки обозначают взятие целой части.

Для подпространства нечётных состояний $\mathcal{H}_K^- \subset \mathcal{H}_K$

$$\dim \mathcal{H}_K^- = K - \left[\frac{K}{2} \right].$$

3) Покажем, что чётность состояния $|2s - K, 2s - K\rangle$ будет $(-1)^K$. У нас уже имеется $\left[\frac{K-1}{2} \right] + 1$ чётных и $K - 1 - \left[\frac{K-1}{2} \right]$ нечётных состояний полученных с помощью понижающего оператора $\hat{S}_-$ из состояний $\mathcal{H}_{K-1}^\pm$. Чтобы получить правильные размерности пространств $\mathcal{H}_K^\pm$ нам надо чтобы состояние $|2s - K, 2s - K\rangle$ имело подходящую чётность. Если K нечётно, то нам надо добавить одно нечётное состояние. Если K чётно, то надо добавить одно чётное состояние.

С учётом того, что оператора $\hat{S}_-$ сохраняет чётность, получаем, что чётность состояния $|2s - K, M\rangle$ равна $(-1)^K$.

Тождественные частицы

Если рассмотренные выше частицы со спином s являются тождественными, то

$$\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) = (-1)^{2s} \psi(\mathbf{r}_2, \sigma_2; \mathbf{r}_1, \sigma_1).$$

Мы можем отделить спиновую функцию от координатной, если волновая функция факторизуется:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) = \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \chi(\sigma_1, \sigma_2).$$

Мы только что определили чётность спиновой волновой функции, при сложении двух спинов s :

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = (-1)^K \chi(\sigma_2, \sigma_1) = (-1)^{2s-S} \chi(\sigma_2, \sigma_1).$$

Таким образом, чётность координатной волновой функции определяется суммарным спином системы из двух тождественных частиц:

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (-1)^S \phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1).$$

15.5.3 Сложение моментов $j + \frac{1}{2}$

При сложении моментов j и $\frac{1}{2}$ суммарный момент пробегает два значения

$$J = j \pm \frac{1}{2}.$$

$$|j + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}\rangle = |j\rangle|+\rangle$$

Действуя на это равенство понижающим оператором $\hat{J}_- = \hat{j}_- + \hat{s}_-$ получаем

$$\sqrt{2j+1}|j + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{2j}|j - 1\rangle|+\rangle + |j\rangle|-\rangle$$

$$|j + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}\rangle = \frac{\sqrt{2j}|j-1\rangle|+\rangle + |j\rangle|-\rangle}{\sqrt{2j+1}}.$$

Из ортогональности находим

$$|j - \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}\rangle = \frac{|j-1\rangle|+\rangle - \sqrt{2j}|j\rangle|-\rangle}{\sqrt{2j+1}}.$$

Остальные состояния находятся действием оператора $\hat{J}_-^N$ на состояния $|j + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}\rangle$ и $|j - \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}\rangle$. Поскольку для спина $\frac{1}{2}$ выполняется условие $\hat{s}_-^2 = 0$, от бинома Ньютона остаются только два первых члена:

$$\hat{J}_-^N = (\hat{j}_- + \hat{s}_-)^N = \hat{j}_-^N + N\hat{j}_-^{N-1}\hat{s}_- = (\hat{j}_- + N\hat{s}_-)\hat{j}_-^{N-1}.$$

$$\begin{aligned} C|j + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2} - N\rangle &= \hat{J}_-^N|j + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}\rangle = (\hat{j}_- + N\hat{s}_-)\hat{j}_-^{N-1}|j\rangle|+\rangle = \\ &= C'(\hat{j}_- + N\hat{s}_-)|j - N + 1\rangle|+\rangle = C'(\sqrt{(2j - N + 1)N}|j - N\rangle|+\rangle + |j - N + 1\rangle|-\rangle). \end{aligned}$$

Нормируя на единицу (с учётом того, что $C, C' > 0$) получаем

$$|j + \frac{1}{2}, \underbrace{j + \frac{1}{2} - N}_M\rangle = \frac{\sqrt{(2j - N + 1)N}|j - N\rangle|+\rangle + |j - N + 1\rangle|-\rangle}{\sqrt{(2j - N + 1)N + 1}}.$$

Аналогично (либо из ортогональности) получаем

$$|j - \frac{1}{2}, \underbrace{j + \frac{1}{2} - N}_M\rangle = \frac{|j - N\rangle|+\rangle - \sqrt{(2j - N + 1)N}|j - N + 1\rangle|-\rangle}{\sqrt{(2j - N + 1)N + 1}}.$$

15.5.4 Сложение моментов 1 + 1

Суммарный момент пробегает значения 2, 1, 0. Состояния для моментов 2 и 0 чётные, а для момента 1 нечётные.

Процедура получения новых базисных состояний полностью стандартная. Выкладки облегчаются тем, что для момента 1 ненулевой множитель при действии оператором $\hat{j}_-$ всегда одинаков: $\hat{j}_-|m\rangle = \sqrt{2}|m-1\rangle$ при $m = 1, 0$.

Сделав эти замечания сразу (выкладки вполне можно проделать в уме) выпи-

шем новый базис:

$$\begin{aligned}
 |2, 2\rangle &= |1\rangle|1\rangle, \\
 |2, 1\rangle &= \frac{|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle}{\sqrt{2}}, \\
 |2, 0\rangle &= \frac{|-1\rangle|1\rangle + 2|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|-1\rangle}{\sqrt{6}}, \\
 |2, -1\rangle &= \frac{|-1\rangle|0\rangle + |0\rangle|-1\rangle}{\sqrt{2}}, \\
 |2, -2\rangle &= |-1\rangle|-1\rangle, \\
 |1, 1\rangle &= \frac{|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle}{\sqrt{2}}, \\
 |1, 0\rangle &= \frac{|-1\rangle|1\rangle - |1\rangle|-1\rangle}{\sqrt{2}}, \\
 |1, -1\rangle &= \frac{|-1\rangle|0\rangle - |0\rangle|-1\rangle}{\sqrt{2}}, \\
 |0, 0\rangle &= \frac{|-1\rangle|1\rangle - |0\rangle|0\rangle + |1\rangle|-1\rangle}{\sqrt{3}}.
 \end{aligned}$$

Глава 16

Задача двух тел

Как и в классической теоретической механике, в квантовой механике ставится и решается *задача двух тел*. В этой задаче изучается движение двух точечных частиц, взаимодействие которых задаётся потенциалом $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, зависящим только от расстояний между частицами $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Соответствующий квантовый гамильтониан совпадает с классическим с точностью до шляпок:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (16.1)$$

В случае электрона и атомного ядра, взаимодействующих по закону Кулона $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = -\frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$, мы получаем задачу об атоме водорода или водородоподобном ионе (в нерелятивистском пределе, без учёта спинов частиц и их размеров).

Как мы увидим, задача двух тел в квантовой механике и в классической решается во многом аналогичными методами, поскольку обе задачи имеют практически одинаковые симметрии, а симметриям соответствуют законы сохранения, которые позволяют проводить разделение переменных как в классическом, так и в квантовом случае.

16.1 Законы сохранения

Перечислим законы сохранения, которые могут возникать в задаче двух тел.

- Закон сохранения энергии выполняется поскольку гамильтониан не зависит от времени.
- Закон сохранения суммарного импульса выполняется поскольку гамильтониан не меняется при сдвиге системы как целого.
- Закон сохранения суммарного орбитального момента импульса выполняется поскольку гамильтониан не меняется при повороте системы как целого.
- Закон сохранения пространственной чётности выполняется поскольку гамильтониан не меняется при зеркальном отражении.
- Для специальных видов потенциала ($U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \frac{k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2}{2}$ — гармонический осциллятор, $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = -\frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$ — кулоновский потенциал) могут возни-

кать дополнительные симметрии, законы сохранения и соответствующее им вырождение уровней энергии (часто называемое «случайным»).

¹

- Если частицы имеют спин, то при гамильтониане (16.1), который не действует на какие-либо спины, спин каждой частицы сохраняется. В этом случае спин влияет только на кратности вырождения уровней, а для тождественных частиц см. также следующий пункт.
- Для двух тождественных частиц система должна быть симметричной относительно их перестановки. При этом соответствующая чётность должна быть $+1$ (волновая функция с учётом спинов при перестановке частиц не меняется) для бозонов и -1 (волновая функция с учётом спинов при перестановке частиц меняет знак) для фермионов.

16.2 Сведение к задаче одного тела

Как и в классической механике мы можем разделить переменные, расписав энергию (гамильтониан) через движение центра масс и относительное движение частиц. Соответствующие выкладки с точностью до шляпок такие же как в классике.

Суммарный импульс и суммарная масса системы, радиус-вектор центра масс:

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2, \quad M = m_1 + m_2, \quad \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 m_1 + \mathbf{r}_2 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Относительный импульс и приведённая масса системы, относительный радиус-вектор:

$$\hat{\mathbf{p}} = \underbrace{\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_1}{m_1} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_2}{m_2} \right)}_{\mathbf{v}_{\text{отн.}}} \underbrace{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}}_{\mu} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1 m_2 - \hat{\mathbf{p}}_2 m_1}{m_1 + m_2}, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

Легко видеть, что для новых переменных выполняются канонические коммутационные соотношения:

$$[\hat{R}_\alpha, \hat{P}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}, \quad [\hat{r}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}, \quad [\hat{R}_\alpha, \hat{p}_\beta] = [\hat{r}_\alpha, \hat{P}_\beta] = [\hat{R}_\alpha, \hat{r}_\beta] = [\hat{p}_\alpha, \hat{P}_\beta] = 0.$$

Также легко проверить, что замена $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \rightarrow (\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{p}, \mathbf{P})$ сохраняет объём в координатном и импульсном пространстве. Покажем это для x -компонент:

$$\frac{D(r_x, R_x)}{D(r_{1x}, r_{2x})} = \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ \frac{m_1}{m_1+m_2} & \frac{m_2}{m_1+m_2} \end{vmatrix} = 1, \quad \frac{D(p_x, P_x)}{D(p_{1x}, p_{2x})} = \begin{vmatrix} \frac{m_2}{m_1+m_2} & \frac{-m_1}{m_1+m_2} \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 1.$$

Это позволяет записывать волновые функции в новых переменных не думая об элементах объёма, просто подставляя в старые волновые функции выражения старых переменных через новые.

¹На самом деле такие законы сохранения обеспечиваются замкнутостью классических траекторий (эллипсов) при финитном движении. В случае общего положения вместо замкнутого эллипса классическая частица будет рисовать «розочку» (прецессия перигелия).

В новых переменных гамильтониан (16.1) переписывается так (проверку, полностью аналогичную классическому случаю предоставляем читателю)

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(|\mathbf{r}|)}_{\hat{H}_1} + \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M}}_{\hat{H}_0}. \quad (16.2)$$

Гамильтониан распался на два члена, один из которых $\hat{H}_0$ действует только на движение центра масс, а другой $\hat{H}_1$ — только на относительно движение частиц. Таким образом, мы представили систему из двух взаимодействующих частиц, как объединение двух не взаимодействующих подсистем: движение центра масс и относительное движение частиц.

Это позволяет провести разделение переменных. Если в начальный момент времени волновая функция может быть записана в виде

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi_1(\mathbf{r}) \cdot \psi_0(\mathbf{R}),$$

то поскольку каждый член гамильтониана действует только на свой множитель

$$\underbrace{(\hat{H}_1 + \hat{H}_0)}_{\hat{H}} \psi_1 \cdot \psi_0 = (\hat{H}_1 \psi_1) \cdot \psi_0 + \psi_1 \cdot (\hat{H}_0 \psi_0),$$

то и в последующие моменты времени волновая функция разлагается на два множителя, каждый из которых эволюционирует сам по себе:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \hat{H}_1 \psi_1, \quad i\hbar \frac{\partial \psi_0}{\partial t} = \hat{H}_0 \psi_0.$$

Мы свели задачу двух тел к двум задачам:

- Задача о свободном движении частицы массы M описывает движение центра масс.
- Задача о движении частицы массы μ в потенциале $U(|\mathbf{r}|)$ описывает относительное движение частиц.

Если мы ищем энергетический спектр системы двух тел, то собственные состояния могут искажаться в виде произведений собственных состояний для $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_0$:

$$\hat{H} \psi_1 \psi_0 = (E_1 + E_0) \psi_1 \psi_0, \quad \hat{H}_1 \psi_1 = E_1 \psi_1, \quad \hat{H}_0 \psi_0 = E_0 \psi_0.$$

Для свободной частицы (движения центра масс) собственные состояния могут быть заданы, например, волнами де Бройля:

$$\psi_{0\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad E_{0\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M}.$$

Задачу одного тела в центральном поле $U(|\mathbf{r}|)$ мы рассмотрим в следующих разделах.

16.3 Сведение к задаче о радиальном движении

Теперь мы рассматриваем гамильтониан для относительного движения частиц

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(|\mathbf{r}|). \quad (16.3)$$

Обезразмеренный орбитальный момент импульса имеет вид

$$\hat{\mathbf{l}} = \frac{1}{\hbar} [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}].$$

В силу сферической симметрии орбитальный момент сохраняется, а значит мы имеем три взаимно коммутирующих оператора, которые могут быть одновременно приведены к диагональному виду:

$$\hat{l}^2, \quad \hat{l}_z, \quad \hat{H}_1.$$

Далее нам удобно перейти к сферическим координатам, потому, что в них повороты влияют только на углы θ и φ , оставляя радиальную координату r неизменной и позволяя разделить переменные. Гамильтониан $\hat{H}_1$ в координатном представлении имеет вид

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + U(|\mathbf{r}|).$$

Лапласиан в произвольных криволинейных координатах имеет вид

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{|g|}} \sum_{ab} \frac{\partial}{\partial x^a} \sqrt{|g|} g^{ab} \frac{\partial}{\partial x^b},$$

где g^{ab} — обратный метрический тензор (метрический тензор удобно выражается через элемент длины dl)

$$\sum_b g^{ab} g_{bc} = \delta_c^a = \begin{cases} 1, & a = c \\ 0, & a \neq c \end{cases}, \quad dl^2 = \sum_{ab} g_{ab} dx^a dx^b,$$

а $\sqrt{|g|} d^3x$ — инвариантный элемент объёма, который выражается через определитель метрического тензора:

$$g = \det(g_{ab}).$$

Метрический тензор для сферических координат мы уже вводили ранее (15.5). Лапласиан в сферических координатах удобно записывается через оператор $\hat{l}^2$:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \underbrace{\left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]}_{\Delta_{\theta\varphi} = -\hat{l}^2}.$$

В гамильтониане из кинетической энергии выделяется центробежный член, полностью аналогичный классическому $\frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2}$:

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \underbrace{\frac{\hbar^2 \hat{l}^2}{2\mu r^2}}_{\text{центробеж. энерг.}} + U(r).$$

Мы ищем общие собственные функции для операторов $\hat{l}^2$ и $\hat{H}_1$. Поскольку $\hat{l}^2$ действует только на угловые переменные будем искать волновую функцию в виде

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \psi_1(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y_l(\theta, \varphi),$$

где Y_l — собственная функция оператора $\hat{l}^2$

$$\hat{l}^2 Y_l = l(l+1)Y_l.$$

Будет ли Y_l также собственной функцией оператора $\hat{l}_z$ нам пока (пока не нарушается сферическая симметрия) совершенно не важно, но желающие могут заменить Y_l на Y_{lm} потребовав

$$\hat{l}_z Y_{lm} = m Y_{lm}, \quad \hat{l}^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}.$$

Тут важно только число линейно независимых функций Y_l при фиксированном l . В качестве таких линейно независимых функций могут быть выбраны, например Y_{lm} , которых имеется (поскольку $m = l, l-1, \dots, 0, \dots, -l$) $2l+1$ штука.

Из стационарного уравнения Шрёдингера сокращаем Y_l получаем

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 \underbrace{(RY_l)}_{\psi_1} &= E_1 \underbrace{(RY_l)}_{\psi_1} \Rightarrow \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r) \right] R(r) &= E_1 R(r). \end{aligned} \quad (16.4)$$

Выражение в квадратных скобках отличается от гамильтониана $\hat{H}_1$ только тем, что оператор $\hat{l}^2$ заменился на собственное число $l(l+1)$.

(Ф) Мы видим, что происходящий от угловой части кинетической энергии член $\frac{\hbar^2 \hat{l}^2}{2\mu r^2}$ теперь переписался как функция от радиальной координаты $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$ и может трактоваться как центробежная потенциальная энергия. То же самое мы имели и в классике, при рассмотрении задачи движения частицы в центральном потенциале.

(Ф) Оператор радиальной кинетической энергии $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}$ отличается от обычной кинетической энергии при одномерном движении. Это связано с тем, что волна, распространяющаяся по r — это не плоская волна, а сферическая. Решение обычного одномерного уравнения Шрёдингера при нулевом потенциале даёт плоскую волну, амплитуда которой постоянна, а решение радиального уравнения Шрёдингера должно давать сферическую волну квадрат амплитуды которой (плотность вероятности) спадает как $\frac{1}{r^2}$, а амплитуда как $\frac{1}{r}$.

Попробуем ввести другую параметризацию волновой функции:

$$R(r) = \frac{1}{r} \phi(r), \quad \psi_1(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} \phi(r) Y_l(\theta, \varphi).$$

Вероятность dP попадания в заданные интервалы $dr, d\theta, d\varphi$

$$dP = |\psi_1|^2 d^3\mathbf{r} = |R(r)Y_l(\theta, \varphi)|^2 \underbrace{r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi}_{\text{элемент объёма}} = |\phi(r)Y_l(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$

При переписывании dP через $\phi(r)$ исчезает вес r^2 , и интегрирование по r идёт точно также как по обычной декартовой координате, если движение ограничено положительной полуосью.

Теперь действие радиальной части лапласиана упрощается:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{\phi(r)}{r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \left(\frac{\phi'}{r} - \frac{\phi}{r^2} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r\phi' - \phi) = \frac{\phi''}{r}.$$

Подставляя $R = \frac{\phi}{r}$ в уравнение (16.4) и сокращая во всех членах общий множитель $\frac{1}{r}$ получаем уравнение, которое выглядит в точности как обычное стационарное одномерное уравнение Шрёдингера для волновой функции ϕ

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r) \right]}_{\hat{H}_r} \phi(r) = E_1 \phi(r). \quad (16.5)$$

(Ф) Эффективный одномерный гамильтониан $\hat{H}_r$ содержит совершенно обычный одномерный оператор кинетической энергии $\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2}$, а потенциальная энергия состоит из собственно потенциальной энергии $U(r)$ и центробежной энергии $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} = \frac{\langle L^2 \rangle}{2\mu r^2}$. Мы переписали числитель как среднее значение оператора квадрата размерного момента импульса, чтобы продемонстрировать, что центробежная энергия с точностью до шляпок совпадает с классическим случаем.

Получившаяся одномерная задача отличается от стандартной тем, что координата r определена на положительной полуоси $0 \leq r < \infty$, причём из непрерывности $R = \frac{\phi}{r}$ следует граничное условие на ϕ , которое можно трактовать как наличие в нуле бесконечновысокой стенки

$$\phi(0) = 0. \quad (16.6)$$

16.3.1 Асимптотика $r \rightarrow 0$

Исследуем асимптотику радиального уравнения Шрёдингера (16.5) при $r \rightarrow 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \phi''(r) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r) - E_1 \right] \phi(r) = 0, \quad \phi(0) = 0. \quad (16.7)$$

Главный член при $r \rightarrow 0$ в квадратных скобках зависит от того, как ведёт себя при этом пределе потенциальная энергия $U(r)$.

Предположим, что при $r \rightarrow 0$ потенциал $U(r)$ ограничен, либо растёт не слишком быстро:

$$r^2 U(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0.$$

Тогда при малых r получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \phi''(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \phi(r) \simeq 0, \quad r \rightarrow 0, \quad \phi(0) = 0.$$

$$r^2 \phi''(r) = l(l+1) \phi(r), \quad \phi(0) = 0.$$

Линейное однородное уравнение второго порядка имеет два линейнонезависимых решения, которые легко подбираются в виде степенных функций от r :

$$r^{l+1}, \quad \frac{1}{r^l}.$$

Граничному условию $\phi(0) = 0$ удовлетворяет только первое решение, так что для не слишком быстро растущего в нуле потенциала получаем асимптотику

$$\phi(r) \sim r^{l+1}, \quad r \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_1(r, \theta, \varphi) \sim r^l Y_l(\theta, \varphi), \quad r \rightarrow 0. \quad (16.8)$$

Если потенциал содержит член пропорциональный $\frac{1}{r^2}$, то его надо будет учитывать наравне с центробежным потенциалом и в результате асимптотика (16.8) сойдётся: изменится степень и вместо r^l получится $r^{l'}$, где l' — некоторый «эффективный момент» (как правило, дробный).

При рассмотрении быстро растущих в нуле притягивающих (отрицательных) потенциалов следует проверить, попадает ли ϕ в пространство квадратично-интегрируемых функций $L_2(\mathbb{R}_+)$ т.е. $\phi(r)$ должно расти при малых r не быстрее, чем $\frac{1}{\sqrt{r}}$. Также следует проверить ограничен ли энергетический спектр снизу, т.к. неограниченный снизу энергетический спектр означает падение частицы на центр с выделением бесконечной энергии. Потенциал $-\frac{\text{const}}{r^2}$ оказывается пограничным по обоим критериям.

16.3.2 Асимптотика $r \rightarrow \infty$

При $r \rightarrow \infty$ центробежный потенциал стремится к нулю, и главным членом оказывается либо $U(r)$, либо E_1 .

В реальных (не модельных) случаях потенциал на бесконечности стремится к константе, которую можно положить равной нулю, переопределив нулевой уровень энергии.

В этом случае получаем на бесконечности уравнение для свободной частицы:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \phi''(r) \simeq E_1 \phi(r), \quad r \rightarrow \infty, \quad \phi(0) = 0. \quad (16.9)$$

Может показаться, что условие $\phi(0) = 0$ (бесконечновысокая стенка в нуле) в данном случае не важно, но на самом деле оно допускает адекватную переформулировку. Условие $\phi(0) = 0$ означает равенство нулю потока вероятности $j_r(0)$ в нуле. При этом выполняется уравнение непрерывности для одномерной радиальной задачи:

$$\frac{\partial \rho(r)}{\partial t} + \frac{\partial j_r(r)}{\partial r} = 0.$$

Для стационарного состояния плотность вероятности не зависит от времени, а значит $\frac{\partial \rho(r)}{\partial t} = 0$ и уравнение непрерывности даёт нам условие отсутствия радиального потока вероятности:

$$\frac{\partial j_r(r)}{\partial r} = 0, \quad j_r(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad j_r(r) \equiv 0. \quad (16.10)$$

Условие отсутствия потока можно переформулировать ещё одним способом. Для всякого решения уравнения (16.7) $\phi(r)$ его вещественная и мнимая части также являются решениями с тем же значением E_1 . Однако граничное условие $\phi(0) = 0$ из двух линейнонезависимых решений линейного однородного уравнения второго порядка (16.7) при данном E_1 оставляет только одно, а значит решения $\phi(r)$, $\text{Re}\phi(r)$, $\text{Im}\phi(r)$ совпадают с точностью до постоянного множителя.

Таким образом, условие отсутствия потока может формулироваться как условие вещественности $\phi(r)$, т.е. для уравнения (16.7) мы можем искать только вещественные решения.

Таким образом, асимптотика (16.10) при отрицательных $E_1 < 0$ (состояния дискретного спектра)

$$\phi(r) \sim e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2\mu E_1}}{\hbar}, \quad r \rightarrow \infty. \quad (16.11)$$

При положительных энергиях (состояния непрерывного спектра)

$$\phi(r) \sim \sin(kr + \alpha), \quad k = \frac{\sqrt{2\mu E_1}}{\hbar}, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad r \rightarrow \infty. \quad (16.12)$$

Фаза α не может быть зафиксирована исследованием потенциала при больших r . Например, если $U(r)$ — непроницаемый шарик радиуса a , что соответствует $\phi(a) = 0$, то при $l = 0$ точное решение имеет вид

$$\phi(r) = C \sin(kr - \underbrace{ka}_{\alpha}), \quad r \geq a.$$

На это примере мы видим, что при одинаковом поведении $U(r \rightarrow \infty)$ фаза α может быть любой.

Случай неограниченного потенциала

Случай неограниченного потенциала

$$U(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \infty$$

— это модельный случай, т.к. в реальной физике подобных потенциалов, неограниченно нарастающих на больших расстояниях мы не наблюдаем.

Для неограниченных потенциалов нам не надо специально оговаривать условие отсутствия потока, т.к. это условие диктуется с обоих концов: не только условием $\phi(0) = 0$, но и неограниченным ростом потенциала на бесконечности.

Конкретный вид асимптотики зависит от поведения $U(r \rightarrow \infty)$. Например, для потенциала трёхмерного изотропного гармонического осциллятора

$$U(r) = \frac{\omega^2 r^2}{2\mu}$$

асимптотика совпадает с асимптотикой обычного одномерного гармонического осциллятора (см. 12 «Гармонический осциллятор»)

$$\phi(r) \sim e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}, \quad r \rightarrow \infty.$$

16.4 Атом водорода

Гамильтониан для атома водорода соответствует потенциалу $U(r) = -\frac{e^2}{r}$, аналогично для водородоподобного иона (один электрон, обращающийся вокруг ядра с зарядом Z) $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$. Таким образом, гамильтониан, описывающий движение электрона относительно центра масс (16.3) принимает вид

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}|}, \quad (16.13)$$

а одномерное уравнение Шрёдингера для радиального движения (16.5), (16.6) становится таким

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\phi''(r) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} - E_1 \right] \phi(r) = 0, \quad \phi(0) = 0. \quad (16.14)$$

16.4.1 Кулоновские и атомные единицы

Уравнение Шрёдингера для атома водорода или водородоподобного иона удобно обезразмерить. В качестве атомной единицы массы используется масса электрона (приведённая). В качестве единицы действия, как обычно в квантовой механике, используется постоянная Планка. В качестве единицы заряда — $\sqrt{Z}e$. То есть, чтобы ввести *кулоновские единицы*, мы полагаем три размерные константы (с несводимыми размерностями) равными единице

$$\mu = 1, \quad \hbar = 1, \quad Ze^2 = 1.$$

Этого достаточно, чтобы однозначно фиксировать систему единиц.

Поскольку ядра существенно тяжелее электрона (протон в 2×10^3 раз), приведённая масса μ для движения электрона в поле ядра близка к массе свободного электрона. В частности для водорода

$$\mu \simeq (1 - 0,5 \times 10^{-3}) \cdot m_e.$$

Атомные единицы получаются в случае $\mu = m_e$, $Z = 1$

$$m_e = 9,109 \times 10^{-28} \text{ г} = 1, \quad \hbar = 1,055 \times 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с} = 1, \quad e = 4,803 \times 10^{-10} \text{ ед. СГС} = 1.$$

Размерности у этих констант следующие:

$$[m_e] = M, \quad [\hbar] = ET = ML^2T^{-1}, \quad [e^2] = EL = ML^3T^{-2}.$$

Выпишем следующие отсюда единицы некоторых физических величин. Это следует сделать хотя бы для того, чтобы представить себе порядок различных величин, характерных для задачи.

Характерная скорость оказывается порядка $1/100$ от скорости света:

$$\frac{e^2}{\hbar} = 2,187 \times 10^8 \text{ см/с} \sim 10^{-2} c, \quad c = 2,997\,924\,58 \times 10^{10} \text{ см/с}.$$

Это означает, что мы можем в первом приближении пренебречь релятивистскими эффектами, однако при умеренно точных измерениях релятивистские эффекты будут сказываться. Из гамма-фактора

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \approx \frac{1}{\sqrt{1 - 0,5 \times 10^{-4}}} \approx 1 + 2,5 \times 10^{-5}$$

относительная точность нерелятивистского приближения оценивается как $\sim 10^{-5}$.

Атомная единица длины — *радиус Бора*, как мы видим, *ангстрем* ($1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ м} = 10^{-8} \text{ см}$) оказался удобной единицей длины на атомных расстояниях

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \times 10^{-8} \text{ см} = 0,529 \text{ Å}.$$

Атомная единица времени (длина разделить на скорость) позволяет предварительно оценить, какие процессы, совершающиеся с атомами следует считать быстрыми, а какие медленными:

$$t_a = \frac{\hbar^3}{me^4} = 2,419 \times 10^{-17} \text{ с.}$$

Атомная единица энергии составляет два *ридберга* (Ry). Мы видим, что 1 эВ оказался весьма удачной единицей для атомных процессов:

$$\varepsilon_0 = 2\text{Ry} = \frac{me^4}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a} = 27,1 \text{ эВ} = 4,34 \times 10^{-18} \text{ Дж} = 4,34 \times 10^{-11} \text{ эрг.}$$

16.4.2 Решение безразмерного уравнения

После обезразмеривания получаем

$$-\frac{1}{2}\phi''(\rho) + \left[\frac{l(l+1)}{2\rho^2} - \frac{1}{\rho} + \underbrace{\frac{1}{2n^2}}_{-\epsilon} \right] \phi(\rho) = 0, \quad \phi(0) = 0. \quad (16.15)$$

Здесь $\epsilon = \frac{E_1}{\varepsilon_0} = -\frac{1}{2n^2}$ — обезразмеренная энергия (n — обезразмеренная длина затухания волновой функции при $r \rightarrow \infty$), $\rho = \frac{r}{a}$ — обезразмеренный радиус.

Мы будем искать состояния дискретного спектра, т.е. состояния с $\epsilon < 0$.

Мы знаем асимптотики ϕ при малых и при больших ρ

$$\phi(\rho) \sim \rho^{l+1}, \quad \rho \rightarrow 0, \quad \phi(\rho) \sim e^{-\rho/n}, \quad \rho \rightarrow \infty, \quad \frac{1}{n} = \sqrt{-2\epsilon}.$$

Выделим асимптотики из ϕ :

$$\phi(\rho) = \rho^{l+1} \cdot e^{-\rho/n} \cdot u(\rho).$$

Здесь $u(\rho)$ — новая неизвестная функция, она должна при малых ρ вести себя так, чтобы не испортить асимптотику ρ^{l+1} , а при больших — чтобы не испортить $e^{-\rho/n}$.

$$\phi''(\rho) = \rho^{l+1} \cdot e^{-\rho/n} \cdot \left[u'' + 2u' \left(\frac{l+1}{\rho} - \frac{1}{n} \right) + u \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2(l+1)}{n\rho} + \frac{1}{n^2} \right) \right].$$

Радиальное уравнение принимает следующий вид

$$\frac{u''}{2} + u' \left(\frac{l+1}{\rho} - \frac{1}{n} \right) + \frac{u}{\rho} \frac{n-l-1}{n} = 0.$$

$$\rho u'' + 2u' \left(l+1 - \frac{\rho}{n} \right) + 2u \frac{n-l-1}{n} = 0.$$

Будем искать функцию $u(\rho)$ в виде ряда по степеням ρ :

$$u(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \rho^k, \quad (16.16)$$

$$u'(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) C_{k+1} \rho^k, \quad u''(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) C_{k+2} \rho^k,$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{k=0}^{\infty} \left[(k+2)(k+1)C_{k+2}\rho^{k+1} + 2(l+1)(k+1)C_{k+1}\rho^k - \right. \\
& \quad \left. - \frac{2(k+1)}{n}C_{k+1}\rho^{k+1} + \frac{2(n-l-1)}{n}C_k\rho^k \right] = 0. \\
& \sum_{k=0}^{\infty} \left[(k+1)kC_{k+1} + 2(l+1)(k+1)C_{k+1} - \frac{2k}{n}C_k + \frac{2(n-l-1)}{n}C_k \right] \rho^k = 0. \\
& \sum_{k=0}^{\infty} \left[(2l+k+2)(k+1)C_{k+1} + \frac{2(n-l-1-k)}{n}C_k \right] \rho^k = 0.
\end{aligned}$$

Отсюда получаем рекуррентную формулу для коэффициентов разложения:

$$C_{k+1} = -C_k \frac{2(n-l-1-k)}{n(2l+k+2)(k+1)}. \quad (16.17)$$

При больших k

$$C_{k+1} \approx C_k \frac{2}{nk} \approx \text{const} \frac{\left(\frac{2}{n}\right)^k}{k!} \Rightarrow u(\rho) \approx \text{const} \cdot e^{2\rho/n}, \quad \rho \rightarrow \infty.$$

Это превращает правильную асимптотику $\phi \sim e^{-\rho/n}$ при $\rho \rightarrow \infty$ в неправильную асимптотику $\phi \sim e^{+\rho/n}$, которая тоже удовлетворяет уравнению Шрёдингера, но была откинута так как такая волновая функция ненормируема.

Чтобы сохранить правильную асимптотику на больших расстояниях необходимо потребовать, чтобы ряд по степеням ρ обрывался, т.е. должно быть такое значение $K = 0, 1, 2, \dots$, что $C_K \neq 0$, но

$$C_{K+1} = - \underbrace{C_K}_{\neq 0} \frac{2(n-l-1-K)}{n(2l+K+2)(K+1)} = 0 \Rightarrow n = l+1+K \in \mathbb{N}.$$

Таким образом, параметр n , с помощью которого мы параметризовали энергию, должен быть натуральным числом.

$$u(\rho) = C_0 \sum_{k=0}^K \left(-\frac{2\rho}{n} \right)^k \frac{(2l+1)!(n-l-1)!}{(2l+2+k)!(n-l-2-k)!k!}$$

С точностью до нормировочного множителя

$$u(\rho) = \text{const} \cdot \sum_{k=0}^K \frac{\left(-\frac{2\rho}{n} \right)^k}{(2l+2+k)!(K-1-k)!k!}$$

Это полином степени $K = n - l - 1$.

16.4.3 Атом водорода в «старой квантовой механике»*

Каждый школьник знает, что атом Бора — это не атом бора, а атом водорода.

П.Л. Капица во время посещения Н. Бором Москвы в 1961 г.^a

^a Цитируется по книге Белонучкин В.Е., Заикин Д. А., Ципенюк Ю.М., Основы физики. Курс общей физики: Учебн. В 2 т. Т. 2. Квантовая и статистическая физика / Под ред. Ю.М. Ципенюка. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001.

Интересно, что точный спектр для частицы в кулоновском поле может быть получен из квазиклассических соображений. Впервые это было сделано Бором в 1913 г. исходя из того, что на классической круговой орбите должно уместиться целое число волн де Бройля, это условие соответствует условию квантования классического момента импульса при круговом движении: $L = pR = n\hbar$.

Для круговой орбиты радиуса R^2

$$U = -\frac{e^2}{R}, \quad K = \frac{p^2}{2m} = -\frac{U}{2} = \frac{e^2}{2R} \quad \Rightarrow \quad p = \sqrt{\frac{e^2 m}{R}}.$$

$$p 2\pi R = n 2\pi \hbar \quad \Rightarrow \quad p = \frac{n\hbar}{R} = \sqrt{\frac{e^2 m}{R}} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{R} = \frac{e^2 m}{n^2 \hbar^2} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{U}{2} = -\frac{e^4 m}{2n^2 \hbar^2}.$$

Как мы видим, значение энергии в точности соответствует строгому решению квантовой задачи, однако соответствующий размерный момент импульса

$$L = pR = n\hbar$$

выходит из диапазона $0, \dots, (n-1)\hbar$, который получается в квантовом случае.

В последствии Зоммерфельд обобщил результат Бора на эллиптические орбиты с $0 < L \leq n\hbar$. $L = 0$ было исключено, чтобы получить соответствующую эксперименту кратность вырождения.

²Для упрощения выкладок мы пользуемся *теоремой вириала* из теоретической механики, которая для финитного движения в кулоновском поле даёт следующее соотношение между средними значениями кинетической и потенциальной энергией $K = -\frac{1}{2}U$, т.е. $E = \frac{U}{2}$.

Глава 17

Квантовая и классическая история. Вместо послесловия (ффф)

Рассказывают, что один студент проквантовал марксистско-ленинскую теорию, а потом пытался изложить результаты преподавателю на экзамене по научному коммунизму...

Физтеховский студенческий фольклор

17.1 Предварительные извинения

Эту главу не следует воспринимать слишком серьёзно — это всего лишь попытка применить физическую интуицию к гуманитарным вопросам. Физика при этом может выступать как образец по-настоящему хорошо работающей теории, а также как метафора. Впрочем, нельзя исключать, что некоторые обсуждаемые вопросы окажутся физически осмысленными

17.2 Сослагательное наклонение в истории

17.2.1 Классическая неустойчивая динамика

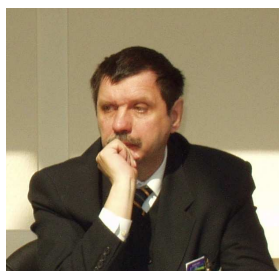


Рис. 17.1: Георгий Геннадиевич Малинецкий [фото автора]

Расхожая фраза «история не имеет сослагательного наклонения» неявно подразумевает исторический детерминизм в духе лапласовского детерминизма. Более того, неявно подразумевается, что историческая динамика устойчива к малым возмущениям, что противоречит даже опыту классической механики.

Также этот взгляд явно противоречит смыслу применения теории управления к человеческому обществу: задача построения управления — построение системы, чья динамика будет существенно зависеть от управляющего воздействия, т.е. динамика управляемой системы должна быть

неустойчива по управляющему воздействию. В данном случае

управляемость $\Rightarrow$ неустойчивость по управляющему воздействию

(обратное не верно).

Самоорганизация общества, при котором оно само приходит в управляемый режим, т.е. получает возможность реагировать на внешнее воздействие как целое, аналогично известному в синергетике явлению самоорганизованной критичности, когда система сама приходит к состоянию, в котором характерный размер флуктуаций (откликов на внешние воздействия) становится сравнимым с масштабом системы.



Рис. 17.2: Исаак Юдович Озимов (Айзек Азимов) 1965 г. (1920–1992) w

Для построения теоретической истории, как науки, имеющей реальную предсказательную силу не только по отношению к прошлому, но и по отношению к будущему, необходимо по крайней мере использовать наработки кибернетики (теории управления) и синергетики (теории самоорганизации сложных систем).

Классическая теоретическая история могла бы предсказывать вероятности тех или иных событий, выявлять периоды бифуркаций (развилки) и устойчивого (неуправляемого) развития. Для бифуркаций можно было бы предсказывать характер и величину управляющего воздействия, повышающего вероятность выбора того или иного пути.

В настоящее время в России теоретическая история с точки зрения синергетики развивается в ИПМ им. М. В. Келдыша РАН группой Г.Г. Малинецкого (проект «Математическая история»). По всей видимости аналогичные разработки (преимущественно закрытого характера) в России и мире ведутся по крайней мере с середины 20-го века. В частности С.Б. Переслегин предполагает что в САСШ у истоков разработок по теоретической истории мог стоять биохимик (и писатель-фантаст) А. Азимов. Гипотеза о роли Азимова основывается на его несомненном интересе к проблеме, проявленном в таких НФ-произведениях как цикл «Основание» (1951-1988 гг.), «Конец Вечности» (1955 г.), «Непреднамеренная победа» (1964 г.).

17.2.2 Квантовая многомировая история

С точки зрения многомировой интерпретации квантовой механики следует считать, что состояние Земли и Человечества описывается суперпозицией макроскопически различных состояний. Упомянутое «сослагательное наклонение» в квантовой многомировой истории реализуется со всеми бесчисленными вариантами *на самом деле* в различных параллельных мирах.

Конечно, макроскопически отличные от *текущей реальности* параллельные миры (*альтернативные реальности*), согласно результатам теории декогеренции не влияют на текущую реальность. Однако в некоторых из альтернативных реальностей некоторые подсистемы неизбежно будут иметь состояния, микроскопически тождественные состояниям соответствующих подсистем текущей реальности. Между этими подсистемами разных реальностей может наблюдаться квантовая интерференция. Например, какая-либо рукопись в одной реальности может быть подделкой, а в другой — подлинником, и амплитуда создания её как подделки и как подлинника могут интерферировать между собой.

Более того, мы можем рассмотреть возможность попадания человечества в целом в одно конечное состояние, через макроскопически различные истории. Конечно, для этого необходимо, чтобы определить «подлинную» историю было в принципе невозможно.



Рис. 17.3:
Сергей Борисович
Переслегин
[Сергей Бережной cc W]

И тут мы можем поставить физически осмысленный вопрос: «*Чем предсказание будущего отличается от предсказания прошлого?*» При предсказании нашего макроскопического будущего квантовые флуктуации за очень короткое время проявляются на макроуровне, однако при предсказании прошлого квантовые флуктуации позволяют выбрать одну из ветвей истории на многократно больших временах. На какое интервал времени назад мы можем «предсказать» прошлое? Сколько подробно может быть такое предсказание? Как этот интервал меняется по мере развития науки и техники?

С.Б. Переслегин (философ, литературный критик, политолог, окончил ЛГУ по специальности «ядерная физика») — один из немногих авторов, всерьёз рассуждающих о квантовой истории, — предполагает, что мы в принципе (из-за квантовых неопределённостей) не можем определить, справедлива ли традиционная хронология, или новая хронология, разрабатываемая группой А.Т. Фоменко. Скорее всего, подобный радикальный взгляд чрезмерно оптимистичен (пессимистичен?). Однако многие физики согласились бы с утверждением, что наши возможности «предсказания» состояния первых мгновений жизни Вселенной принципиально ограничены квантовой теорией.

Возможны и промежуточные вопросы, ответ на которые представляется неочевидным. Достаточно ли непредсказуемы «детали биографии» какого-нибудь не дошедшего до нас в виде окаменелости трилобита, чтобы можно было рассматривать квантовую интерференцию этих «биографий»?

По интерпретации С.Б. Переслегина, в квантовой истории не существует художественной литературы: любое «художественное» произведение описывает то, что реально происходило в одной альтернативных реальностей. С этой точки зрения доктор Ватсон является точно таким же автором «Рассказов о Шерлоке Холмсе», как и А. Конан-Дойль. Причём (по Переслегину) в процессе написания нельзя исключить интерференцию этих двух процессов литературного творчества и влияния Англии Шерлока Холмса (отличающейся в ряде существенных деталей от Викторианской Англии) на текущую реальность.¹

Если попробовать всерьёз взглянуть на квантовую историю по Переслегину с точки зрения многомировой интерпретации квантовой механики, то вероятно, следует считать, что интерференция разных историй действительно может существовать, но точность, с которой человек определяет в какой именно истории он находится, недостаточна, чтобы эту интерференцию обнаружить. Таким образом, вместо квантовой неоднозначной истории мы получим вполне классическую неизвестную историю, чья неопределённость вызвана не интерференцией взаимоисключающих вариантов, а простым незнанием (неполнотой информации).

¹ Думаю, эта идея понравилась бы и самому Конан-Дойлю, который был не только писателем детективов, но и мистиком.

17.2.3 Квантовая история и сознание

Явная аналогия с динамики общества и квантовой динамики — влияние измерения на состояние системы. Люди и их сообщества обладают рефлексией (самоосознанием), и отвечая на поставленный вопрос, или как-либо иначе обнаруживая факт измерения они его осмысливают, тем самым изменяя состояние сознания — важнейшей своей подсистемы.

Для измерения состояния человеческого или общественного сознания можно провести ряд аналогий с квантовым измерением:

- Мнение по задаваемому вопросу у опрашиваемого может отсутствовать до того, как вопрос был задан.
- В процессе ответа на вопрос (измерения) мнение (состояние) может измениться. В частности, если вопрос предполагает однозначный ответ, то обнаруживается одно из взаимоисключающих мнений, предусмотренных формулировкой вопроса. Мы можем считать, что в результате человек/общество действительно приобретает определённое мнение, например, поддержка новоизбранного президента, как правило, существенно превосходит число поданных за него голосов и часто приближается к единогласной, после чего падает со временем.
- Приобретённое в результате ответа на вопрос мнение, если оно не является собственным (стационарным) для эволюции сознания, со временем меняется.
- Частым измерением (опросом) отвечающим на одинаковый вопрос можно заморозить эволюцию мнения (эффект Зенона), а непрерывно меняя формулировку вопроса можно вызвать искусственную эволюцию мнения по произвольной траектории (эффект Антизенона).
- Сознание (общественное, или даже личное) может находиться в состоянии суперпозиции различных мнений, хотя не ясно, можно ли считать эту суперпозицию линейной.
- Одни и те же аргументы за какое-либо мнение могут как усиливать это мнение (конструктивная интерференция), так и ослаблять его (деструктивная интерференция), в зависимости от того, какие соображения подкрепляли это мнение ранее. В частности, как показали психологические тесты, человек обычно продолжает азартную игру, если результат предыдущей игры ему известен (вне зависимости от того, выигрыш это, или проигрыш), но при неизвестном результате человек обычно склонен прекращать игру. Это можно интерпретировать как разрушающую интерференцию желания играть, чтобы отыграться и желания играть, чтобы больше выиграть.
- Для сознания могут сосуществовать различные (в том числе взаимоисключающие) версии истории, которые воспринимаются как равно реальные. Шерлок Холмс реально влияет на сознание вне зависимости от того, считаем ли мы его никогда не существовавшим, или существовавшим в альтернативной реальности.

Таким образом, вне зависимости от того, считаем ли мы сознание существенно квантовым эффектом, и принимаем ли мы многомировую интерпретацию для исторических событий, мы можем пытаться строить квантовую историю, как теорию эволюции человеческого и/или общественного сознания.

17.3 Неопределённое ближайшее будущее

17.3.1 Приближение бифуркации

По многим признакам в течении ближайших десятилетий нас ожидает радикальное изменение исторических тенденций. Так экстраполяция роста численности населения Земли на протяжении многих столетий на ближайшее будущее даёт бесконечное население Земли в районе 2025 года,² при приближении к этой же дате сокращаются характерные времена развития общества и техники.

Понятно, что бесконечное количество людей на Земле не поместится, так что что-то должно произойти: по меньшей мере изменение характера воспроизводства населения Земли.

Уменьшение характерных времён развития общества и техники можно интерпретировать как сжатие исторического времени и учащение точек бифуркации в ходе истории. В пределе, когда время между бифуркациями стремится к нулю можно ожидать переход исторической динамики в хаотичный режим, при котором устойчивые по начальным данным участки развития полностью исчезают. Возможно после перехода появятся новые предельные устойчивые траектории (аттракторы), но изучение поведения системы до перехода никак не может помочь в их определении.

Такой взгляд на будущее соответствует точке зрения классической неустойчивой динамики.



Рис. 17.4:
Сергей Петрович
Капица w

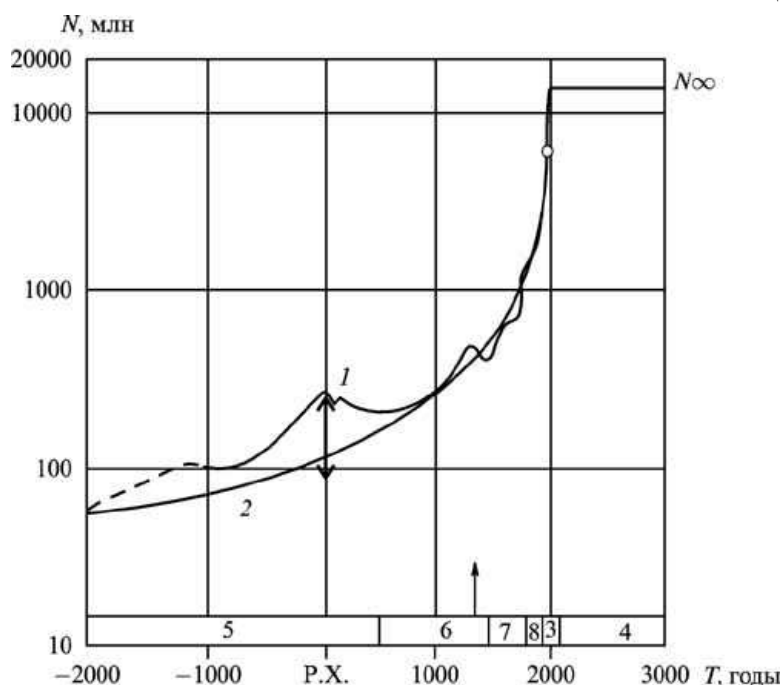


Рис. 17.5: Население мира в предположении выхода на асимптоту вскоре после 2000 г.
[см. примечание 2]

²С.П. Капица «Сколько людей жило, живет и будет жить на земле. Очерк теории роста человечества.» М.: Наука, 1999

17.3.2 Перестройка спектра состояний

С точки зрения квантовой механики при приближении системы к точке перехода может быть полезен взгляд с точки зрения нестационарной теории возмущений. Точка перехода может соответствовать скачкообразному исчезновению (квази)стационарного состояния (возможно перестройке всего спектра стационарных состояний) при непрерывном изменении параметров системы.

Система при этом оказывается в суперпозиции новых (квази)стационарных состояний, т.е. как бы во всех состояниях сразу. После этого, в результате измерения или декогеренции из возможных (квази)стационарных состояний останется одно, или суперпозиция состояний с равными (близкими) «энергиями» (что за величина здесь выступает в роли «энергии» не вполне ясно).

17.4 Пост-какое-то общество

На протяжении последних десятилетий общим местом являются рассуждения о переходе отдельных государств и/или Человечества в целом к «постиндустриальному обществу». Однако этот термин не единственен, будущему обществу применяются такие определения как

- постиндустриальное общество,
- общество потребления,
- информационное общество,
- когнитивное общество (любимый термин Переслегина).

Обычно подразумевается, что все эти слова относятся к одному и тому же обществу, в чём проявляется привычный исторический детерминизм. В лучшем случае (С.Б. Переслегин) рассматривается альтернатива: переход к постиндустриальному (когнитивному) обществу, или падение на доиндустриальный уровень.

Определение «постиндустриальное общество» столь же «хорошо» для описания общества приближающегося будущего, как термин «постсельское общество» для общества индустриального. Оба эти термина говорят о старом состоянии общества, которое исчерпало себя в том смысле, что промышленность (индустрия) или сельское хозяйство уже не являются «узкими местами», на которые направлены основные ресурсы и усилия общества. Эти слова ничего не говорят о новых «узких местах» на которые будут направлены основные усилия в будущем, и который принесут наибольшие достижения.

Конец промышленной эпохи не значит, что промышленность куда-то исчезнет, и нам предстоит «возврат к природе». Точно также переход от сельскохозяйственной эпохи к промышленной не означал исчезновения сельского хозяйства и возврата к собирательству и охоте, вместо этого сельское хозяйство индустриализировалось, т.е. стало отраслью промышленности.

17.4.1 Постсельское общество

Рассмотрим в качестве аналогии переход от сельскохозяйственного общества к постсельскому, после чего попробуем перенести полученную картину на современный переход от индустриального общества к постиндустриальному.

Сельскохозяйственное общество переросло себя, когда производительность труда в сельском хозяйстве поднялась настолько, что производство продовольствия могло осуществляться меньшинством населения. Одновременно оказывалось освоено большинство земель, пригодных для сельского хозяйства при данном уровне техники. Начиная с этого момента, рост сельского населения тормозил производительность сельскохозяйственного труда. Более того, рост сельского населения часто мог даже снижать суммарное производство продовольствия за счёт измельчения хозяйств, истощения почв и деградации (люмпенизации) населения.

Такое положение с необходимостью вело к переходу от сельскохозяйственного общества к постсельскому, которое должно было решить проблему переизбытка сельского населения в условиях роста производительности труда. Мы знаем один тип постсельского общества — индустриальный, однако можно легко вообразить (и найти в истории) целый ряд различных постсельских обществ, различающихся тем, какой общественный институт поглощает в них избыток сельского населения. Такой общественный институт («ведущий институт») должен сосредоточить большинство населения и большинство усилий общества, более того, можно ожидать, что сельское хозяйство окажется по отношению к этому институту в подчинённом положении, будет им поглощено, подобно тому, как в индустриальном варианте постсельского общества оно подчинено промышленности (поглощено ею).

Были ли другие варианты постсельского общества, отличные от индустриального? Были, но не выдержали конкурентной борьбы с обществами, пошедшими по индустриальному пути развития. При этом некоторые из ниже перечисленных обществ сопротивлялись достаточно долго (агония некоторых продолжается до сих пор). Можно вообразить следующие варианты развития («спектр») постсельского общества (в квадратных скобках указан ведущий институт):

- *Феодално-бюрократическое (управляющее) общество [управление]*. Прототипы: средневековый Китай, феодальная Европа.
- *Промышленное (индустриальное) общество [промышленность]* — тот вариант, который мы считаем единственным. Прототипы: страны Запада и СССР в середине 20-го века.
- *Военное общество [армия]* — главный конкурент. Прототипы: казачьи общины, Спарта, средневековая Япония, кочевые общества.
- *Общество потребления [цирк]*. Прототипы: Рим в эпоху упадка, некоторые восточные государства в периоды разложения.
- *Религиозное (теократическое) общество [церковь]*. Прототипы: древние теократии Старого и Нового Света.
- *Философское общество [школа]*.³ Прототипы: некоторые древнегреческие полисы.

Все перечисленные сценарии предполагают некоторое развитие промышленности, но только индустриальный вариант делает промышленность ведущим институтом, в остальных вариантах промышленность только обслуживает ведущий институт и сельское хозяйство.

³В данном случае уместно слово «философское», а не когнитивное, научное или информационное, поскольку на тот момент философия оказывается практически единственной отраслью фундаментального светского знания.

По аналогии с квантовой механикой можно сказать, что перечисленные состояния являются собственными для невозмущённого гамильтониана. Для полного гамильтониана собственные состояния являются суперпозициями перечисленных, однако одна из компонент всегда много больше остальных, и состояния невозмущённого гамильтониана по-прежнему пригодны для классификации состояний.

17.4.2 Постиндустриальное общество

Промышленное общество переросло себя, когда производительность труда в промышленности поднялась настолько, что промышленное производство стало возможным усилия меньшинства населения. Одновременно оказывалось освоено большинство платёжеспособных рынков, существующих при данном уровне техники. Начиная с этого момента, рост городского населения тормозит производительность промышленного труда. Более того, рост городского населения часто даже снижает суммарное промышленное производство за счёт загрязнения окружающей среды, роста доли непроизводительного труда и деградации (старения и люмпенизации) населения.

Такое положение с необходимостью ведёт к переходу от индустриального общества к постиндустриальному, которое должно решить проблему переизбытка населения, занятого в промышленности, в условиях роста производительности труда. Считается общепризнанным, что есть один тип постиндустриального общества — информационный, он же «общество потребления», однако можно легко вообразить целый ряд различных постиндустриальных обществ, различающихся тем, какой общественный институт поглощает в них избыток населения, ранее занятого в промышленности. Такой общественный институт («ведущий институт») должен сосредоточить большинство населения и большинство усилий общества, более того, можно ожидать, что промышленность окажется по отношению к этому институту в подчинённом положении, будет им поглощена, подобно тому, как в индустриальном варианте постсельского общества сельское хозяйство подчинено промышленности (поглощено ею).

Есть ли другие варианты постиндустриального общества, отличные от информационного и общества потребления? По всей видимости есть, но можно ожидать, что только один из них выдержит конкурентную борьбу с обществами, пошедшими по иным путям развития. При этом некоторые из ниже перечисленных обществ возможно будут сопротивляться достаточно долго (агония некоторых может длиться целые исторические эпохи). Можно вообразить следующие варианты развития («спектр») постиндустриального общества (в квадратных скобках указан ведущий институт):

- *Бюрократическое (управляющее) общество [управление]*. Прототипы: САСШ как управляющий центр мировой экономики, СССР как плановое государство.
- *Космическое (гипериндустриальное) общество [высокотехнологическая тяжёлая промышленность (аэрокосмическая)]*. Прототип: СССР.
- *Военное общество [армия]*. Прототипы: отчасти Израиль.
- *Общество потребления [телевидение]*. Прототипы: Нидерланды, страны «скандинавского социализма», в какой-то мере старые члены ЕЭС и САСШ.

- *Религиозное (теократическое) общество [церковь]*. Прототипы: Израиль, Иран, Арабские Эмираты.
- *Познающее (когнитивное) общество [университет]*. Прототип: университет с учебно-производственными подразделениями промышленной и сельскохозяйственной направленности.

Под «информационным обществом» в современном понимании может пониматься как управляющее общество, так и познающее.

Все перечисленные сценарии предполагают некоторое развитие информационных технологий, но только управляющий и познающий варианты включают информационные технологии в ведущий институт, в остальных вариантах информационные технологии только обслуживают ведущий институт и промышленность. При этом управляющий и познающий варианты предполагают разную техническую политику и разное направление развития в информационных технологиях.

Некоторые государства приведены как прототипы сразу для нескольких типов постиндустриального общества, поскольку сейчас (в процессе перехода) они находятся в суперпозиции соответствующих состояний со сравнимыми амплитудами.

17.4.3 Структура перехода

Приведённый здесь «спектр» постиндустриальных обществ практически идентичен приведённому выше спектру постсельских обществ. Это связано с тем, что в конкуренцию за общественные ресурсы каждый раз вступают одни и те же общественные институты, хотя и находящиеся на разных этапах развития.

С классической точки зрения можно предположить, что очередной фазовый общественный переход приходит к собиранию всех соответствующих аттракторов в один, с последующим расхождением.

С квантовой точки зрения можно предположить, что в точке общественного фазового перехода соответствующие (квази)стационарные уровни «энергии» сливаются (вырождаются), после чего снова расходятся.

В самой точке перехода разные формы общественного устройства могут восприниматься обществом как равноправные альтернативы, вне зависимости от прежних достижений и провалов: для бывшего ведущего общественного института накапливаются недавние провалы, уравнивающие в глазах общества прежние достижения, которые плохо замечаются из-за их привычности. В результате «игра» начинается заново с нулевого счёта, а все прежние достижения и инфраструктура воспринимаются как «среда».

Причём в обоих списках 3 варианта из 6 (военный, потребительский и религиозный) представляются тупиковыми (проигрышными в конкурентной борьбе для выбравшего их общества) потому, что ведущий институт в них не ориентирован на развитие.

Для постсельского перехода философское общество, вероятно, также следует признать тупиком: до возникновения науки фундаментальное знание ещё не может рассматриваться как производящая сила и философское общество оказывается слишком похоже на общество потребления, или религиозное общество.

Таким образом основные варианты постиндустриального перехода — управляющий, космический и познающий. Военный вариант, как и в прошлый раз, может выступить в роли сильного конкурента на начальном этапе, если найдётся военное

общество владеющее информационными технологиями (техническими и гуманитарными) в достаточной степени, чтобы противостоять информационному воздействию.

Выбор между космическим (гипериндустриальным) обществом и познающим во многом похож на выбор между военным и познающим: выбор между немедленной экспансией и предварительным накоплением научного задела. Поражение СССР в холодной войне можно интерпретировать как свидетельство преждевременности космического общества

Выбор между бюрократическим и познающим обществом может интерпретироваться (быть может без достаточных оснований) как выбор между приоритетом гуманитарных (управляющих) и естественнонаучных технологий. Исторически, начиная, по крайней мере с конквистадоров, мы неоднократно наблюдали торжество техники над управлением, однако поражение СССР в Холодной Войне продемонстрировало нам обратный пример (проигрыш гипериндустриальных технологий управленческим). Гипериндустриальные технологии не могут быть применены в управлении напрямую. Однако информационные (познавательные) технологии непосредственно способствуют эффективности управления, что даёт надежду на победу познающего общества (наиболее симпатичного лично автору).

Мы можем составить примерную иерархию 6 перечисленных общественных институтов по тому, как они опираются друг на друга. Эта иерархия задаёт что-то наподобие энергетического спектра соответствующих обществ.

	общество	
	постиндустриальное	постсельское
1	наука	промышленность
2	управление	наука
3	гипериндустрия (космос)	религия
4	армия	управление
5	религия	армия
6	потребление	потребление

Каждый следующий пункт списка существенно опирается на все предыдущие и поддерживает все последующие. На достаточно длительных временах в конкурентной борьбе побеждают общества, чьи ведущие институты стоят в первой строке.

В рамках познающего общества возможна ориентация на различные отрасли знания. Эти варианты предполагают существенно разные пути развития, поскольку уже сейчас ресурсы любого сообщества (включая мировое) недостаточны для одновременного исследования актуальных вопросов всех областей науки. Таким образом, уровень «наука» для постиндустриального общества имеет также «тонкую структуру».

17.5 Школоцентризм

В этом разделе автор фантазирует на тему познающего общества, в котором он хотел бы жить в недалёком будущем, и перехода к нему. Возможно, такой раздел кому-то покажется совсем неуместным в книге по квантовой механике. Однако автор начал разрабатывать эти идеи совместно с М.А. Галаховым даже раньше,

чем начал писать эту книгу,⁴ и счёл возможным завершить раздел по «квантовой истории» конкретным предсказанием (возможно/надеюсь самосбывающимся).

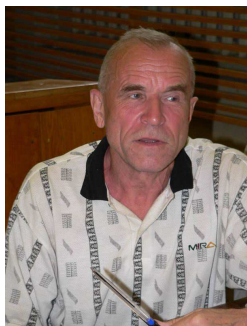


Рис. 17.6: Михаил Алексеевич Галахов

Уже сегодня главными отраслями экономики стали наука и образование. Это видно хотя бы по тому, как за считанные годы появляются одни отрасли промышленности и исчезают другие: производить можно в любой развивающейся стране, важно придумать, что производить и подготовить (а потом и переподготовить) сотрудников и себя («как же ты, уча другого, не учишь себя самого?» Римл. 2:21). *Сегодня, если вы никого не учите или ничему не учитесь, то скорее всего вы зашли в тупик, и стоит подумать, всё ли у вас в порядке с карьерой и личной жизнью.*

Университет — место, где учат, учатся и делают науку, должен стать главной метафорой развития России. Разумеется, страна-университет (как и обычный университет) занимается не только образованием и наукой, но и остальные сферы деятельности следует рассматривать с научно-образовательной точки зрения.

*Последовательный взгляд на все стороны жизни государства и общества с точки зрения образования и науки мы называем школоцентризмом.*⁵

При переходе к школоцентричному обществу все общественные институты будут уподобляться школе и рассматриваться как компоненты системы образования.⁶ Аналогично в индустриальном обществе образование, сельское хозяйство, армия и т.д. уподоблялись промышленности, или обслуживали промышленность.

Бросим беглый взгляд на различные общественные институты с точки зрения школоцентризма:

- *Средняя школа* — естественный центр «школьной общины», состоящей из учителей, учащихся и их родственников, проживающих в округе. Вокруг средней школы строится вся общественная жизнь и экономическая кооперация на низовом уровне, как когда-то вокруг церковного прихода.
- *Местный университет (массовая высшая школа)* — естественный центр городского округа. Общее (без узкой специализации!) высшее образование стремится к всеобщему, и вокруг местного университета строится вся общественная и экономическая жизнь города. Средние школы и промышленные предприятия, сельскохозяйственные производители, выступают в качестве филиалов и/или младших партнёров местного университета.
- *Классический университет и специальные вузы* — центры крупных регионов и/или отраслей.



Рис. 17.7: Михаил Геннадьевич Иванов

⁴ Первая публикация по теме: М.А. Галахов, М.Г. Иванов. *Школоцентризм*, «Потенциал», 2008, №9, 72–77. Текст доступен здесь: <http://theorphys.fizteh.ru/mezhpr/metod/sch.html>.

⁵Под «школой» здесь понимаются все уровни образования, включая дошкольное обучение, среднюю школу и высшую.

⁶Образование мы понимаем в широком смысле, включая в него воспитание и всестороннее развитие человека.

- *Материальное производство* — учебно-производственно-научные подразделения учебных и научных заведений разных уровней и форм.
- *Исследовательские институты* — исследовательские компоненты общей научно-образовательной сети, — участвуют в образовательном процессе в качестве базовых организаций.
- *Армия* — в настоящее время учреждение среднего профессионального (военного) образования, выполняющее функции по защите Родины в качестве учебно-производственной практики. По мере перехода к школоцентричному обществу постепенно преобразуется, и уровень образования повышается до высшего. Пословицу «Плох тот солдат, который не мечтает стать генералом» можно развить до тезиса «*Лучший солдат — курсант военного училища*».
- *Исправительные учреждения* — система коррекционного воспитания/образования в особо сложных случаях.
- *Система переподготовки кадров (бывш. «биржа труда»)* — специальные учебные заведения (или отделения в иных учебных заведениях) для переподготовки и повышения квалификации. Вместо пособия по безработице выплачивается стипендия. Обучающийся считается не безработным, а студентом.

Хотя подобная структура общества может показаться утопичной, реальные предпосылки такому общественному устройству уже существуют в современной России. Более того, такой переход может быть выполнен постепенно по инициативе снизу, принося участникам реальный выигрыш на каждом этапе.

Обычная муниципальная средняя школа является тем пунктом, где интересы большинства местного населения сонаправлены: дети почти у всех ходят в одну школу к одним учителям, по одним улицам, и неблагополучие одних неизбежно затрагивает других. Общие интересы, связанные со школой являются долгосрочными (время обучения в средней школе 10-11 лет). Общие долгосрочные интересы — основание для сотрудничества и самоорганизации. Долгосрочность сотрудничества позволяет минимизировать денежные аспекты сотрудничества. Деньги — суррогат доверия, при долгосрочном сотрудничестве возникает доверие подлинное. Школоцентризм может прорасти снизу. Его основные естественные сторонники, — родители детей школьного возраста, которые всегда составляют главную опору государства и общества.

Таким образом, существуют предпосылки для построения школоцентричного общества на низовом уровне.

Каждая школа — центр мира. Центр Вселенной для учителей, учеников и их родителей и одновременно центр мира-общины. Объединять и опекать маленькие миры средних школ должна высшая школа.

17.6 Заключительные извинения

Эту главу не следует воспринимать слишком легкомысленно — это попытка применить физическую интуицию к гуманитарным вопросам, которые касаются нас всех. Физика при этом может выступать как образец по-настоящему хорошо работающей теории, а также как метафора, дающая нам возможность угадать ответ. Впрочем, нельзя исключать, что некоторые обсуждаемые вопросы окажутся осмысленными и с гуманитарной точки зрения.

Предметный указатель

- β -распад, 22, 61, 250
- М-теория, 223
- q-бит, *см.* кубит
- Азимов, Айзек, 358
- Алиса криптографическая, 190–192, 201–203, 231–233
- Андреев, Александр Фёдорович, 33
- Аристотель, 98, 169, 173
- Аспект, Алан, 187
- Белл, Джон Стюарт, 183, 216, 219
- Беннет, Ч.Х., 232
- Блох, Феликс, 252
- Боб криптографический, *см.* Борис криптографический
- Бом, Давид Джозеф, 185, 219, 220
- Бонди, Г., 165
- Бор, Нильс, 12, 36, 39–41, 159, 183, 211, 215, 217, 220, 224, 228
- Борис криптографический, 190, 191, 201–203, 231
- Борн, Макс, 39
- Брассард, Дж., 232
- Бройль, Луи де, 46, 80, 276
- Буль, Джордж, 183
- Вайнберг, Стивен, 23
- Ватсон, Джон доктор, 359
- Вейль, Герман, 68
- Вигнер, Юджин Поль, 63, 209, 250, 300
- Волович, Игорь Васильевич, 283
- Воробьёв, Николай Николаевич, 183
- Вроньский, Юзеф, 144
- Гайзенберг, Вернер, 36
- Галахов, Михаил Алексеевич, 367
- Гамильтон, Уильям Роуан, 45, 122, 123, 333
- Глэшоу, Шелдон Ли, 23
- Данн, Бренда Дж., 230
- Дарвин, Чарльз, 236
- Джан, Роберт Г., 230
- Дирак, Поль, 71, 111, 121
- Дойч, Дэвид, 226, 234–236
- Доронин, Сергей Иванович, 229
- Евклид, 44
- Зенон Элейский, 173
- Иванов, Михаил Геннадьевич, 1, 205, 367
- Иоффе, Абрам Фёдорович, 25
- Каменец, Фёдор Фёдорович, 223
- Камерлинг-Оннес, Хейке, 32, 33
- Капица, Пётр Леонидович, 32
- Капица, Сергей Петрович, 361
- Кларк, Артур, 26
- Колмогоров, Андрей Николаевич, 159
- Конан-Дойль, Артур, 359
- Кэрролл, Льюис, 2, 38, 61, 205, 206, 250
- Лагранж, Жозеф Луи, 41, 45
- Ландау, Лев Давыдович, 15, 96
- Лаплас, Пьер-Симон, 42, 227
- Лем, Станислав, 42
- Ленин, Владимир Ильич, 205, 214
- Лец, Станислав Ежи, 35
- Лиувилль, Жозеф, 122, 123, 132
- Максвелл, Джеймс Клерк, 21
- Малинецкий, Георгий Геннадиевич, 357
- Манько, Владимир Иванович, 300
- Менский, Михаил Борисович, 230
- Мизра, Байдьянат, 173
- Милликен, Роберт Эндрюс, 25
- Мопертюи, Пьер-Луи, 45
- Нётер, Эмма, 240
- Нахмансон, Рауль С., 213
- Нейман, Иоганн фон, 96, 224
- Ньютон, Исаак, 20, 35, 44

- Паули, Вольфганг, 229
 Пенроуз, Роджер, 32, 170, 228
 Переслегин, Сергей Борисович, 358, 359, 362
 Планк, Макс, 46
 Поппер, Карл, 236
 Пушкин, Александр Сергеевич, 172
- Салам, Абдус, 23
 Сахаров, Андрей Дмитриевич, 25
 Симпликий, 173
 Сударшан, Джордж, 173
- Уилер, Джон, 213
- Фейнман, Ричард, 60, 233
 Фоменко, Анатолий Тимофеевич, 359
- Халфин, Леонид Александрович, 173
 Хренников, Андрей Юрьевич, 183, 220
- Чедвик, Джеймс, 24
- Шрёдингер, Эрвин, 38, 163, 206, 230
 Штурм, Шарль, 132
- Эверетт, Хью III, 181, 199, 224, 236
 Эйлер, Леонард, 45
 Эйнштейн, Альберт, 46, 206, 215
 Эренфест, Павел Сигизмундович, 215, 282
- Юкава, Хидэки, 23
 Юнг, Карл Густав, 229
- адрон, 23–24
 акустика, 49
 алгебра Ли, 119, 309, 310, 318
 амплитуда вероятности, 39, 50, 52, 55–59, 61, 198, 293
 и действие, 296
 условная, 53, 181
 амплитуда комплексная, 39, 46, 47
 амплитуда отражения, 148
 амплитуда прохождения, 148
 античастица, 16–19, 61
 антибарион, 24
 антилептон, 26
 антифермион, 19
 антропный принцип, 226
 апории Зенона, 173
- ассоциативность, 68, 71, 279
 аттрактор Лоренца, 41
- базис, 57, 70, 82, 114
 в пространстве состояний, 51
 взаимоисключающих состояний, 81
 гильбертово пространство, 67
 двухчастичный, 192
 для матрицы плотности, 130, 204
 для оператора, 82, 89, 91
 зависящий от времени, 111
 замена, 57, 85, 86, 89, 115
 импульсный, 88, 104
 координатный, 321
 общий, 70
 одночастичный, 190
 ортонормированный, 92
 поворот, 86
 полнота, 93
 поляризаций, 47
 разложение базисных векторов, 82
 собственных векторов, 70, 90, 91, 104, 115, 127, 162
 сопряжение, 69
- барион, 24
 бегемот, 61, 62
 бит квантовый, *см.* кубит
 бозон, 17
 бозон Хиггса, 17
 бозоны калибровочные W и Z, 20, 22, 61, 62
- вакуум
 классический, 28
- вектор собственный, 69
 вектор состояния, *см.* состояние чистое
 вектор, бра-, 71
 вектор, кет-, 71
- вероятность, 160
- взаимодействие
 слабое, 18
 фундаментальное, 18
- возмущений теория, 42
- волна де Бройля, 244, 276, 285
 волна-пилот, 220
- волновая функция, 38, 51
 координатная, 330
 спиновая, 330
- волновой пакет, 48, 211, 277

- время
 физическое, 166
время жизни, 293
вронскиан, 144, 152
вселенная, 222
 волновая функция, 206, 218, 219, 223
гамильтониан, 103, 104, 112
 возмущённый, 116
 для частицы в потенциале, 132
 квантованного поля, 273
 классический, 43
 классический и квантовый, 113
 невозмущённый, 116
генератор
 вращения, 316
 группы, 309
 симметрии, 113, 246
гильбертово пространство, 67, 71, 92, 311
 оснащённое, 84, 128, 129
 прямая сумма, 329
 сепарабельное, 67, 132
 тензорное произведение, 328
глобол, 24
глоон, 20, 23
 виртуальный, 24
гомоморфизм, 303, 311
 теорема о, 305
 ядро, 305
гравитация петлевая, 223
гравитон, 17, 20
 виртуальный, 20
группа
 абелева, 304
 вращений, 315
 перестановок, 306
 перестановок, чётных, 306
 простая, 305
 свободная, 307
 собственных вращений, 315
 фундаментальная, 319
 циклическая, 307
группа Ли, 309, 318
действие, 40, 46, 59, 295
 мнимое, 295
 размерность, 254
декогеренция, 204, 225
демон Лапласа, 42
детерминизм, 36
 аналитический, 42
 исторический, 357, 362
 лапласовский, 42, 357
диаграммы, 75
диаграммы Фейнмана, 60
дираковские скобки, 71–73
дополнительность, 220–222
 волна-частица, 221
 измерения и эволюции, 221
 интерференции и знания траектории, 221
 истины и ясности, 222
 наблюдателя и квантовой системы, 221
 некоммутирующих наблюдаемых, 221
 соотношение неопределённостей, 221
 сохранности и знания о системе, 222
 творчества и рефлексии, 222
 экспериментальная проверка, 221
друг Вигнера, 207, 209, 223, 224
друг Вигнера
дуализм
 волна-частица, 211, 221
единицы измерения
 атомные, 353
 осцилляторные, 254
единичная матрица, 69
задача Коши, 144
задача Штурма-Лиувилля, 132
замена координат
 каноническая, 246
запутанность, 207, 238
заряд, 16
 барионный, 24
измерение, 37, 38, 80
 непрерывное, 203
 неселективное, 37, 39, 130, 131, 179, 180, 204
 селективное, 37, 39, 130, 131, 180
измеримость одновременная, 243
изоморфизм, 304
импульс
 генератор симметрии, 246
 обобщённый определитель, 244
индекс, 74, 76

- матрицы, 68
- подчёркнутый, 321
- инстантон, 294, 296
- инстантонное движение, 296
- интеграл Лебега, 161
- интерпретации квантовой механики, 166, 196, 205
 - «абстрактное Я» фон Неймана, 223
 - Эверетта, *см.* многомировая
 - декогеренция, 204
 - квантовый заговор, 212
 - копенгагенская, 217, 221
 - копенгагенская новая, 218
 - копенгагенская старая, 217
 - многомировая, 204, 223, 227, 236
 - статистическая, 216
- интерференционный член, 52
- интерференция, 47
- интерферометр
 - Маха-Цандера, 170, 208
 - на котах, 209
- инь и янь, 221
- истина, 222
- квазиимпульс, 247
 - оператор, 251
 - параметр, 251
- квазиклассика, *см.* квазиклассическое приближение
- квазиклассическое квантование, 290
- квазиклассическое приближение, 285–296
- квазичастица, 16, 32, 275
- квант поля, 17, 274
- квантовая история, 169, 358
- квантовая механика
 - новая, 285
 - старая, 285
- квантовая нелокальность, 219
- квантовая телепортация, 191
- квантовая теория гравитации, 182, 223
- квантовая теория поля, 20, 40, 44, 212, 253
- квантовый компьютер, 189, 222
- квантовый параллелизм, 189
- кватернион, 332
 - комплексный, 333
- клеточный автомат, 220
- коммутатор, 70
- групповой, 304
- и скобка Пуассона, 254
- координаты и импульса, 245, 254
- оператора симметрии, 241
- сохраняющейся величины, 243
- конфайнмент, 23
- королева белая, 2
- космологическая постоянная, 274
- космология, 219, 222
 - лапласовская, 227
- кот
 - Шрёдингера, 206–209, 223
 - измерение масти, 102
- коэффициент корреляции, 163
- коэффициенты Клебша–Гордана, 339
- кристалл
 - деформации, 16
 - дифракция на, 276
 - идеальный, 250
 - конечный, 252
 - решётка, 275
 - с дефектами, 252
- кубит, 190, 191, 201, 202, 330, 331
 - геометрия смешанных состояний, 334
 - геометрия чистых состояний, 333
- куперовская пара, 32
- лагранжиан
 - классический, 43
- лептон, 25–26
- лептонное число, 26
- логика
 - квантовая, 231
- логическая операция, 236
 - обратимая, 237
- логический вентиль, 236
 - обратимый, 238
- локальность, 179
- матрица, 68
 - Паули, 193, 330
 - матрица квадратная, 68, 69, 71
 - матрица-столбец, 68, 71
 - матрица-строка, 68, 71
 - ортогональная, 315
- матрица плотности, 38, 75, 88, 93, 96–99, 101, 103, 110, 161, 300–301
- лекогеренция, 204

- смешанное состояние, 176
- мезоатом, 25
- мезомолекула, 25
- мезон, 24
- мезосистема, 222
- механизм Хиггса, 26
- микроскоп Гайзенберга, 49, 163
- множество
 - нечёткое, 198
 - характеристическая функция, 56
- мышь Эйнштейна, 206
- мюонный атом, *см.* мезоатом
- мюонный катализ, 25

- наблюдаемая, 70, 91
 - классическая, 101
- наблюдаемые, 100
- наблюдаемых алгебра, 101
 - классических, 101
- наблюдатель, 38, 196, 205–230
- нейтрино, 62
 - электронное, 16
- нейтрон, 61
- нелокальность, 178
- необратимость, 38, 39
- неравенство Белла, 161, 183–187, 214, 216, 220
- неравенство Коши-Буняковского, 162
- норма
 - вектора, 67
 - оператора, 93
- нормировка
 - матрицы плотности, 96
 - на вероятность, 80
 - на единицу, 79, 260
- обратимость времени, 109
- обратная решётка
 - период, 251
- общество
 - бюрократическое, 363, 364
 - военное, 363
 - информационное, 362
 - когнитивное, 362
 - космическое, 364
 - познающее, 365
 - постиндустриальное, 362
 - постсельское, 362
 - потребления, 362, 363
 - философское, 363
- однопараметрическая группа, 110
 - симметрий, 243
- оператор
 - инверсии, 248
 - Бельрами-Лапласа, 322
 - Гамильтона, *см.* гамильтониан
 - Казимира, 317
 - нормальный, 70
 - эволюции, 108
- оператора диагонализация
 - одновременная двух операторов, 243
- операторная экспонента, 113
- орбиталь, 30
- отклонение среднеквадратичное, 48

- парадокс незакипающего чайника, *см.* эффект Зенона квантовый
- парадокс ЭПР, 185, 186, 207, 214–216
- пентакварк, 24
- перестановка, 306
 - нечётная, 306
 - парная, 306
 - чётная, 306
- плотность вероятности, 50, 151, 296
- плотность потока вероятности, 151, 294, 296–300
- плотность энергии, 22, 47
- подгруппа, 304
 - нормальная, 305
 - тривиальная, 305
- позитрон, 60
- поле, 16
 - «торсионное», 229
 - гравитационное, 21
 - калибровочное, 299
 - квантованное, 212
 - свободных частиц, 273
 - электромагнитное, 22
- полиномы Чебышёва-Эрмита, 262
- поляризатор, 47
- поляризации процедура, 92
- поляризация
 - безмассовой частицы, 337
 - гравитона, 20
 - фотона, 21, 47, 336–337
 - частицы, 16
- постоянная Больцмана, 97

- постоянная Планка, 16, 46, 61, 254, 276, 284, 287, 353
- постулаты Бора, 285
- потенциал Юкавы, 23
- правило Бора-Зоммерфельда, 291
- правило Бора-Зоммерфельда, 292
- правило Борна, 37, 39, 216
- правило Лейбница
 - для коммутатора относительно коммутатора, 119
 - для коммутатора относительно умножения, 119, 281
 - некоммутативное по оператору, 281
 - некоммутативное по числу, 119
- правило параллелограмма, 92
- представление
 - Гайзенберга, 116, 266, 267
 - Шрёдингера, 116
 - взаимодействия, 116
 - группы линейное, 310
 - импульсное, 64, 299
 - координатное, 64
 - неприводимое, 312
 - точное, 310
 - тривиальное, 310, 311
- представление группы, 311
 - линейное, 311
 - точное, 311
 - унитарное, 311
- преобразование
 - вместе, 241
 - вместо, 242
- преобразование Радона, 301
- преобразование Фурье, 48, 86, 88
- приготовление состояния, 131
- принцип Гюйгенса-Френеля, 45
- принцип Ферма, 45
- принцип дополнительности, 220, 224
- принцип соответствия, 39, 292
- принцип экстремального действия, 45, 59
- проективное пространство, 316
- проектор, 56
- проекторнозначная мера, 129, 161
- произведение скалярное, 66, 67
 - физический смысл, 57, 81
- произведение тензорное, 53, 65
- производная
 - ковариантная, 299
 - удлиненная, 299
- производная оператора по времени
 - полная, 118
 - частная, 118
- пропагатор, 60
- пространство L_2 , 38, 67
- пространство l_2 , 67
- пространство конфигурационное, 45, 46, 64, 296
- пространство фазовое, 63
- пространство элементарных событий, 160
- протокол
 - ББ84, 232
- протон, 62
 - распад, 294
- пятно Пуассона, 170
- разделение переменных, 317, 346, 348
- распределение
 - Бозе, 275
 - Гиббса, 97
 - Ферми, 275
- реакция термодерная, 25
- реальность
 - альтернативная, 358
 - текущая, 358
- рефлексия, 222
- рефлексия психологическая, 224
- свёртка, 197
- свёртка функций, 247
- сдвиг, 244
 - левый, 303
- сигма-алгебра, 160
- символ Кронекера, 80
- симметрия, 240
 - Фурье-, 266
 - нарушение, 245
- система многочастичная, 64, 245
- скобка Ли
 - коммутатор, 119
 - скобка Пуассона, 119
- скобка Пуассона, 254
- скорость
 - групповая, 153, 277
 - классическая, 277
 - света, 277
 - фазовая, 277

- скрытые параметры, 219
след
 матрицы, 68
 оператора, 93
 частичный, 95, 98
слон, 61
 зелёный, 61
собственные колебания, 34
событие, 160
сознание, 32, 222, 224, 227
 квантовое, 224
солитон, 211
соотношение неопределённостей, 47, 125, 162
 акустика, 49
 время-энергия, 49
 дополнительность, 221
 координата-импульс, 49
 обобщённое, 162
сопряжённое пространство, 71
состояние
 ЭПР, 185, 216
 запутанное, 176
 квазистационарное, 167, 293
 нелокальное, 177
 основное, 105
 относительное, 181, 182, 197
 связанное, 134
 смешанное, 38, 96
 собственное, 100
 чистое, 38, 66, 96
состояние когерентное, 165
 гармонического осциллятора, 268
 обобщённое, 164
сохранение
 барионного заряда, 24
 лептонного числа, 26
спектр
 дискретный, 161
 наблюдаемой, 79, 100
 непрерывный, 161
 оператора, 100
 физической величины, *см.* спектр наблюдаемой
спектральная плотность, 291
спин, 16, 64, 326
спинор, 76
спиральность, 337
стандартная модель, 21, 26
стрелка прибора, 38, 39, 196, 223
структурные константы, 310
 группы $SO(3)$, 317
супергравитация, 223
суперпозиция состояний, 55
сфера Римана, 333
тёмная материя, 26
таблица умножения
 кватернионов, 332
 матриц Паули, 331
творчество, 222
телепатия квантовая, 190, 191, 202
теорема Блоха, 247, 252
теорема Геллмана-Фейнмана, 284
теорема Лиувилля о фазовом объёме, 123
теорема Нётер
 квантовая, 243
 классическая, 242
теорема Эренфеста, 276, 282–283
теорема вириала, 356
теорема о квантовой телепатии, 202
теория групп, 302
теория измерений, 37
теория квантового заговора, 212
теория относительности
 общая, 182, 219, 222, 229, 274
 специальная, 181
теория поля
 классическая, 211
теория представлений групп, 302
теория струн, 223
тождество Якоби
 для коммутатора, 119
 для скобки Пуассона, 100
томограмма квантовая, 189, 301
туннельный эффект, 59, 293, 294
умножение
 тензорное, 74
унитарная матрица, 69
унитарная эволюция, 37
унитарный оператор, 86
упорядочение нормальное, 269
уравнение Дирака, 212
уравнение Клейна-Фока-Гордона, 212
уравнение Шрёдингера
 временное, 37, 38, 112, 113

- нелинейное, 64
- стационарное, 106, 113
- фаза, 46, 51, 297
- фазовый переход
 - второго рода, 33
- факторгруппа, 305
- факторизация, 65
- фермион, 16
 - фундаментальный, 19
- фонон, 34, 275
- фотон, 20, 46, 47, 60, 274
- холизм, 98
- чёрная дыра, 223
- чётность
 - нарушение, 250
 - пространственная, 250
 - сохранение, 250
- частица
 - векторная, 337
 - истинно нейтральная, 18
 - истинно элементарная, 16
- число собственное, 69
- ширина уровня, 293
- шифровальный блокнот одноразовый, 232
- эксперимент Аспекта, 187, 216, 219
- эксперимент с отложенным выбором, 213
- электромагнитная волна, 46
- электрон, 60
- электрон-вольт, 19
- энергия вакуума, 274
- эрмитова матрица, 69
- эрмитово сопряжение, 69, 71, 73
- эрмитовость гамильтониана, 112
- эффект Зенона
 - антизенона, 175
 - антизенона для сознания, 360
 - для сознания, 360
 - квантовый, 172–176
 - оптический, 174
- эффект Казимира, 274
- ядро оператора, 82, 85
- яма
 - δ -яма, 139, 149
 - глубина ямы, 135, 138
 - глубокая, 135
 - мелкая, 135, 141
 - прямоугольная, 135, 141
- ясность, 222