



ЛЕОНАРД САССКИНД
АРТ ФРИДМАН

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА



ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ
МИНИМУМ



Династия



Leonard Susskind, Art Friedman

Quantum Mechanics: The Theoretical Minimum

BasicBooks

ЛЕОНАРД САССКИНД
АРТ ФРИДМАН

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ МИНИМУМ



Династия

Серия основана в 2007 г.



Москва · Санкт-Петербург · Нижний Новгород · Воронеж
Ростов-на-Дону · Екатеринбург · Самара · Новосибирск

Киев · Харьков · Минск

2015

ББК 22.3
УДК 53
С20

Сасскинд Л., Фридман А.
С20 Квантовая механика. Теоретический минимум / пер. с англ. А. Сергеев. — СПб.: Питер, 2015. — 400 с.: ил. — (Серия «New Science»).

ISBN 978-5-496-01196-9

Классическая механика интуитивна: она ежедневно и многократно используется людьми для выживания. Но до двадцатого века никто и никогда не использовал квантовую механику. Она описывает вещи столь малые, что они полностью выпадают из области восприятия человеческих органов чувств. Единственный способ понять эту теорию, насладиться ее красотой — перекрыть нашу интуицию абстрактной математикой.

Леонард Сасскинд — известный американский ученый — приглашает вас отправиться в увлекательное путешествие в страну квантовой механики. В пути вам пригодятся базовые знания из школьного курса физики, а также основы математического анализа и линейной алгебры. Также необходимо знать кое-что о вопросах, которые рассматривались в первой книге «теоретического минимума» Сасскинда — «Все, что нужно знать о современной физике». Но не страшно, если эти знания несколько подзабылись. Многое автор напомнит и пояснит по ходу дела.

Квантовая механика — необычная теория: согласно ее постулатам, например, мы можем знать все о системе и ничего о ее отдельных частях. По поводу этого и других противоречий в свое время много спорили Эйнштейн и Нильс Бор. Если вы не боитесь сложностей, обладаете пытливым умом, технически грамотны, искренне и глубоко интересуетесь физикой, то этот курс лекций Леонарда Сасскинда придется вам по душе. Книга концентрируется на логических принципах квантовой теории и ставит целью не сгладить парадоксальность квантовой логики, а вытащить ее на дневной свет и попытаться разобраться с непростыми вопросами, которые она поднимает.

ББК 22.3
УДК 53

Права на издание получены по соглашению с BasicBooks.
Все права защищены. Никакая часть данной книги не может быть воспроизведена в какой бы то ни было форме без письменного разрешения владельцев авторских прав.
Информация, содержащаяся в данной книге, получена из источников, рассматриваемых издательством как надежные. Тем не менее, имея в виду возможные человеческие или технические ошибки, издательство не может гарантировать абсолютную точность и полноту приводимых сведений и не несет ответственности за возможные ошибки, связанные с использованием книги.

ISBN 978-0465036677 (англ.) © Basic Books
ISBN 978-5-496-01196-9 © Перевод на русский язык ООО Издательство «Питер», 2015
© Издание на русском языке, оформление ООО Издательство «Питер», 2015



Династия

Фонд некоммерческих программ
«Династия»

основан в 2002 году

Дмитрием Борисовичем Зиминым,

почетным президентом компании «Вымпелком».

Приоритетные направления деятельности Фонда –
поддержка фундаментальной науки и образования в России,
 популяризация науки и просвещение.

«Библиотека Фонда «Династия» — проект Фонда
по изданию современных научно-популярных книг,
 отобранных экспертами-учеными.

Книга, которую вы держите в руках, выпущена
 под эгидой этого проекта.

Более подробную информацию о Фонде «Династия»
 вы найдете по адресу

www.dynastyfdn.com

Содержание

Предисловие	7
Пролог	12
Введение	15
Лекция 1 Системы и эксперименты.....	18
Лекция 2 Квантовые состояния	55
Лекция 3 Принципы квантовой механики	72
Лекция 4 Время и изменение.....	117
Лекция 5 Неопределенность и зависимость от времени.....	157
Лекция 6 Объединение систем: запутанность.....	178
Лекция 7 Еще о запутанности.....	215
Лекция 8 Частицы и волны	272
Лекция 9 Динамика частиц.....	311
Лекция 10 Гармонический осциллятор	351
Приложение	390

Предисловие

Альберт Эйнштейн, который во многих отношениях был отцом квантовой механики, имел с ней характерные отношения любви-ненависти. Его полемика с Нильсом Бором — Бор полностью принимал квантовую механику, а Эйнштейн относился к ней крайне скептически — хорошо известна в истории науки. Общепринятое мнение среди большинства физиков состоит в том, что Бор победил, а Эйнштейн проиграл. На мой взгляд, и, я думаю, это мнение разделяет растущее число физиков, такая оценка несправедлива в отношении взглядов Эйнштейна.

Бор и Эйнштейн оба были очень глубокими мыслителями. Эйнштейн изо всех сил стремился показать, что квантовая механика внутренне противоречива; Бор, однако, всегда находил возражения на его аргументы. Но в своей последней атаке Эйнштейн указал на нечто столь глубокое, столь континтуитивное, столь тревожащее и в то же время столь возбуждающее, что в начале XXI века эта идея вновь вдохновляет физиков-

теоретиков. Единственным ответом Бора на последнее великое открытие Эйнштейна — открытие квантовомеханической запутанности — было его игнорирование.

Явление запутанности — это ключевой факт квантовой механики, факт, который делает ее столь отличной от классической физики. Благодаря ему под вопросом оказалось все наше понимание того, что в физическом мире является реальным. Согласно обыденному интуитивному представлению о физических системах, если мы всё знаем о системе, то есть всё, что в принципе о ней можно знать, то мы знаем также всё о ее частях. Если мы располагаем полным знанием об автомобиле, то знаем всё о его колесах, двигателе, коробке передач — вплоть до последнего винтика, удерживающего обивку. Будет абсурдом, если механик скажет: «Я знаю всё о вашем автомобиле, но, к сожалению, я ничего не могу сказать о его деталях».

Но ведь именно это Эйнштейн объяснял Бору: в квантовой механике можно знать всё о системе и ничего о ее отдельных частях, однако Бор не смог признать этот факт, который также игнорировался в нескольких поколениях учебников по квантовой физике.

Все знают, что квантовая механика странная, но я подозреваю, что лишь очень немногие могут сказать, в каком именно смысле. Формально это книга является курсом лекций по квантовой механике, но она отличается от большинства курсов и учебников. Она концентрируется на логических принципах квантовой

Предисловие

теории и ставит целью не скрыть глубочайшую странность квантовой логики, а вытащить ее на дневной свет.

Я хочу напомнить, что эта книга — одна из нескольких, тесно связанных с серией моих онлайновых лекционных курсов под названием «Теоретический минимум». Мой соавтор Арт Фридман был слушателем этих курсов. Книга много приобрела благодаря тому, что Арт находился в процессе изучения ее предмета и потому был очень чувствителен к вопросам, которые могут смутить начинающего. Процесс написания доставил нам массу удовольствия, и мы пытались отчасти передать эту атмосферу с помощью юмора. Если он вам не понравится, просто игнорируйте его.

Леонард Сасскинд

Когда я получил в Стэнфорде диплом по информатике, то не догадывался, что спустя годы вернусь сюда слушать лекции Леонарда по физике. Моя короткая «карьера» в физике завершилась много лет назад, когда я получил степень бакалавра. Однако у меня сохранился живой интерес к предмету.

И, похоже, я оказался в большой компании — в мире полно людей, кто искренне и глубоко интересуется физикой, хотя жизнь увела их в другом направлении. Эта книга предназначена для всех нас.

До некоторой степени квантовую механику можно оценить на чисто качественном уровне. Однако для того чтобы вполне насладиться ее красотой, нужна мате-

матика. Мы постарались сделать основную часть этой замечательной книги полностью ясной для математически грамотного человека, не имеющего подготовки в области физики. Я считаю, что мы сделали очень хорошую работу, и надеюсь, что вы с этим согласитесь.

Никто не может выполнить такого масштаба проект в одиночку. Сотрудники *Brockman, Inc.* значительно упростили коммерческие аспекты, производственный отдел *Perseus Books* был бесподобен. Хочу выразить искреннюю благодарность Т. Дж. Келлехеру, Рейчел Кинг и Тисси Такаджи. Нам также повезло работать с прекрасным литературным редактором Джоном Сёрци.

Я признателен другим студентам Леонарда, продолжающим учиться у него, за то, что они постоянно поднимают глубокие провокативные вопросы, и за множество вдохновляющих разговоров после занятий. Роб Колуэлл, Todd Крэйг, Монти Фрост и Джон Нэш сделали к рукописи конструктивные замечания. Дже-реми Брэнском и Расс Брайан подробно проверили весь текст и обнаружили множество проблем.

Я благодарен семье и друзьям за поддержку и энтузиазм, в особенности моей дочери Ханне за заботу о повседневных делах.

Помимо любви, поддержки, понимания и чувства юмора моя замечательная жена Маргарет Слоун приложила руку к трети всех рисунков, включая обе картички пивной «Гильбертс Плэйс». Спасибо, Мэгги.

Предисловие

В начале работы Леонард, чувствуя силу моей мотивации, отметил, что один из лучших способов изучить физику — писать о ней. Это правда, но я даже не догадывался, до какой степени, и благодарен за то, что получил шанс это узнать. Огромное спасибо, Леонард.

Арт Фридман

Пролог

Арт взглянул поверх своего пива и сказал:

— Ленни, а не сыграть ли нам партию в игру про Эйнштейна — Бора?

— О'кей, но мне надоело проигрывать. В этот раз ты будешь Артштейном, а я — Эль-Бором. И ты начинаешь.

— Справедливо. Мой первый ход: Бог не играет в кости. Ха-ха, Эль-Бор, одно очко в мою пользу.

— Не так быстро Артштейн, не так быстро. Вы, мой друг, были первым, кто отметил, что квантовая теория принципиально вероятностная. Ай-яй-яй, это двухочковый ход!

— Хорошо, я беру ход назад.

— Так нельзя.

— Можно.

— Нельзя.

Немногие знают, что Эйнштейн в своей статье «О квантовой теории излучения», опубликованной в 1917 году, доказывает, что гамма-излучение подчиняется статистическому закону.

Профессор и лоботряс идут в бар

В *первом томе* я приводил короткие диалоги между Ленни и Джорджем, выдуманными персонажами, отданно напоминающими двух героев Джона Стейнбека. В этом томе «Теоретического минимума» я вдохновлялся рассказами Дэймона Раниона¹. В его мире полно плутов, аферистов, идиотов, манипуляторов и добряков. И еще есть немного обычных людей, живущих одним днем. Действие разворачивается в питейном заведении «Гильбертс Плэйс».

Отправившись прогуляться, Ленни и Арт, двое простаков из Калифорнии, отстали от своего экскурсионного автобуса. Пожелаем им удачи. Она им пригодится.

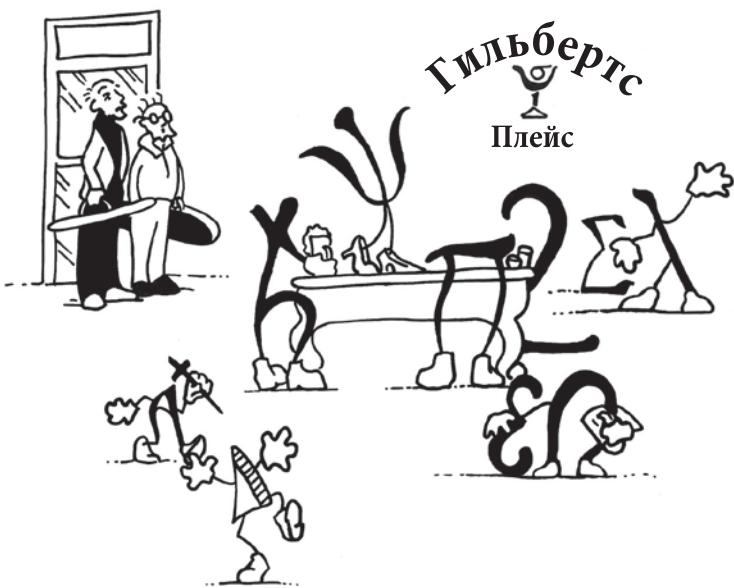
Что вам понадобится

Вам не нужно быть физиком, чтобы отправиться в это путешествие, но вам потребуются базовые знания ма-

¹ Альфред Дэймон Ранион (1880–1946) — американский писатель и журналист. Наибольшую известность ему принесла серия рассказов, описывающая мир нью-йоркского Бродвея эпохи сухого закона. — Примеч. пер.

тематического анализа и линейной алгебры. Также необходимо знать кое-что о вопросах, которые рассматривались в *тome I*. Нестрашно, если ваши математические знания несколько подзабылись. Многое из них мы напомним и поясним по ходу дела, в особенности то, что касается линейной алгебры. В *тome I* изложены основные идеи анализа.

И пусть наш беззаботный юмор не создает у вас впечатления, будто мы пишем для балбесов. Вовсе нет. Наша цель в том, чтобы сделать сложный предмет «настолько простым, насколько это возможно, но не проще того», и мы надеемся немного повеселиться в пути. Увидимся в «Гильбертс Плейс».



Введение

Классическая механика интуитивна; предметы движутся предсказуемым образом. Опытному игроку достаточно на мгновение увидеть летящий мяч, чтобы переместиться, куда нужно, и поймать его. Конечно, внезапный порыв ветра может его обмануть, но лишь потому, что он не принял во внимание все переменные. Есть очевидная причина, делающая классическую механику интуитивной: она ежедневно и многократно используется людьми для выживания, а до них использовалась животными. Но до XX века никто и никогда не использовал квантовую механику. Квантовая механика описывает вещи столь малые, что они полностью выпадают из области действия человеческих органов чувств. Так что следует заключить, что эволюция не выработала у нас интуиции квантового мира. Единственный способ понять ее — перекрыть нашу интуицию абстрактной математикой. К счастью, по некоторым странным причинам, мы выработали способность к такому перекрытию.

Обычно мы сначала изучаем классическую механику, а затем подступаемся к квантовой. Однако квантовая физика намного фундаментальнее классической. Насколько нам известно, квантовая физика дает точное описание всех физических систем, но некоторые предметы достаточно массивны, чтобы вместо квантовой механики можно было с хорошей точностью использовать классическую. Аппроксимация — это все, что представляет собой классическая механика. С логической точки зрения мы должны были бы сначала изучать квантовую механику, но очень немногие учителя физики рекомендуют так поступать. Даже этот курс лекций — «Теоретический минимум» — начинается с классической механики. Тем не менее классическая механика не будет играть почти никакой роли в этом курсе лекций по квантовой теории, за исключением самого конца курса, когда все основные принципы квантовой механики уже будут объяснены. Я считаю, что это по-настоящему правильный способ изучения — не только логически, но и педагогически. На этом пути мы не попадаем в ловушку, где кажется, что квантовая механика — это, по сути, та же классическая механика с добавлением пары новых трюков. Между прочим, технически квантовая механика намного проще классической.

Простейшая классическая система — это базовый логический элемент современной информатики: система с двумя состояниями. Иногда мы называем ее

Введение

битом. Она может представлять собой нечто, способное находиться только в двух состояниях: монету, которая может лежать орлом или решкой, тумблер, который может быть включен или выключен, крошечный магнитик, который может быть сориентирован на север или на юг. Как вы могли ожидать, особенно если знакомились с лекциями *тома I*, теория классических систем с двумя состояниями предельно проста, на самом деле даже скучна. В этом томе мы начнем с квантовой версии системы с двумя состояниями, называемой *кубитом*, которая гораздо интереснее. Для ее понимания нам понадобится совершенно новый способ мышления — новый фундамент логики.

Лекция 1. Системы и эксперименты

Ленни и Арт забредают в «Гильбертс Плэйс».

Арт: Что это? Сумрачная зона? Или комната сме-ха? Ничего не понимаю.

Ленни: Расслабься. Ты привыкнешь.

Арт: Где тут путь наверх?

1.1. Квантовая механика — другая

Что же такого особенного в квантовой механике? Почему ее так трудно понять? Очень легко свалить все на «сложную математику», и, возможно, доля истины в этом будет. Но этим вопрос далеко не исчерпывается. Многие люди, не специализирующиеся на физике, легко осваивают классическую механику и теорию поля, которые требуют сложной математики.

Квантовая механика имеет дело с поведением объ-ектов, настолько маленьких, что мы, люди, просто не

снабжены никакими средствами, чтобы их увидеть. Отдельные атомы по размерам находятся у верхнего края квантовой шкалы масштабов. Часто в качестве объектов изучения выступают электроны. *Наши органы чувств совершенно не приспособлены для восприятия движения отдельного электрона. Лучшее, что мы можем сделать — это попробовать понять электроны и их движение как математические абстракции.*

«Ну и что? — спросит скептик. — Классическая механика до краев полна математическими абстракциями: безмассовые точки, абсолютно твердые тела, инерциальные системы отсчета, положения, моменты, поля, волны — этот список можно продолжать и продолжать. Нет ничего нового в математических абстракциях». Это, в самом деле, справедливое замечание, классический и квантовый миры действительно имеют много общего. Однако квантовая механика отличается в двух важных аспектах.

1. *Другие абстракции.* Квантовые абстракции фундаментально отличаются от классических. Например, мы увидим, что идея состояния в квантовой механике концептуально иная, чем у ее классического аналога. Состояния описываются различными математическими объектами и имеют различную логическую структуру.

2. *Состояния и измерения.* В классическом мире связь между состоянием системы и результатом выполненного над ней измерения совершенно однозначна. Фактически она тривиальна. Метки, описывающие состояния (положение и импульс частицы, например), —

это те же метки, что характеризуют измерения этого состояния. Иначе говоря, можно осуществить эксперимент по определению состояния системы. В квантовом мире это не так. Состояния и измерения — это две разные вещи, и связь между ними тонкая и неинтуитивная.

Эти идеи являются крайне важными, и мы будем возвращаться к ним снова и снова.

1.2. Спины и кубиты

Понятие спина появилось из физики элементарных частиц. Помимо положения в пространстве, частицы имеют дополнительные свойства. Например, они могут обладать или не обладать электрическим зарядом или массой. Электрон — это не то же самое, что夸克或нейтрино. Но даже частица конкретного типа, такая как электрон, не полностью характеризуется своим положением. Связанная с электроном дополнительная степень свободы называется *спином*. Упрощенно спин можно изобразить маленькой стрелочкой, указывающей в определенном направлении, но такая наивная картинка является слишком классической, чтобы корректно отражать реальную ситуацию. Спин электрона настолько квантовомеханичен, насколько это вообще возможно для системы, и любая попытка визуализировать его классически будет крайне неточной.

Мы можем и будем пользоваться абстрактной идеей спина, забыв, что он присоединен к электрону. Кванто-

вый спин — это система, которую можно изучать саму по себе. Фактически квантовый спин, изолированный от электрона, который переносит его в пространстве, является одновременно и простейшей, и самой квантовой из всех систем.

Изолированный квантовый спин — это пример общего класса систем, называемых кубитами (квантовыми битами), которые играют в квантовом мире ту же роль, что и логические биты в определении состояния компьютера. Многие системы — возможно, даже все системы — могут быть построены путем комбинирования кубитов. Так что, изучая их, мы узнаем о гораздо большем.

1.3. Эксперимент

Давайте конкретизируем эти идеи, используя простейший возможный пример. В первой лекции *тома I* я начал разговор с очень простой детерминистической системы — монеты, у которой виден либо аверс (A), либо реверс (P). Ее можно назвать системой с двумя состояниями, или битом с двумя состояниями A и P . Говоря более формально, мы вводим «степень свободы», обозначаемую σ , которая может принимать два значения, а именно $+1$ и -1 . Состояние A заменяется на

$$\sigma = +1,$$

а состояние P на

$$\sigma = -1.$$

В классике пространство состояний этим исчерпывается. Система находится либо в состоянии $\sigma = +1$, либо в состоянии $\sigma = -1$, и между ними ничего нет. В квантовой механике мы рассматриваем эту систему как кубит.

В *томе I* мы также обсуждали простые законы эволюции, которые говорят нам, как изменяется состояние от мгновения к мгновению. Простейший из таких законов состоит в том, что просто так ничего не происходит. В этом случае, если мы переходим от одного дискретного момента (n) к следующему ($n + 1$), то закон эволюции будет выглядеть так:

$$\sigma(n+1) = \sigma(n). \quad (1.1)$$

Сделаем явным скрытое предположение, которое мы оставили без внимания в *томе I*. Эксперимент включает не только изучаемую систему. Он также невозможен без прибора \mathcal{A} , выполняющего измерения и записывающего их результаты. В случае системы с двумя состояниями прибор взаимодействует с системой (спином) и записывает значение σ . Будем считать прибор черным ящиком¹ с окошком, в котором отображается результат измерения. Также на приборе есть стрелка с пометкой «верх здесь». Эта стрелка важна, поскольку она показывает, как прибор ориентирован в пространстве, и ее направление будет влиять на результаты измерений. Мы начнем с того, что направим ее вдоль

¹ Термин «черный ящик» означает, что мы не знаем, что находится внутри прибора и как он работает. Но будьте уверены, что в нем нет кота.

оси z (рис. 1.1). Первоначально мы не знаем, каково состояние системы: $\sigma = +1$ или $\sigma = -1$. Наша цель — выполнить эксперимент и определить значение σ .

До того как прибор начнет взаимодействие со спином, окошко на нем пустое (на рисунке это отмечено вопросительным знаком). После того как он измерит σ , в окошке будет либо $+1$, либо -1 . Взглянув на прибор, мы определим значение σ . Вся эта процедура представляет собой очень простой эксперимент, предназначенный для измерения σ .

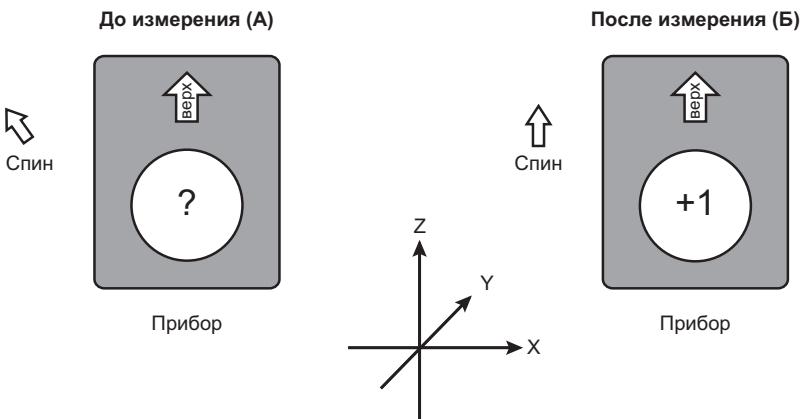


Рис. 1.1. А — спин и не содержащий кота прибор до начала каких-либо измерений. Б — спин и прибор после выполнения одного измерения, давшего результат $\sigma_z = +1$. Спин теперь приготовлен в состоянии $\sigma_z = +1$.

Если спин не подвергается возмущениям, а прибор сохраняет прежнюю ориентацию, все последующие изменения будут давать тот же самый результат.

Оси координат показывают наше соглашение по обозначению направлений в пространстве

Теперь, когда мы измерили σ , вернем прибор в исходное состояние и, не возмущая спин, измерим значение σ еще раз. Если предполагать, что действует простой закон (1.1), мы должны получить тот же результат, что и в первый раз. За результатом $\sigma = +1$ последует снова $\sigma = +1$. И точно так же для $\sigma = -1$. Так будет при любом числе повторений. Это хорошо, поскольку позволяет нам подтвердить результат эксперимента. Мы также можем сказать следующее: первое взаимодействие с прибором A *приготовило* систему в одном из двух состояний. Последующие эксперименты *подтверждают* это состояние. Пока нет никаких различий между классической и квантовой физикой.

Прибор развернут на 180°

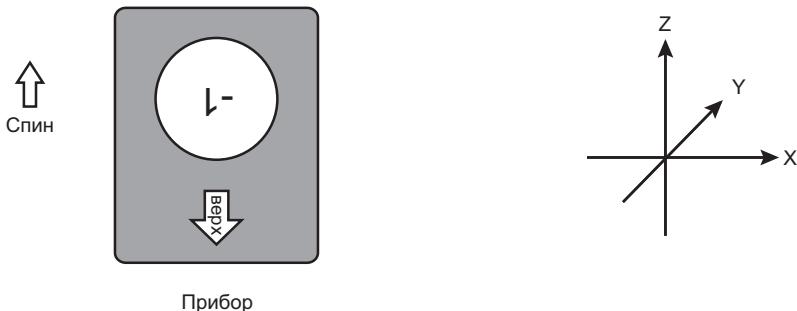


Рис. 1.2. Прибор перевернут без возмущения ранее измеренного спина. Новое измерение дает результат $\sigma_z = -1$

Теперь сделаем кое-что новое. После приготовления спина путем его измерения прибором A перевернем прибор вниз головой и затем снова измерим σ (рис. 1.2).

При этом мы обнаружим, что если первоначально было приготовлено $\sigma = +1$, то перевернутый прибор выдаст $\sigma = -1$. И аналогично, если первоначально было приготовлено $\sigma = -1$, перевернутый прибор покажет $\sigma = +1$. Другими словами, переворачивание прибора обменивает $\sigma = +1$ и $\sigma = -1$. Исходя из этих результатов, можно заключить, что σ — это степень свободы, связанная с ощущением направления в пространстве. Например, если бы σ представляла собой какого-то рода ориентированный вектор, было бы естественно ожидать, что переворачивание прибора изменит показания на обратные. Простое объяснение состоит в том, что прибор измеряет компоненту вектора вдоль выделенной в приборе оси. Верно ли это объяснение для всех конфигураций?

Если мы убеждены, что спин — это вектор, то было бы естественным описывать его тремя компонентами σ_z , σ_x и σ_y . Когда прибор повернут вверх вдоль оси z , он настроен на измерение σ_z .

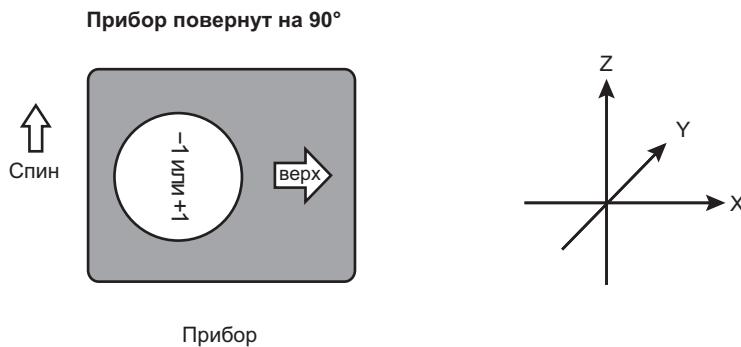


Рис. 1.3. Прибор повернут на 90° . Новое измерение дает $\sigma_x = -1$ с 50-процентной вероятностью

Пока еще нет отличий между классической и квантовой физикой. Различие становится заметным при повороте прибора на произвольный угол, скажем на $\frac{\pi}{2}$ радиан (90°). Сначала прибор расположен вертикально (стрелка «верх» направлена вдоль оси z). Спин приготовлен в состоянии $\sigma = +1$. Затем мы поворачиваем \mathcal{A} так, чтобы стрелка «верх» указывала вдоль оси x (рис. 1.3), и выполняем измерение, которое по нашему предположению даст x -компоненту спина σ_x .

Если окажется, что σ действительно представляет собой компоненту вектора в проекции на ось «верх», то следует ожидать, что она будет равна нулю. Почему? Первоначально мы подтвердили, что величина σ направлена вдоль оси z , а значит, ее компонента вдоль оси x должна быть равна нулю. Но, измеряя σ_x , мы обнаруживаем сюрприз: вместо $\sigma_x = 0$ прибор выдает либо $\sigma_x = +1$, либо $\sigma_x = -1$. Прибор \mathcal{A} очень упрям и независимо от того, в какую сторону он ориентирован, отказывается давать какие-либо результаты кроме $\sigma = \pm 1$. Если спин действительно является вектором, то это очень странный вектор.

И все же мы обнаружили нечто интересное. Допустим, мы повторяем эту операцию многократно, каждый раз следуя одной и той же процедуре.

- Вначале выставить \mathcal{A} вдоль оси z и приготовить $\sigma = +1$.
- Повернуть прибор так, чтобы он был ориентирован вдоль оси x .

- Измерить σ .

Повторные эксперименты выдают случайную последовательность плюс-единиц и минус-единиц. Детерминизм рушится, но особым образом. Если проделать все это множество раз, то обнаружится, что число событий $\sigma = +1$ и событий $\sigma = -1$ статистически одинаково. Иными словами, среднее значение σ равно нулю. Вместо классического результата, а именно равенства нулю компоненты σ в проекции на ось x , мы обнаруживаем, что нулю равен *средний результат этих повторных измерений*.

Прибор повернут
на произвольный угол

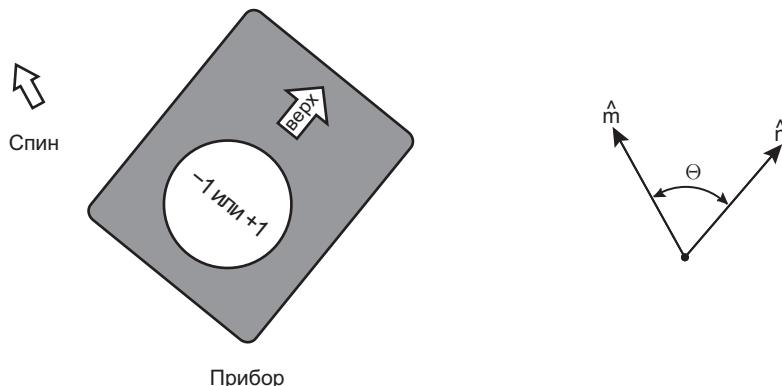


Рис. 1.4. Прибор повернут на произвольный угол в плоскости xz . Средний результат измерения равен $\hat{n} \cdot \hat{m}$

Теперь проделаем все то же самое снова, но вместо того, чтобы выставлять A вдоль оси x , повернем его

в произвольном направлении вдоль единичного вектора¹ \hat{n} . В классическом случае если σ — вектор, то следует ожидать, что результатом эксперимента будет компонента σ вдоль оси \hat{n} . Если вектор \hat{n} направлен под углом θ к оси z , то классическим результатом было бы $\sigma = \cos \theta$. Но как вы, возможно, уже догадываетесь, каждый раз, выполняя эксперимент, вы получаете либо $\sigma = +1$, либо $\sigma = -1$. При этом статистически результаты распределены так, что их среднее значение равно $\cos \theta$.

Эта ситуация, конечно, носит более общий характер. Мы не обязаны в начале ориентировать \mathcal{A} вдоль оси z . Выберите любое направление \hat{m} и начните, направив стрелку «верх» вдоль \hat{m} . Приготовьте спин так, чтобы прибор дал значение $+1$. Затем, не воздействуя на спин, поверните прибор в направлении \hat{n} , как показано на рис. 1.4. Новый эксперимент с тем же спином даст случайный результат ± 1 , но со средним значением, равным косинусу угла между \hat{n} и \hat{m} . Иными словами, среднее значение будет $\hat{n} \cdot \hat{m}$.

В квантовой механике для обозначения статистического среднего значения величины Q используется скобочная нотация Дирака: $\langle Q \rangle$. Результаты наших экспериментальных исследований можно резюмировать следующим образом: если начать, сориентировав \mathcal{A} вдоль оси \hat{m} и добившись $\sigma = +1$, то последующее из-

¹ Стандартное обозначение единичного (то есть единичной длины) вектора — помещение над буквой, представляющей вектор, «крышечки» (англ. *caret*).

мерение с помощью \hat{A} , ориентированного вдоль \hat{n} , дает статистический результат

$$\langle \sigma \rangle = \hat{n} \cdot \hat{m}.$$

Отсюда мы узнаем, что квантовомеханические системы недетерминистические — результаты экспериментов могут быть статистически случайными, — но если мы повторяем эксперимент многократно, средние значения величин следуют ожиданиям классической физики, по крайней мере пока.

1.4. Эксперименты не бывают безобидными

В каждом эксперименте есть внешняя система — прибор, который должен взаимодействовать с изучаемой системой, фиксируя результаты. В этом смысле любой эксперимент инвазивен. Это верно и для классической, и для квантовой физики, но только квантовая придает этому большое значение. Почему? При классическом подходе идеальный измерительный прибор оказывает исчезающее малое воздействие на измеряемую им систему. Классические эксперименты могут быть сколь угодно щадящими и все равно давать точные и воспроизводимые результаты. Скажем, направление стрелки можно определить по отраженному ею свету, сфокусированному в изображение. Хотя для построения изображения свет должен иметь достаточно малую

длину волны, в классической физике ничто не мешает получить изображение с помощью сколь угодно слабого света. Другими словами, этот свет может нести сколь угодно мало энергии.

В квантовой механике ситуация принципиально иная. *Любое* взаимодействие достаточно сильное, чтобы измерить какую-то характеристику системы, необходимым образом является достаточно сильным, чтобы нарушить некоторые другие характеристики той же системы. Таким образом, вы ничего не можете узнать о квантовой системе, не изменив в ней что-то другое.

Это должно быть ясно в примерах с \mathcal{A} и σ . Допустим, мы начали $\sigma = +1$ вдоль оси z . Если вновь измерить σ с помощью \mathcal{A} вдоль оси z , мы подтвердим прежнее значение. Это можно делать снова и снова с неизменным результатом. Но рассмотрим такую возможность: между двумя последовательными измерениями вдоль оси z мы поворачиваем \mathcal{A} на 90° и выполняем промежуточное измерение, а затем возвращаем прибор в исходное положение. Будут ли последующие измерения вдоль оси z подтверждать исходное измерение? Ответ очевидно отрицательный. Промежуточное измерение вдоль оси x оставит спин для следующего измерения в совершенно случайном состоянии. Нет никакого способа выполнить промежуточное определение спина, не нарушая полностью последнее измерение. Можно сказать, что измерение одной компоненты спина разрушает информацию о других его компонентах. На самом деле просто невозможно одновременно знать

компоненты спина вдоль двух разных осей (во всяком случае, воспроизводимым образом). Есть нечто принципиально различное между состоянием квантовой системы и состоянием классической системы.

1.5. Суждения

Пространство состояний классической системы — это математическое множество. Если система — это монета, то пространство ее состояний — множество, состоящее из двух элементов A и P . Используя обозначения теории множеств, можно это записать в виде $\{A, P\}$. Если система — это шестигранная игральная кость, то пространство состояний содержит шесть элементов, обозначаемых $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Логика теории множеств называется *булевой*¹ логикой. Булева логика — это просто формализованная версия привычной нам классической логики суждений.

Фундаментальная идея булевой логики — понятие истинностного значения. Истинностное значение суждения — это либо *истина*, либо *ложь*. Ничего промежуточного между ними не допускается. В теории множеств соответствующее понятие называется подмножеством. Грубо говоря, суждение истинно для всех элементов в соответствующем ему подмножестве и ложно для всех элементов, которые в это подмножество не входят.

¹ Названа в честь английского математика Джорджа Буля (1815–1864). — Примеч. пер.

Например, если множество представляет возможные состояния игральной кости, то можно рассмотреть следующие суждение:

A: Кость выпала гранью с нечетным числом.

Соответствующее подмножество содержит три элемента $\{1, 3, 5\}$.

Другое суждение утверждает:

B: На кости выпало число меньше 4.

Соответствующее подмножество содержит состояния $\{1, 2, 3\}$.

Для каждого суждения есть противоположное (его также называют отрицанием). Например:

не A: Кость не выпала гранью с нечетным числом.

Подмножество для этого отрицательного суждения $\{2, 4, 6\}$.

Есть операции для объединения суждений в более сложные суждения, и наиболее важные из них — **или**, **и** и **не**. Только что мы видели пример использования операции **не**, которая применяется к одному подмножеству или суждению. Операция **и** проста и применяется к парам суждений¹. Она говорит, что они оба истинны. В применении к двум подмножествам операция **и** дает элементы, общие для обоих, то есть *пересечение* двух подмножеств. В примере с игральной костью пересечение подмножеств *A* и *B* — это подмножество, состоящее из элементов, которые одновременно нечетные и меньше 4. На рис. 1.5 с помощью диаграммы Венна показано, как это работает.

¹ Операцию **и** можно ввести для многих суждений, но мы будем рассматривать ее только для двух. То же верно и для **или**.

Пространство состояний одной игральной кости

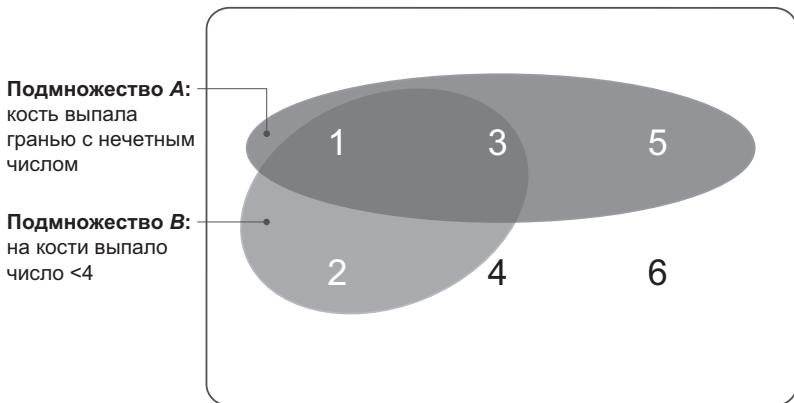


Рис. 1.5. Пример классической модели пространства состояний. Подмножество A соответствует суждению «кость выпала гранью с нечетным числом».

Подмножество B : «на кости выпало число <4 ».

Темно-серой заливкой выделено пересечение A и B , которое соответствует суждению (A и B).

Белые цифры — элементы объединения A и B , соответствующего суждению (A или B)

Операция **или** похожа на **и**, но имеет одну особенность. В повседневной речи слово «или» обычно используется в исключающем смысле — эта исключающая версия **или** истинна, если истинно одно из двух суждений, но не оба вместе. Однако булева логика использует **инклузивную** версию **или**, которая истинна в том случае, когда истинно одно или оба суждения. Так, при использовании инклузивного **или** суждение

Альберт Эйнштейн открыл теорию относительности или Исаак Ньютон был англичанином

является истинным. То же относится к суждению

Альберт Эйнштейн открыл теорию относительности или Исаак Ньютона был русским.

Инклузивное **или** становится ложным, только если ложны оба суждения. Например:

Альберт Эйнштейн открыл Америку¹ или Исаак Ньютона был русским.

Инклузивное **или** имеет теоретико-множественную интерпретацию в виде объединения двух множеств. Это подмножество, содержащее все элементы, входящие в оба объединяемых подмножества или хотя бы в одно из них. В примере с игральной костью (A или B) означает подмножество $\{1, 2, 3, 5\}$.

1.6. Проверка классических суждений

Вернемся к простейшей квантовой системе, состоящей из одиночного спина, и к различным суждениям, истинность которых можно проверять с помощью прибора A . Рассмотрим следующие два суждения:

A : z -компоненты спина равна +1.

B : x -компонента спина равна +1.

¹ Впрочем, Эйнштейн, возможно, и в самом деле открыл Америку. Но он был не первым.

Каждое из них осмысленно и может быть проверено путем ориентирования \mathcal{A} вдоль соответствующей оси. Отрицание каждого из них тоже осмысленно. Например, отрицанием первого суждения будет

не A : z -компоненты спина равна -1 .

Теперь рассмотрим композиции этих суждений:

(A или B): z -компоненты спина равна $+1$ или x -компоненты спина равна $+1$.

(A и B): z -компоненты спина равна $+1$ и x -компоненты спина равна $+1$.

Как проверить суждение (A или B)? Если бы спины вели себя классически (что, конечно, не так), мы могли бы действовать следующим образом¹.

- Осторожно измерить σ_z и записать значение. Если оно равно $+1$, то работа окончена: суждение (A или B) истинно. Если σ_z равно -1 , перейти к следующему шагу.
- Осторожно измерить σ_x . Если получится $+1$, то суждение (A или B) истинно. Если нет, значит ни σ_z , ни σ_x не равно $+1$ и (A или B) ложно.

А вот альтернативная процедура, в которой изменен порядок двух измерений. Чтобы подчеркнуть это изменение порядка, мы назовем новую процедуру (B или A).

¹ Помните, что классический смысл σ отличается от квантовомеханического. В классическом подходе σ — это обычный 3-вектор; σ_x и σ_z соответствуют пространственным компонентам.

- Осторожно измерить σ_x и записать значение. Если оно равно $+1$, то работа окончена: суждение (B или A) истинно. Если σ_x равно -1 , перейти к следующему шагу.
- Осторожно измерить σ_z . Если оно равно $+1$, то суждение (B или A) истинно. Если нет, значит, ни σ_x , ни σ_z не равно $+1$ и (B или A) ложно.

В классической физике обе эти процедуры дают одинаковый результат. Причина в том, что измерения могут быть сколь угодно щадящими — настолько, что они не воздействуют на результаты последующих измерений. Таким образом, суждение (A или B) имеет точно такой же смысл, как и суждение (B или A).

1.7. Проверка квантовых суждений

Теперь мы займемся квантовым миром, который я описал ранее. Представим себе ситуацию, в которой кем-то (или чем-то) неизвестным спин тайно был приготовлен в состоянии $\sigma_z = +1$. Наша задача состоит в том, чтобы с помощью прибора \mathcal{A} определить, истинно суждение (A или B) или ложно. Мы попытаемся использовать описанные выше процедуры.

Начнем с измерения σ_z . Поскольку неизвестный агент все подготовил, мы обнаружим, что $\sigma_z = +1$. Продолжать нет надобности: (A или B) истинно. Тем не менее мы можем проверить σ_x , просто чтобы посмотреть, что случится. Результат непредсказуем. Мы случайным

образом обнаруживаем, что $\sigma_x = +1$ или $\sigma_x = -1$. Но ни один из этих исходов не влияет на истинность суждения (*A или B*).

А теперь изменим порядок измерений. Как и прежде, назовем эту реверсированную процедуру (*B или A*), и на этот раз мы сначала будем измерять σ_x . Поскольку неизвестный агент установил спин в $+1$ вдоль оси z , измерение σ_x дает случайный результат. Если окажется, что $\sigma_x = +1$, то мы закончили: (*B или A*) истинно. Но предположим, что мы получили противоположный результат: $\sigma_x = -1$. Спин ориентирован в направлении $-x$. Сделаем короткую паузу, чтобы убедиться в понимании того, что случилось. В результате нашего первого измерения спин больше не находится в исходном состоянии $\sigma_z = +1$. Он пришел в новое состояние — либо $\sigma_x = +1$, либо $\sigma_x = -1$. Пожалуйста, задержитесь на этой идее, чтобы как следует прочувствовать. Невозможно переоценить ее важность.

Теперь мы готовы проверить вторую половину суждения (*B или A*). Повернем прибор \mathcal{A} вдоль оси z и измерим σ_z . Согласно квантовой механике, результат случайным образом будет ± 1 . Это значит, что с вероятностью 25 % в эксперименте будет получено $\sigma_x = -1$ и $\sigma_z = -1$. Другими словами, с вероятностью $\frac{1}{4}$ мы обнаружим, что (*B или A*) ложно; это происходит несмотря на тот факт, что неизвестный агент изначально гарантировал, что $\sigma_z = +1$.

Очевидно, в этом примере инклузивное или несимметрично. Истинность (*A* или *B*) может зависеть от порядка, в котором мы проверяем два суждения. Это далеко не мелочь; это не только означает, что законы квантовой физики отличаются от своих классических аналогов, но также что сами основания логики в квантовой физике другие.

Но что же можно сказать про (*A* или *B*)? Допустим, наше первое измерение выдало $\sigma_z = +1$, а второе — $\sigma_x = +1$. Это, безусловно, возможный исход. Казалось бы, можно признать, что (*A* или *B*) истинно. Но в науке, особенно в физике, истинность суждения предполагает, что его можно проверить последующим наблюдением. В классической физике наблюдения считаются настолько аккуратными, что не влияют на последующие эксперименты, которые подтверждают ранее полученный результат. Монета, которая выпала решкой, не перевернется орлом из-за того, что ее пронаблюдали, по крайней мере в классике. В квантовой механике второе измерение ($\sigma_x = +1$) разрушает возможность проверки первого. Как только σ_x подготовлено вдоль оси *x*, новое измерение σ_z даст случайный результат. Таким образом, (*A* или *B*) невозможно подтвердить: вторая часть эксперимента мешает возможности подтверждения первой части.

Если вы кое-что знаете о квантовой механике, то, вероятно, поняли, что мы говорим о принципе неопределенности. Принцип неопределенности применим не

только к координате и импульсу (или скорости); он применим ко многим парам измеримых величин. В случае спина он относится к суждениям, включающим две различные компоненты σ . В случае координаты и импульса мы можем рассматривать следующие два суждения:

некоторая частица имеет координату x ;

та же самая частица имеет импульс p .

Из них можно построить два составных суждения:

частица имеет координату x **и** частица

имеет импульс p ;

частица имеет координату x **или** частица

имеет импульс p .

Несмотря на свою корявость, оба эти суждения имеют смысл в естественном языке и в классической физике. Однако в квантовой физике первое из этих утверждений совершенно бессмысленно (даже не ошибочно), а смысл второго радикально отличается от того, что вы могли подумать. Все это приводит к глубоким логическим различиям между классическим и квантовым понятиями состояния системы. Для объяснения квантового понятия состояния потребуется абстрактная математика, так что прервемся для небольшой интерлюдии, касающейся комплексных чисел и векторных пространств. Потребность в комплексных величинах станет ясна в дальнейшем, когда мы изучим математическое представление спиновых состояний.

1.8. Математическая интерлюдия: комплексные числа

Всякий, кто добрался до этого раздела «Теоретического минимума», знает о комплексных числах. Тем не менее я потрачу несколько строк, чтобы напомнить о самом важном. На рис. 1.6 показаны самые основные элементы теории.

Комплексное число z — это сумма вещественного числа и мнимого числа. Это можно записать в виде

$$z = x + iy,$$

где x и y — вещественные числа, а $i^2 = -1$. Комплексные числа можно складывать, умножать и делить по обычным правилам арифметики. Их можно визуализировать как точки на комплексной плоскости с координатами x , y . Их также можно представить в полярных координатах:

$$z = re^{i\theta} = r(\cos\theta + i \sin\theta).$$

Сложение комплексных чисел легко выполнить в компонентной форме: просто сложить покомпонентно. Аналогично их перемножение легко выполняется в полярной форме — надо перемножить радиусы и сложить углы:

$$(r_1 e^{i\theta_1}) (r_2 e^{i\theta_2}) = (r_1 r_2) e^{i(\theta_1 + \theta_2)}.$$

У каждого комплексного числа z есть комплексно сопряженное z^* , которое получается путем простой замены знака у мнимой части. Если

$$z = x + iy = re^{i\theta},$$

то

$$z = x - iy = re^{-i\theta}.$$

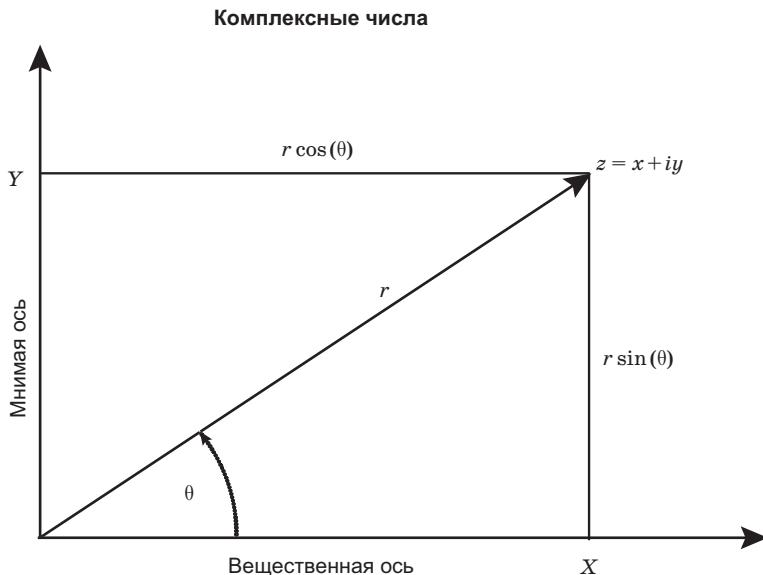


Рис. 1.6. Два основных способа представления комплексных чисел. В декартовом представлении x и y — это горизонтальная (вещественная) и вертикальная (мнимая) компоненты. В полярном представлении r — это радиус, а θ — угол с направлением оси x . В обоих случаях требуется два вещественных числа, чтобы задать одно комплексное число

Произведение комплексного числа с его сопряженным всегда дает положительное вещественное число:

$$z^*z = r^2.$$

И конечно, любое комплексно сопряженное число само является комплексным числом, но часто бывает полезно думать, что z и z^* принадлежат различным «дуальным» числовым системам. Дуальность¹ здесь означает, что для каждого z существует единственное z^* , и наоборот.

Существует специфический класс комплексных чисел, которые я буду называть «фазовыми множителями». Фазовый множитель — это просто комплексное число, r -компоненты которого равна 1. Если z — фазовый множитель, то выполняются следующие соотношения:

$$\begin{aligned} z^*z &= 1, \\ z &= e^{i\theta}, \\ z &= \cos\theta + i \sin\theta. \end{aligned}$$

1.9. Математическая интерлюдия: векторные пространства

1.9.1. Аксиомы

Для классической системы пространство состояний — это множество (множество возможных состояний), и логика классического пространства — булева. Это кажется естественным, и трудно представить себе какую-

¹ В русском языке также используются термины «двойственность» и «сопряженность». — *Примеч. пер.*

либо другую возможность. Тем не менее реальный мир строится по совершенно другим принципам, по крайней мере там, где важна квантовая механика. Пространство состояний квантовой системы *не является* математическим множеством¹; это *векторное пространство*. Связи между элементами векторного пространства отличаются от связей между элементами множества, и логика суждений здесь тоже другая.

Но прежде чем говорить о векторных пространствах, я должен прояснить термин *вектор*. Как вы знаете, этот термин используется для обозначения объекта в обычном пространстве, обладающего величиной и направлением. Такие векторы имеют три компоненты, соответствующие трем измерениям пространства. Я бы хотел, чтобы вы выкинули из головы это понятие вектора. С этого момента, если я имею в виду объект с величиной и направлением в обычном пространстве, я буду явно называть его *3-вектором*. Математическое векторное пространство — это абстрактная конструкция, которая может быть, а может не быть связана с обычным пространством. Оно может иметь любое число измерений — от 1 до ∞ — и может иметь в качестве компонент целые, вещественные числа и даже более общие вещи.

Векторные пространства, которые мы используем для определения квантовомеханических состояний, называются *гильбертовыми пространствами*. Мы не

¹ Если быть немного точнее, мы не концентрируемся на теоретико-множественных свойствах пространств состояний, хотя, конечно, их можно рассматривать как множества.

будем приводить здесь их определение, но вы все равно можете добавить этот термин в свой словарь. Когда в квантовой механике вы встречаете термин *гильбертова пространство*, это ссылка на пространство состояний. Гильбертово пространство может иметь как конечное, так и бесконечное число измерений.

В квантовой механике векторное пространство состоит из элементов вида $|A\rangle$, называемых *кет-векторами*, или просто *кетами*. Вот аксиомы, которые мы будем использовать для определения векторного пространства состояний квантовой системы (z и w — комплексные числа).

1. Сумма любых двух кет-векторов также является кет-вектором:

$$|A\rangle + |B\rangle = |C\rangle.$$

2. Сложение векторов коммутативно:

$$|A\rangle + |B\rangle = |B\rangle + |A\rangle.$$

3. Сложение векторов ассоциативно:

$$\{|A\rangle + |B\rangle\} + |C\rangle = |A\rangle + \{|B\rangle + |C\rangle\}.$$

4. Существует единственный вектор 0 такой, что при добавлении его к любому другому кету снова получается тот же самый кет:

$$|A\rangle + 0 = |A\rangle.$$

5. Для любого данного кета $|A\rangle$ существует единственный кет $-|A\rangle$, такой что

$$|A\rangle + (-|A\rangle) = 0.$$

6. Любой данный кет $|A\rangle$ и любое комплексное число z можно перемножить и получить новый кет. Такое умножение на скаляр линейно:

$$|zA\rangle + z|A\rangle = |B\rangle.$$

7. Дистрибутивный закон гласит:

$$\begin{aligned} z\{|A\rangle + |B\rangle\} &= z|A\rangle + z|B\rangle, \\ \{z + w\}|A\rangle &= z|A\rangle + w|A\rangle. \end{aligned}$$

Аксиомы 6 и 7 вместе часто называют аксиомами *линейности*.

Обычные 3-векторы удовлетворяли бы этим аксиомам за исключением одной вещи: аксиома 6 позволяет умножать вектор на любое комплексное число. Обычные 3-векторы можно умножать только на вещественные числа (положительные, отрицательные и ноль), однако умножение на комплексные числа для них не определено. Можно считать, что 3-векторы образуют вещественное векторное пространство, а кеты — комплексное векторное пространство. Наше определение кет-векторов крайне абстрактно. Но, как мы увидим, существуют также различные конкретные способы представления кет-векторов.

1.9.2. Функции и векторы-столбцы

Перейдем к конкретным примерам комплексных векторных пространств. Прежде всего рассмотрим множество непрерывных комплекснозначных функций переменной x . Назовем эти функции $A(x)$. Любые две такие функции можно складывать и умножать на комплексные числа. Можете проверить, что они удовлетворяют всем семи аксиомам. Этот пример должен сделать очевидным, что речь идет о чем-то намного более общем, чем трехмерные стрелочки.

Двумерные векторы-столбцы дают другой конкретный пример. Мы конструируем их, записывая друг над другом пару комплексных чисел α_1 и α_2 в виде

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

и рассматривая такую «стопку» в качестве кет-вектора $|A\rangle$. Комплексные числа α — это компоненты $|A\rangle$. Два вектора-столбца можно складывать покомпонентно:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 + \beta_1 \\ \alpha_2 + \beta_2 \end{pmatrix}.$$

Более того, можно умножить вектор-столбец на комплексное число z , просто умножив на него компоненты:

$$z \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z\alpha_1 \\ z\alpha_2 \end{pmatrix}.$$

Можно сконструировать пространство векторов-столбцов любой размерности. Вот, например, пятимерный вектор-столбец:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix}.$$

Как правило, мы не смешиваем векторы разной размерности.

1.9.3. Бра и кеты

Как мы видели, у комплексных чисел есть дуальная версия в виде комплексно сопряженных чисел. Точно так же комплексное векторное пространство имеет дуальную версию, которая по сути является комплексно сопряженным векторным пространством. Для любого кет-вектора $|A\rangle$ в дуальном пространстве существует бра-вектор, обозначаемый $\langle A|$. Откуда такие странные термины «бра» и «кет»? Если коротко, то мы определим внутреннее произведение бра и кетов в виде выражения $\langle B|A\rangle$, то есть в форме *bra-kets*, или *brackets*¹. Внутреннее произведение — это чрезвычайно важный математический инструмент как в квантовой механике, так и для описания векторных пространств в целом.

Бра-векторы удовлетворяют тем же аксиомам, что и кет-векторы, но есть два момента, относящиеся к связи между кетами и бра, о которых следует помнить:

¹ Brackets — англ. скобки. — Примеч. пер.

1. Допустим $\langle A|$ — бра, соответствующий кету $|A\rangle$, а $\langle B|$ — бра, соответствующий кету $|B\rangle$. Тогда кету

$$|A\rangle + |B\rangle$$

будет соответствовать бра

$$\langle A| + \langle B|.$$

2. Если z — комплексное число, то *неверно*, что бра, соответствующим $z|A\rangle$, будет $\langle A|z$. Надо помнить о комплексном сопряжении. Так что бра, соответствующим

$$z|A\rangle,$$

будет

$$\langle A|z^*.$$

В конкретном примере, где кеты представляются векторами-столбцами, дуальные им бра представляются векторами-строками, компоненты которых являются комплексно сопряженными числами. Так, если кет $|A\rangle$ имеет вид столбца

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix},$$

то соответствующий бра $\langle A|$ представляется строкой

$$\left(\alpha_1^* \quad \alpha_2^* \quad \alpha_3^* \quad \alpha_4^* \quad \alpha_5^* \right).$$

1.9.4. Внутреннее произведение

Несомненно, вы знакомы со скалярным произведением обычных 3-векторов. Аналогичная операция для бра и кетов называется *внутренним произведением*. Внутреннее произведение — это всегда произведение бра и кета, и записывается оно в виде

$$\langle B|A \rangle.$$

Результатом этой операции является комплексное число. Нетрудно догадаться, как выглядят аксиомы внутреннего произведения.

1. Оно линейно:

$$\langle C| \{ |A\rangle + |B\rangle \} = \langle C|A \rangle + \langle C|B \rangle.$$

2. Перестановка бра и кета соответствует комплексному сопряжению:

$$\langle B|A \rangle = \langle A|B \rangle^*.$$

УПРАЖНЕНИЕ 1.1

а) Докажите, используя аксиомы внутреннего произведения, что

$$\{\langle A| + \langle B|\}|C\rangle = \langle A|C \rangle + \langle B|C \rangle.$$

б) Докажите, что $\langle A|A \rangle$ — вещественное число.

В конкретном представлении бра и кетов с помощью векторов-строк и векторов-столбцов внутреннее произведение определяется через операции с компонентами:

$$\langle B|A \rangle = (\beta_1^* \beta_2^* \beta_3^* \beta_4^* \beta_5^*) \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix} = \beta_1^* \alpha_1 + \beta_2^* \alpha_2 + \beta_3^* \alpha_3 + \beta_4^* \alpha_4 + \beta_5^* \alpha_5. \quad (1.2)$$

Это правило для внутреннего произведения, по сути, такое же, как для скалярного умножения: складываются произведения соответствующих компонент векторов, внутреннее произведение которых вычисляется.

УПРАЖНЕНИЕ 1.2

Покажите, что внутреннее произведение, определенное формулой (1.2), удовлетворяет всем аксиомам внутреннего произведения.

С помощью внутреннего произведения можно определить некоторые понятия, знакомые нам по обычным 3-векторам.

- *Нормированный вектор.* Вектор называют нормированным, если его внутреннее произведение с самим собой равно 1. Нормированные векторы удовлетворяют критерию

$$\langle A|A \rangle = 1.$$

В применении к обычным 3-векторам вместо термина *нормированный вектор* обычно используют термин *единичный вектор*, то есть вектор единичной длины.

- *Ортогональный вектор.* Два вектора называют ортогональными, если их внутреннее произведение равно нулю. $|A\rangle$ и $|B\rangle$ ортогональны, если

$$\langle B|A\rangle = 0.$$

Это аналогично утверждению о том, что два 3-вектора ортогональны, если их скалярное произведение равно нулю.

1.9.5. Ортонормированные базисы

Работая с обычными 3-векторами, чрезвычайно полезно ввести три взаимно ортогональных единичных вектора и использовать их как базис для конструирования любых векторов. Простым примером служат единичные 3-векторы, направленные вдоль осей x , y и z . Обычно их обозначают \hat{i} , \hat{j} и \hat{k} . Каждый из них имеет единичную длину и ортогонален остальным. Если попробовать найти четвертый вектор, ортогональный этим трем, то такого не окажется, по крайней мере в трехмерном пространстве. Однако если у пространства имеется больше измерений, то и базисных векторов будет больше. Размерность пространства можно определить как максимально возможное в этом пространстве число взаимно ортогональных векторов.

Очевидно, что в конкретном выборе осей x , y и z нет ничего специфического. Если только базисные векторы имеют единичную длину и взаимно ортогональны, они составляют *ортонормированный базис*.

Тот же принцип верен и для комплексных векторных пространств. Можно начать с любого нормированного вектора, а затем поискать второй, ортогональный первому. Если он нашелся, значит пространство как минимум двумерное. Затем поискать третий, четвертый и так далее. В конце концов новые направления могут исчерпаться, и новых ортогональных кандидатов больше не будет. Максимальное число взаимно перпендикулярных векторов — это размерность пространства. Для векторов-столбцов размерность просто равна числу компонентов в столбце.

Рассмотрим N -мерное пространство и конкретный ортонормированный базис кет-векторов, обозначаемых $|i\rangle$.¹ Индекс i пробегает значения от 1 до N . Пусть вектор $|A\rangle$ представлен как сумма базисных векторов:

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle. \quad (1.3)$$

Комплексные числа α_i называются *компонентами* вектора, и чтобы вычислить их, надо обе стороны уравнения умножить внутренним образом на элемент бра-базиса $\langle j|$:

¹ Математически векторы базиса не обязаны быть ортонормированными. Однако в квантовой механике они обычно такие. В данной книге везде, где я говорю о базисе, подразумевается ортонормированный базис.

$$\langle j|A\rangle = \sum_i \alpha_i \langle j|i\rangle. \quad (1.4)$$

Далее воспользуемся тем фактом, что векторы базиса ортонормированные. Это означает, что $\langle j|i\rangle = 0$, если i не равно j , и $\langle j|i\rangle = 1$, если $i = j$. Иными словами, $\langle j|i\rangle = \delta_{ij}$. Это приводит к сокращению суммы в уравнении (1.4) до одного члена:

$$\langle j|A\rangle = \alpha_j. \quad (1.5)$$

Итак, мы видим, что компоненты вектора — это просто его внутренние произведения с базисными векторами. Можно переписать уравнение (1.3) в элегантной форме:

$$|A\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|A\rangle.$$

Лекция 2. Квантовые состояния

Арт: Довольно странно, что после пива голова у меня *перестала* кружиться. В каком мы штате?

Ленни: Хотел бы я знать. Это имеет значение?

Арт: Может, и имеет. Я не думаю, что все еще в Калифорнии.

2.1. Состояния и векторы

В классической физике знание *состояния системы* подразумевает знание всего, что необходимо для предсказания ее будущего. Как показано в предыдущей лекции, квантовые системы не вполне предсказуемы. Очевидно, квантовые состояния имеют иной смысл, чем классические. В очень грубом приближении знание квантового состояния означает знание всего, что может быть известно о том, как система была приготовлена.

В предыдущей главе мы говорили об использовании прибора для приготовления состояния спина. Фактически мы неявно подразумевали, что не существует более тонких деталей, которые можно было бы задать или которыми можно было бы характеризовать состояние спина.

Естественный вопрос состоит в том, связана ли эта непредсказуемость с неполнотой того, что мы называем квантовым состоянием? На этот счет могут быть различные мнения. Вот некоторые примеры.

- Да, привычное понятие квантового состояния неполное. Существует «скрытые переменные», которые, если только вы сможете до них добраться, обеспечат полную предсказуемость. Существуют две версии этой точки зрения. В версии *A* скрытые переменные трудно измерить, но в принципе они доступны для наших экспериментов. Согласно версии *B*, поскольку мы состоим из квантовомеханической материи, то подвержены ограничениям квантовой механики, и скрытые переменные для нас принципиально ненаблюдаемы.
- Нет, концепция скрытых переменных не дает нам ничего полезного. Квантовая механика неустранимо непредсказуемая. Это настолько точное исчисление вероятностей, насколько это возможно. Задача физика состоит в изучении и использовании этого исчисления.

Я не знаю, каким будет окончательный ответ на этот вопрос или даже будет ли вообще какая-то польза от ответа на него. Но для наших целей не важно, во что верит конкретный физик относительно подлинного смысла квантового состояния. По практическим соображениям мы примем вторую точку зрения.

На практике для квантового спина из лекции 1 это означает, что когда прибор \mathcal{A} срабатывает и сообщает нам результат $\sigma_z = +1$ или $\sigma_z = -1$, то не остается больше ничего, что можно или нужно было бы узнать. Аналогично, если мы повернем \mathcal{A} и измерим, что $\sigma_x = +1$ или $\sigma_x = -1$, то больше узнавать будет нечего. И точно также с σ_y или любой другой компонентой спина.

2.2. Представление спиновых состояний

Теперь пришло время попробовать представить спиновые состояния, используя векторы состояний. Наша цель — построить такое представление, которое будет отражать все, что мы знаем о поведении спинов. На данном этапе процесс будет скорее интуитивным, нежели формальным. Мы попытаемся наилучшим образом все состыковать, основываясь на том, что нам уже известно. Пожалуйста, читайте этот раздел внимательно. Поверьте мне, это окупится.

Начнем с введения обозначений для возможных спиновых состояний вдоль трех координатных осей.

Если \mathcal{A} ориентирован вдоль оси z , то два возможных состояния, которые могут быть приготовлены, соответствуют $\sigma_z = \pm 1$. Назовем их *вверх* и *вниз* и будем обозначать кет-векторами $|u\rangle$ и $|d\rangle$. Итак, если прибор ориентирован вдоль оси z и регистрирует $+1$, то приготовлено состояние $|u\rangle$.

С другой стороны, если прибор ориентирован вдоль оси x и регистрирует -1 , то приготовлено состояние $|l\rangle$. Будем называть его *влево* (*left*). Если \mathcal{A} направлен по оси y , он может приготовить состояния $|i\rangle$ и $|o\rangle$ — *вперед* и *назад* (*in/out*). Идея понятна.

Представление об отсутствии скрытых переменных имеет очень простое математическое выражение: пространство состояний для отдельного спина имеет только два измерения. Данный момент заслуживает особого внимания:

Все возможные спиновые состояния могут быть представлены в двумерном векторном пространстве.

Можно до некоторой степени произвольно¹ выбрать $|u\rangle$ и $|d\rangle$ в качестве базисных векторов и записать любое состояние как линейную суперпозицию этих двух. Мы пока выберем их именно так. Будем использовать обозначение $|A\rangle$ для состояния в общем случае. Тогда можно записать это в виде уравнения

$$|A\rangle = \alpha_u|u\rangle + \alpha_d|d\rangle,$$

¹ Этот выбор не полностью произвольный. Базисные векторы должны быть ортогональны друг другу.

где α_u и α_d — компоненты $|A\rangle$ вдоль базисных направлений $|u\rangle$ и $|d\rangle$. Математически можно определить компоненты $|A\rangle$ следующим образом:

$$\begin{aligned}\alpha_u &= \langle u | A \rangle, \\ \alpha_d &= \langle d | A \rangle.\end{aligned}\tag{2.1}$$

Эти уравнения предельно абстрактны, и совершенно неочевидно, в чем состоит их физический смысл. Я собираюсь прямо сейчас рассказать вам, что они означают. Прежде всего, $|A\rangle$ может представлять любое состояние спина, приготовленного любым способом. Компоненты α_u и α_d — это комплексные числа; сами по себе они не имеют экспериментального смысла, но у них абсолютных величин он есть. В частности, выражения $\alpha_u^* \alpha_u$ и $\alpha_d^* \alpha_d$ имеют следующий смысл.

- Пусть спин приготовлен в состоянии $|A\rangle$, а прибор ориентирован вдоль оси z , тогда величина $\alpha_u^* \alpha_u$ — это вероятность того, что результатом измерения спина будет $\sigma_z = +1$. Другими словами, это вероятность того, что спин будет иметь состояние *вверх*, если измерять его вдоль оси z .
- Точно так же $\alpha_d^* \alpha_d$ — это вероятность того, что при измерении σ_z будет получено значение *вниз*.

Значения α , или, что эквивалентно, $\langle u | A \rangle$ и $\langle d | A \rangle$, называются амплитудами вероятности. Сами по себе они не являются вероятностями. Для вычисления вероятностей надо возводить в квадрат их абсолютные зна-

чения. Другими словами, вероятности получения при измерении результатов *вверх* и *вниз* будут

$$\begin{aligned} P_u &= \langle A | u \rangle \langle u | A \rangle, \\ P_d &= \langle A | d \rangle \langle d | A \rangle. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Обратите внимание, что я ничего не сказал о том, каким было значение σ_z до измерения. Все, что у нас есть до измерения, — это вектор $|A\rangle$, который определяет потенциальные возможности, но не действительные результаты измерений.

И еще два важных момента. Прежде всего, обратите внимание на то, что $|u\rangle$ и $|d\rangle$ взаимно ортогональны. Другими словами,

$$\begin{aligned} \langle u | d \rangle &= 0, \\ \langle d | u \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Физический смысл этого в том, что если спин подготовлен в состоянии *вверх*, то вероятность обнаружить его в состоянии *вниз* равна нулю, и наоборот. Это очень важно, поскольку, я еще раз повторяю, два ортогональных состояния физически различны и взаимно исключают друг друга. Если спин находится в одном из этих состояний, то он *не может* быть в другом (то есть вероятность этого равна нулю). Данная идея применима ко всем квантовым системам, не только к спинам.

Но не путайте ортогональность векторов состояний с ортогональностью направлений в пространстве. В действительности направления *вверх* и *вниз* — это не

ортогональные направления в пространстве, несмотря на то что связанные с ними векторы состояний ортогональны в пространстве состояний.

Второй важный момент: совокупная вероятность всех исходов равна единице, то есть должно выполняться равенство

$$\alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d = 1. \quad (2.4)$$

Это эквивалентно утверждению о том, что вектор $|A\rangle$ нормирован на 1:

$$\langle A|A \rangle = 1.$$

Это чрезвычайно общий принцип квантовой механики, который распространяется на все квантовые системы: состояние системы представляется единичным (нормированным) вектором в векторном пространстве состояний. Более того, квадраты абсолютных величин компонентов вектора состояния вдоль конкретных базисных векторов дают вероятности различных экспериментальных исходов.

2.3. Вдоль оси x

Ранее было сказано, что любое спиновое состояние может быть представлено линейной комбинацией базисных векторов $|u\rangle$ и $|d\rangle$. Попробуем выполнить это для векторов $|r\rangle$ и $|l\rangle$, которые представляют спины, приготовленные вдоль оси x . Начнем с $|r\rangle$. Вспомним из

лекции 1, что если \mathcal{A} первоначально приготавливает $|r\rangle$, а затем поворачивается для измерения σ_z , то будут равные вероятности обнаружить состояния *вверх* и *вниз*. Таким образом, каждое из значений $\alpha_u^* \alpha_u$ и $\alpha_d^* \alpha_d$ должно быть равно $\frac{1}{2}$. Простой вектор, удовлетворяющий этому условию:

$$|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle. \quad (2.5)$$

В выборе этого вектора есть некоторая неоднозначность, но, как мы увидим дальше, она сводится к произволу в выборе точных направлений осей x и y .

Теперь рассмотрим вектор $|l\rangle$. Вот что нам известно: когда спин приготовлен в конфигурации *влево*, вероятности для σ_z вновь равны $\frac{1}{2}$. Этого недостаточно для определения значений $\alpha_u^* \alpha_u$ и $\alpha_d^* \alpha_d$, но есть еще одно условие, которое мы можем использовать для вывода. Ранее я говорил, что $|u\rangle$ и $|d\rangle$ ортогональны по той простой причине, что если спин находится в состоянии *вверх*, то он определенно не находится в состоянии *вниз*. Но в состояниях *вверх* и *вниз* нет ничего особенного, и то же самое верно в отношении состояний *вправо* и *влево*. А именно если спин находится в состоянии *вправо*, у него нулевая вероятность находиться в состоянии *влево*. Так что, по аналогии с (2.3),

$$\begin{aligned} \langle r|l\rangle &= 0, \\ \langle l|r\rangle &= 0. \end{aligned}$$

Этим условиям полностью соответствует следующее выражение для $|l\rangle$:

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle. \quad (2.6)$$

УПРАЖНЕНИЕ 2.1

Докажите, что вектор $|r\rangle$ в уравнении (2.5) ортогонален вектору $|l\rangle$ в уравнении (2.6).

И вновь существует неоднозначность в выборе $|l\rangle$. Это так называемая *неопределенность фазы*. Допустим, что мы умножили $|l\rangle$ на произвольное комплексное число z . Это не повлияет на ортогональность $|r\rangle$, однако в общем случае результат больше не будет нормированным (то есть не будет иметь единичную длину). Но если выбрать $z = e^{i\theta}$ (где θ может быть любым вещественным числом), то это не повлияет на нормировку, поскольку $e^{i\theta}$ имеет единичную абсолютную величину. Другими словами, $\alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d$ останется равным 1. Так как число в форме $z = e^{i\theta}$ называется фазовым множителем, эта неоднозначность называется *неопределенностью фазы*. В дальнейшем мы обнаружим, что не существует измеряемых величин, чувствительных к общему базовому множителю, значит, можно игнорировать его при задании состояний.

2.4. Вдоль оси y

Перейдем, наконец, к состояниям $|i\rangle$ и $|o\rangle$, векторам, представляющим спины, ориентированные вдоль оси y . Рассмотрим условия, которым они должны удовлетворять. Прежде всего,

$$\langle i|o\rangle = 0. \quad (2.7)$$

Это условие утверждает, что *вперед* и *назад* представляются ортогональными векторами точно так же, как *вверх* и *вниз*. Физически это означает, что если спин находится в состоянии *вперед*, то он точно не находится в состоянии *назад*.

Существуют дополнительные ограничения на векторы $|i\rangle$ и $|o\rangle$. Используя соотношения (2.1) и (2.2) и статистические результаты наших экспериментов, можно записать следующее:

$$\begin{aligned} \langle o|u\rangle\langle u|o\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle o|d\rangle\langle d|o\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle i|u\rangle\langle u|i\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle i|d\rangle\langle d|i\rangle &= \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

В первых двух уравнениях $|o\rangle$ играет роль $|A\rangle$ из уравнений (2.1) и (2.2). В двух других уравнениях эту роль играет $|i\rangle$. Данные условия утверждают, что если спин

ориентирован вдоль y , а затем измерен вдоль z , то он с равной вероятностью будет в состоянии *вверх* или *вниз*. Следует также ожидать, что если спин измерен вдоль оси x , он будет с равной вероятностью в состоянии *вправо* или *влево*. Это приводит к дополнительным условиям:

$$\begin{aligned}\langle o|r\rangle\langle r|o\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle o|l\rangle\langle l|o\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle i|r\rangle\langle r|i\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle i|l\rangle\langle l|i\rangle &= \frac{1}{2}.\end{aligned}\tag{2.9}$$

Данные условия достаточны для определения формы векторов $|i\rangle$ и $|o\rangle$, за исключением неопределенности фазы. Вот что в результате получается:

$$\begin{aligned}|i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|d\rangle, \\ |o\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|d\rangle.\end{aligned}\tag{2.10}$$

УПРАЖНЕНИЕ 2.2

Докажите, что $|i\rangle$ и $|o\rangle$ удовлетворяют всем условиям в уравнениях (2.7, 2.8 и 2.9). Уникальны ли они в этом отношении?

Интересно, что две из компонент в уравнениях (2.10) являются мнимыми. Конечно, мы все время говорим, что пространство состояний является комплексным векторным пространством, но до сих пор нам не приходилось использовать комплексные числа в вычислениях. Являются ли комплексные числа в уравнениях (2.10) лишь вопросом удобства или это необходимость? При нашем подходе к спиновым состояниям нет возможности этого избежать. Доказывать это довольно утомительно, но ничего сложного тут нет. В следующем упражнении намечен план этой процедуры. Необходимость в комплексных числах — это общая особенность квантовой механики, и в дальнейшем мы столкнемся с другими примерами.

УПРАЖНЕНИЕ 2.3

На время забудьте, что уравнения (2.10) дают нам работающие выражения для $|i\rangle$ и $|o\rangle$ через $|u\rangle$ и $|d\rangle$, и представьте, что компоненты α , β , γ и δ неизвестны:

$$\begin{aligned}|i\rangle &= \alpha|u\rangle + \beta|d\rangle, \\ |o\rangle &= \gamma|u\rangle + \delta|d\rangle.\end{aligned}$$

а) Используя уравнения (2.8), покажите, что

$$\alpha^*\alpha = \beta^*\beta = \gamma^*\gamma = \delta^*\delta = \frac{1}{2}.$$

б) Опираясь на этот результат и уравнения (2.9), покажите, что

$$\alpha^*\beta + \alpha\beta^* = \gamma^*\delta + \gamma\delta^* = 0.$$

в) Покажите, что $\alpha^*\beta$ и $\gamma^*\delta$ должны иметь чисто мнимые значения.

Если $\alpha^*\beta$ — чисто мнимое, то числа α и β не могут быть оба вещественными. Этот же вывод применим и к $\gamma^*\delta$.

2.5. Подсчет параметров

Всегда важно знать, сколько независимых параметров требуется для того, чтобы описать систему. Например, использовавшиеся в *томе I* обобщенные координаты (они обозначались q_i) соответствовали независимым степеням свободы. Такой подход освобождал нас от сложной задачи формулирования явных уравнений, описывающих физические ограничения. По тем же соображениям нашей следующей задачей будет подсчет числа физически различных состояний, существующих для спина. Я сделаю это двумя способами и покажу, что результат получается одинаковый.

Первый способ — простой. Ориентируем прибор вдоль любого 3-вектора¹ \hat{n} и приготовим спин с $\sigma = +1$

¹ Не забывайте, что 3-векторы — это не бра или кеты.

вдоль этой оси. Если $\sigma = -1$, то можно считать, что спин оказался ориентированным вдоль оси $-\hat{n}$. Таким образом, должно существовать состояние для единичного 3-вектора \hat{n} любой ориентации. Сколько параметров требуется для задания такой ориентации? Нужно два угла, чтобы задать направление в трехмерном пространстве¹.

Теперь рассмотрим тот же вопрос с другой точки зрения. Общее спиновое состояние определяется двумя комплексными числами α_u и α_d . Похоже, что в целом получается четыре вещественных параметра, с учетом того, что каждый комплексный параметр считается за два вещественных. Однако вспомним, что вектор должен быть нормирован согласно уравнению (2.4). Условие нормировки дает нам одно уравнение с вещественными переменными и сокращает число параметров до трех.

Как я уже говорил раньше, мы в конце концов увидим, что физические свойства вектор состояния не зависит от общего фазового множителя. Это означает, что один из трех оставшихся параметров является избыточным, так что их остается только два — столько же, сколько необходимо для задания направления в трехмерном пространстве. Таким образом, в выражении

$$\alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle$$

¹ Вспомните, что в сферических координатах используются два угла для задания ориентации точки относительно системы отсчета. Например, это могут быть широта и долгота.

имеется достаточно свободы для описания всех ориентаций спина, несмотря на возможность лишь двух различных исходов вдоль любой оси.

2.6. Представление спиновых состояний векторами-столбцами

Мы уже многому смогли научиться, используя абстрактные формы векторов состояний вроде $|u\rangle$ и $|d\rangle$. Эти абстракции помогают нам сконцентрироваться на математических взаимосвязях, не беспокоясь о необязательных подробностях. Однако вскоре нам потребуется выполнять конкретные расчеты со спиновыми состояниями, а для этого понадобится записывать векторы состояний в форме столбцов. Из-за фазовой неопределенности представления в форме столбцов не являются уникальными, и мы попробуем выбрать простейший и наиболее удобный вариант, какой только сможем найти.

Как обычно, мы начнем с $|u\rangle$ и $|d\rangle$. Необходимо чтобы они имели единичную длину и были взаимно ортогональны. Вот пара столбцов, которая удовлетворяет этим требованиям:

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

$$|d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Начав с этих векторов-столбцов, нетрудно найти векторы-столбцы для $|r\rangle$ и $|l\rangle$, пользуясь уравнениями (2.5) и (2.6), а также для $|i\rangle$ и $|o\rangle$ с помощью уравнения (2.10). Мы сделаем это в следующей лекции, где нам потребуются соответствующие результаты.

2.7. Сводим все воедино

В этой лекции мы охватили большой материал. Прежде чем двигаться дальше, давайте проведем ревизию того, что нами сделано. Цель состояла в том, чтобы соединить наши знания о спинах и векторных пространствах. Мы поняли, как использовать векторы для представления спиновых состояний, и в процессе этой работы мы получили первый намек на то, какую информацию содержит вектор состояния (и какую *не* содержит!). Вот краткая сводка того, что мы сделали.

- Основываясь на наших знаниях о спиновых измерениях, мы выбрали три пары взаимно перпендикулярных базисных векторов. Попарно мы назвали их $|u\rangle$ и $|d\rangle$, $|r\rangle$ и $|l\rangle$ и, наконец, $|i\rangle$ и $|o\rangle$. Поскольку базисные векторы $|u\rangle$ и $|d\rangle$ соответствуют физически различным состояниям, мы смогли утверждать, что они взаимно ортогональны. Другими словами, $\langle u|d\rangle = 0$. То же самое относится к $|r\rangle$ и $|l\rangle$, а также к $|i\rangle$ и $|o\rangle$.
- Мы обнаружили, что для задания спинового состояния требуются два независимых параметра, и затем

произвольно выбрали одну из ортогональных пар ($|u\rangle$ и $|d\rangle$) в качестве базисных векторов для представления *всех* спиновых состояний, несмотря на то что для задания двух комплексных чисел в векторе состояния требуются четыре вещественных числа. Как с этим справились? Нам хватило ума заметить, что эти четыре числа не полностью независимы¹. Условие нормировки (суммарная вероятность должна быть равна 1) исключает первый независимый параметр, а неопределенность фазы (на физику вектора состояния не влияет общий фазовый множитель) исключает второй.

- Выбрав $|u\rangle$ и $|d\rangle$ в качестве наших главных базисных векторов, мы рассмотрели, как представить другие две пары базисных векторов в качестве линейных комбинаций $|u\rangle$ и $|d\rangle$ с учетом ограничений, накладываемых ортогональностью и вероятностными условиями.
- Наконец, мы ввели способ представления наших главных базисных векторов в форме столбцов. Это представление не уникально. В следующей лекции мы используем векторы-столбцы $|u\rangle$ и $|d\rangle$ для нахождения векторов-столбцов в двух других базисах.

Достигнув этих конкретных результатов, мы получили возможность посмотреть в действии кое-что из

¹ Можете позволить себе самодовольную улыбку.

Лекция 2. Квантовые состояния

математики векторов состояний и кое-что узнать о том, как эти математические объекты связаны с физическими спинами. Хотя мы будем концентрироваться на спинах, те же понятия и приемы применимы и к другим квантовым системам. Пожалуйста, уделите немного времени тому, чтобы усвоить материал, который мы рассмотрели, прежде чем переходить к следующей лекции. Как я уже говорил вначале, это окупится.

Лекция 3. Принципы квантовой механики

Арт: Я не такой, как ты, Ленни. Мой мозг просто не приспособлен для квантовой механики.

Ленни: Ха! Мой тоже не был. Я в самом деле не могу себе все это представить. Но я тебе скажу, что как-то знал парня, который думал совсем как электрон.

Арт: Что с ним случилось?

Ленни: Все, что я тебе скажу, Арт, это определенно не было привлекательно.

Арт: Хм, надеюсь, этот ген не передается по воздуху.

Нет, мы не приспособлены ощущать квантовые явления; не так, по крайней мере, как приспособлены воспринимать классические вещи вроде силы или температуры. Но мы очень адаптивные создания и способны

заменить математическими абстракциями отсутствующие органы чувств, которые позволяли бы нам непосредственно визуализировать квантовую механику. И, в конце концов, мы все же вырабатываем новый тип интуиции.

В этой лекции вводятся принципы квантовой механики. Для описания этих принципов нам понадобятся некоторые математические инструменты. С них и начнем.

3.1. Математическая интерлюдия: линейные операторы

3.1.1. Машины и матрицы

Состояния в квантовой механике математически описываются векторами в векторном пространстве. Физические наблюдаемые — те вещи, которые можно измерить, — описываются линейными операторами. Мы примем это как аксиомы, а позднее обнаружим (в разделе 3.1.5), что операторы, соответствующие физическим наблюдаемым, должны быть не просто линейными, но еще и эрмитовыми. Соответствие между операторами и наблюдаемыми — вещь тонкая, и ее понимание потребует определенных усилий.

Наблюдаемые — это то, что можно измерить. Например, поддаются непосредственному измерению координаты частицы; энергия, импульс или угловой момент

системы; или электрическое поле в точке пространства. Наблюдаемые также связаны с векторным пространством, но они не являются векторами состояния. Это вещи, которые вы можете измерить, — примером может служить σ_x , — и они представляются *линейными операторами*. Джон Уилер любил называть такие математические объекты *машинами*. Он представлял себе машину с двумя портами: входом и выходом. На вход вы подаете вектор, скажем $|A\rangle$. Врубаете передачу, и машина выдает вам результат $|B\rangle$.

Обозначим этот оператор полужирной буквой **M** (от слова «*machine*»). Вот формула, выражющая тот факт, что **M** действует на вектор $|A\rangle$ и дает $|B\rangle$:

$$\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle.$$

Не всякая машина является *линейным* оператором. Линейность означает несколько простых свойств. Прежде всего, линейный оператор должен давать однозначный результат для любого вектора в пространстве. Можно представить себе машину, которая для одних векторов дает результат, а другие проглатывает, не выдавая ничего. Такая машина не будет линейным оператором. Какой-то результат должен получаться, что бы ни подавалось на ввод.

Следующее свойство утверждает, что при действии линейного оператора **M** на вектор с множителем, тот же множитель появляется у результирующего вектора. Так, если $\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$ и z — любое комплексное число, то

$$\mathbf{M}z|A\rangle = z|B\rangle.$$

И наконец, последнее свойство — когда \mathbf{M} действует на сумму векторов, результаты просто складываются:

$$M\{|A\rangle + |B\rangle\} = \mathbf{M}|A\rangle + \mathbf{M}|B\rangle.$$

В качестве конкретного представления линейных операторов мы вернемся к представлению бра- и кет-векторов в виде векторов-строк и векторов-столбцов, которым пользовались в лекции 1. Запись в форме строк и столбцов зависит от выбора базисных векторов. Если векторное пространство N -мерно, мы выберем набор из N ортономированных (ортогональных и нормированных) кет-векторов. Обозначим их $|j\rangle$, а дуальные им бра-векторы $\langle j|$.

Теперь мы собираемся взять уравнение

$$\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$$

и записать его в покомпонентной форме. Представим произвольный кет $|A\rangle$ в виде суммы по базисным векторам, как уже делалось в уравнении (1.3):

$$|A\rangle = \sum_j \alpha_j |j\rangle.$$

Мы здесь используем индекс j вместо i , чтобы у вас не было искушения думать, будто бы речь идет о спиновом состоянии «вперед» (*in*). Теперь представим таким же образом $|B\rangle$ и подставим оба выражения в $\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$.

Получается

$$\sum_j \mathbf{M}|j\rangle\alpha_j = \sum_j \beta_j |j\rangle.$$

Последний шаг состоит в том, чтобы взять внутренние произведения обеих частей этого уравнения с определенным базисным вектором $\langle k|$, получив в результате

$$\sum_j \langle k|\mathbf{M}|j\rangle\alpha_j = \sum_j \beta_j \langle k|j\rangle. \quad (3.1)$$

Чтобы осмыслить этот результат, вспомните, что $\langle k|j\rangle$ дает ноль, если j и k не равны между собой, и 1 при их равенстве. Это означает, что сумма в правой части сокращается до одного члена β_k .

В левой части мы видим величину $\langle k|\mathbf{M}|j\rangle\alpha_j$. Ее можно сократить, обозначив $\langle k|\mathbf{M}|j\rangle$ символом m_{kj} . Обратите внимание, что каждое m_{kj} — это просто комплексное число. Чтобы убедиться в этом, рассмотрите действие \mathbf{M} на $|j\rangle$ и получающийся новый кет-вектор. Внутреннее произведение $\langle k|$ на этот новый кет-вектор должно быть комплексным числом. Величины m_{kj} называются матричными элементами \mathbf{M} и часто записываются в виде квадратной матрицы $N \times N$. Например, при $N = 3$ можно записать

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

В этом уравнении имеется небольшое злоупотребление обозначениями, от которого туристов начинает тошнить. В левой части стоит абстрактный оператор,

а в правой — его конкретное представление в определенном базисе. Такое приравнивание является некорректным, однако оно не должно вызвать никакой путаницы. Теперь вернемся к уравнению (3.1), заменим $\langle k|M|j\rangle$ на m_{kj} и получим

$$\sum_j m_{kj} \alpha_j = \beta_k. \quad (3.3)$$

Можно также переписать это в матричной форме, тогда уравнение (3.3) приобретает вид

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Вероятно, вы знакомы с правилами умножения матриц, но я на всякий случай напомню. Чтобы вычислить первый элемент β_1 в правой части, возьмите первую строку матрицы и «скалярно умножьте» ее на столбец α :

$$\beta_1 = m_{11}\alpha_1 + m_{12}\alpha_2 + m_{13}\alpha_3.$$

Для получения второго элемента перемножьте вторую строку матрицы со столбцом α :

$$\beta_2 = m_{21}\alpha_1 + m_{22}\alpha_2 + m_{23}\alpha_3.$$

И так далее. Если вы незнакомы с умножением матриц, то включите компьютер и почитайте о нем прямо сейчас. Это ключевой элемент нашего набора инструментов, и я буду считать, что с этого момента вы с ним знакомы.

Представление векторов и линейных операторов в конкретной форме столбцов, строк и матриц (собира-

тельно это представление называется *компонентным*) имеет как достоинства, так и недостатки. Его достоинства очевидны. Компонентное представление обеспечивает совершенно ясный набор арифметических правил, по которым работает машина. Его недостаток в том, что оно зависит от конкретного выбора базисных векторов. Реальные отношения между векторами и операторами не зависят от выбора конкретного базиса, но компонентное представление скрывает этот факт.

3.1.2. Собственные значения и собственные векторы

В общем случае, когда линейный оператор действует на вектор, он меняет его направление. Это значит, что на выходе машины будет не просто входной вектор, умноженный на число. Но для конкретного линейного оператора будут существовать определенные векторы, направление которых остается на выходе таким же, каким оно было на входе. Эти особые векторы называются *собственными векторами*. По определению собственный вектор M — это такой вектор $|\lambda\rangle$, что

$$M|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle. \quad (3.5)$$

Двойное использование λ , конечно, немного сбивает с толку. Прежде всего, λ (в отличие от $|\lambda\rangle$) — это число, обычно комплексное, но все же просто число. С другой стороны, $|\lambda\rangle$ — кет-вектор. Более того, это кет, очень специфически относящийся к M . Когда $|\lambda\rangle$ скармливается машине M , все, что с ним происходит, — это

умножение на число λ . Приведу пример. Если M — это матрица 2×2

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix},$$

то нетрудно убедиться, что вектор

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

под действием M просто умножается на 3. Попробуйте сами. У M есть также другой собственный вектор:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Когда M действует на этот собственный вектор, он умножается на другое число, а именно на -1 . С другой стороны, если M действует на вектор

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

то этот вектор *не* просто умножается на число: M меняет его направление, а не только величину.

Так же как векторы, которые умножаются на число под воздействием M , называются собственными векторами M , константы, на которые они умножается, называются *собственными числами*, или *собственными значениями*. В общем случае собственные числа являются комплексными. Вот пример, который вы можете проработать самостоятельно. Возьмите матрицу

$$M = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

и покажите, что вектор

$$\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

является собственным вектором с собственным числом $-i$.

Линейные операторы могут так же действовать на бра-векторы. Умножение $\langle B|$ на \mathbf{M} обозначается

$$\langle B| \mathbf{M}.$$

Я сокращу обсуждение, сразу приведя правило для этого типа умножения. Оно проще всего выглядит в компонентной форме. Вспомним, что бра-векторы представляются в компонентной форме как векторы-строки. Например, бра $\langle B|$ можно представить в виде

$$\langle B| = \begin{pmatrix} \beta_1^* & \beta_2^* & \beta_3^* \end{pmatrix}.$$

Наше правило вновь является обычным матричным умножением. Допустив небольшую некорректность в обозначении, можно записать

$$\langle B| \mathbf{M} = \begin{pmatrix} \beta_1^* & \beta_2^* & \beta_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

3.1.3. Эрмитово сопряжение

Можно подумать, что если $\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$, то $\langle A|\mathbf{M} = \langle B|$, но это была бы ошибка. Проблема связана с комплексным сопряжением. Даже когда Z — обычное комплексное число, то равенство $Z|A\rangle = |B\rangle$ в общем случае вовсе не

означает, что $\langle A|Z = \langle B|$. При переходе от кетов к бра необходимо подвергнуть Z комплексному сопряжению: $\langle A|Z^* = \langle B|$. Конечно, если Z окажется вещественным числом, то комплексное сопряжение ничего не изменит — любое вещественное число равно своему комплексно сопряженному.

Но нам требуется понятие комплексного сопряжения для операторов. Рассмотрим уравнение $M|A\rangle = |B\rangle$ в компонентной нотации

$$\sum_i m_{ji} \alpha_i = \beta_j$$

и выполним комплексное сопряжение

$$\sum_i m_{ji}^* \alpha_i^* = \beta_j^*.$$

Мы предпочтем записать это уравнение в матричной форме, используя бра вместо кетов. Делая это, следует помнить, что бра-векторы представляются строками, а не столбцами. Чтобы результат получился корректным, надо так же реорганизовать комплексно сопряженные элементы матрицы M . Как объясняется ниже, эта реорганизованная матрица обозначается M^\dagger . Наше новое уравнение имеет вид

$$\langle A|M^\dagger = \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \alpha_2^* & \alpha_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11}^* & m_{21}^* & m_{31}^* \\ m_{12}^* & m_{22}^* & m_{32}^* \\ m_{13}^* & m_{23}^* & m_{33}^* \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Присмотритесь внимательно к различиям матрицы в этом уравнении от матрицы в уравнении (3.6). Там

два отличия. Наиболее очевидное — это комплексное сопряжение каждого элемента, но обратите также внимание на различие в индексах элементов. Например, там, где в уравнении (3.6) стоит m_{23} , в уравнении (3.7) находится m^{*}_{32} . Иными словами, строки и столбцы поменялись местами.

При переходе от кет-формы уравнения к бра-форме должны быть выполнены следующие два шага по изменению матрицы.

1. Поменять местами строки и столбцы.
2. Выполнить комплексное сопряжение каждого элемента матрицы.

В матричной нотации обмен местами из столбцов называется транспонированием и обозначается верхним индексом T . Таким образом, транспонированная матрица \mathbf{M} будет иметь вид

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{21} & m_{31} \\ m_{12} & m_{22} & m_{32} \\ m_{13} & m_{23} & m_{33} \end{pmatrix}.$$

Обратите внимание, что транспонированная матрица отражается относительно своей главной диагонали (диагонали, идущей из верхнего левого угла в нижний правый).

Комплексное сопряжение транспонирования матрицы называется *эрмитовым сопряжением* и обозначается типографским крестиком (\dagger)¹. Можете счи-

¹ Иногда этот символ называют «даггер» (от англ. *dagger*), а в квантовой механике — знаком эрмитова сопряжения. — Примеч. пер.

тать этот знак гибридом звездочки, используемой для комплексного сопряжения, и буквы T , означающей транспонирование. С использованием этих символов

$$\mathbf{M}^\dagger = [\mathbf{M}^T]^*.$$

Итак, если \mathbf{M} действует на кет $|A\rangle$ и дает $|B\rangle$, то отсюда следует, что \mathbf{M}^\dagger действует на бра $\langle A|$ и дает $\langle B|$. Формально если

$$\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle,$$

то

$$\langle A|\mathbf{M}^\dagger = \langle B|.$$

3.1.4. Эрмитовы операторы

Вещественные числа играют в физике особую роль. Результаты любых измерений являются вещественными числами. Иногда мы измеряем две величины, берем их вместе с i (образуя комплексное число) и называем это число результатом измерения. Но в действительности это лишь способ объединения двух вещественных измерений. Будь мы педантами, то сказали бы, что наблюдаемые величины равны своим комплексно сопряженным значениям. Это, конечно, лишь вычурный способ сказать, что они вещественные. Очень скоро мы обнаружим, что квантовомеханические наблюдаемые представляются линейными операторами. Какого рода линейными операторами? Того, который ближе всего

к вещественным операторам. Наблюдаемые в квантовой механике представляются линейными операторами, которые равны своим собственным эрмитовым сопряжениям. Они называются эрмитовыми операторами в честь французского математика Шарля Эрмита. Эрмитовы операторы удовлетворяют условию

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^\dagger.$$

На языке матричных элементов это можно выразить так:

$$m_{ji} = m^*_{ij}.$$

Другими словами, если вы отразите эрмитову матрицу относительно ее главной диагонали, а затем выполните комплексное сопряжение, то результат совпадет с исходной матрицей. Эрмитовы операторы (и матрицы) обладают рядом особых свойств. Первое из них состоит в том, что их собственные числа всегда вещественные. Докажем это.

Пусть λ и $|\lambda\rangle$ представляют собственное число и соответствующий собственный вектор эрмитова оператора \mathbf{L} . То есть

$$\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle.$$

Тогда по определению эрмитова сопряжения

$$\langle\lambda|\mathbf{L}^\dagger = \langle\lambda|\lambda^*.$$

Однако поскольку \mathbf{L} является эрмитовым, он равен \mathbf{L}^\dagger . Так что можно переписать эти два уравнения в виде

$$\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \quad (3.8)$$

и

$$\langle\lambda|\mathbf{L} = \langle\lambda|\lambda^*. \quad (3.9)$$

Теперь умножим (3.8) на $\langle\lambda|$, а (3.9) на $|\lambda\rangle$. Получится

$$\langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle$$

и

$$\langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle.$$

Очевидно, чтобы оба уравнения были верны, λ должно быть равно λ^* . Другими словами, λ (а значит, и любое собственное значение эрмитова оператора) должно быть вещественным.

3.1.5. Эрмитовы операторы и ортонормированные базисы

Мы подошли к важнейшей математической теореме — я буду называть ее *фундаментальной теоремой*, — которая служит основанием всей квантовой механики. Ее суть состоит в том, что *наблюдаемые величины в квантовой механике представляются эрмитовыми операторами*. Это очень простая теорема, но она чрезвычайно важна. Более строго ее можно сформулировать так.

Фундаментальная теорема

- Собственные векторы эрмитова оператора составляют полный набор. Это означает, что **любой вектор**,

который оператор может породить, представим как линейная комбинация его собственных векторов.

- Если λ_1 и λ_2 — два неравных собственных числа эрмитова оператора, то соответствующие собственные векторы ортогональны.
- Даже если два собственных числа равны, соответствующие собственные векторы могут быть выбраны так, чтобы быть ортогональными. Такая ситуация, в которой два различных собственных вектора обладают одинаковыми собственными числами, называется *вырождением*. Вырождение возникает, когда у двух операторов имеются параллельные собственные векторы, что обсуждается далее в разделе 5.1.

Суть фундаментальной теоремы можно выразить следующим образом: собственные векторы эрмитова оператора образуют ортонормированный базис. Докажем это, начав со второго пункта приведенного списка. Согласно определению собственных векторов и собственных значений, можно записать

$$\begin{aligned} \mathbf{L}|\lambda_1\rangle &= \lambda_1|\lambda_1\rangle, \\ \mathbf{L}|\lambda_2\rangle &= \lambda_2|\lambda_2\rangle. \end{aligned}$$

Теперь, учитывая тот факт, что \mathbf{L} является эрмитовым (то есть собственным эрмитовым сопряжением), можно превратить первое уравнение в бра-уравнение. Итак,

$$\langle \lambda_1 | \mathbf{L} = \lambda_1 \langle \lambda_1 |,$$

$$\mathbf{L} | \lambda_2 \rangle = \lambda_2 | \lambda_2 \rangle.$$

Пока все операции должны быть очевидными, но я все равно их записываю. Возьмем первое уравнение и умножим его внутренним образом на $|\lambda_2\rangle$. Затем возьмем второе уравнение и умножим его внутренним образом на $\langle\lambda_1|$. В результате получается

$$\langle \lambda_1 | \mathbf{L} | \lambda_2 \rangle = \lambda_1 \langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle,$$

$$\langle \lambda_1 | \mathbf{L} | \lambda_2 \rangle = \lambda_2 \langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle.$$

Вычитая одно из другого, получаем

$$(\lambda_1 - \lambda_2) \langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle = 0.$$

Таким образом, если λ_1 и λ_2 различны, то внутреннее произведение $\langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle$ должно быть нулем. Другими словами, эти два собственных вектора должны быть ортогональны.

Теперь докажем, что, даже если $\lambda_1 = \lambda_2$, два собственных вектора можно выбрать так, чтобы они были ортогональны. Пусть

$$\mathbf{L} | \lambda_1 \rangle = \lambda | \lambda_1 \rangle,$$

$$\mathbf{L} | \lambda_2 \rangle = \lambda | \lambda_2 \rangle. \tag{3.10}$$

Иначе говоря, существует два различных собственных вектора с одним собственным числом. Должно быть ясно, что любая линейная комбинация этих двух собственных векторов также является собственным вектором с тем же самым собственным числом. При

такой большой свободе всегда можно найти две ортогональных линейных комбинации.

Рассмотрим, как это сделать. Возьмем произвольную линейную комбинацию этих двух собственных векторов:

$$|A\rangle = \alpha|\lambda_1\rangle + \beta|\lambda_2\rangle.$$

Применяя к обеим частям уравнения оператор \mathbf{L} , получаем

$$\begin{aligned}\mathbf{L}|A\rangle &= \alpha\mathbf{L}|\lambda_1\rangle + \beta\mathbf{L}|\lambda_2\rangle, \\ \mathbf{L}|A\rangle &= \alpha\lambda|\lambda_1\rangle + \beta\lambda|\lambda_2\rangle\end{aligned}$$

и, наконец,

$$\mathbf{L}|A\rangle = \lambda(\alpha|\lambda_1\rangle + \beta|\lambda_2\rangle) = \lambda|A\rangle.$$

Это уравнение показывает, что любая линейная комбинация $|\lambda_1\rangle$ и $|\lambda_2\rangle$ также является собственным вектором \mathbf{L} с тем же самым собственным числом. Согласно предположению, эти два вектора линейно независимы — в противном случае они не представляли бы различные состояния. Мы будем также считать, что на них натянуто подпространство собственных векторов \mathbf{L} , имеющих собственное значение λ . Существует простой метод, называемый *процессом Грама — Шмидта*, для отыскания ортонормированного базиса подпространства, заданного набором линейно независимых векторов, на который оно натянуто. Говоря простыми словами, можно найти два ортонормированных соб-

ственных вектора, записав их как линейную комбинацию $|\lambda_1\rangle$ и $|\lambda_2\rangle$. Далее, в разделе 3.1.6, мы дадим краткое описание процесса Грама — Шмидта.

Последняя часть теоремы утверждает, что набор собственных векторов полон. Другими словами, если пространство N -мерно, то будет N ортонормированных собственных векторов. Доказать это несложно, и я оставляю это вам.

УПРАЖНЕНИЕ 3.1

Докажите следующее утверждение: если векторное пространство N -мерно, то ортонормированный базис из N векторов можно построить из собственных векторов эрмитова оператора.

3.1.6. Процесс Грама — Шмидта

Иногда встречаются совокупности линейно независимых собственных векторов, которые *не* образуют ортонормированного набора. Это обычно случается, когда система имеет вырожденные состояния — различные состояния с одинаковыми собственными числами. В такой ситуации всегда можно использовать имеющиеся линейно независимые векторы для создания ортонормированного набора, на который натянуто то же самое пространство. Используемый для этого метод называется процессом Грама — Шмидта, о котором я уже

упоминал ранее. На рис. 3.1 показано, как он работает в простейшем случае двух линейно независимых векторов. Мы начинаем с двух векторов \vec{V}_1 и \vec{V}_2 , из которых конструируем два ортонормированных вектора $\hat{\mathbf{v}}_1$ и $\hat{\mathbf{v}}_2$.

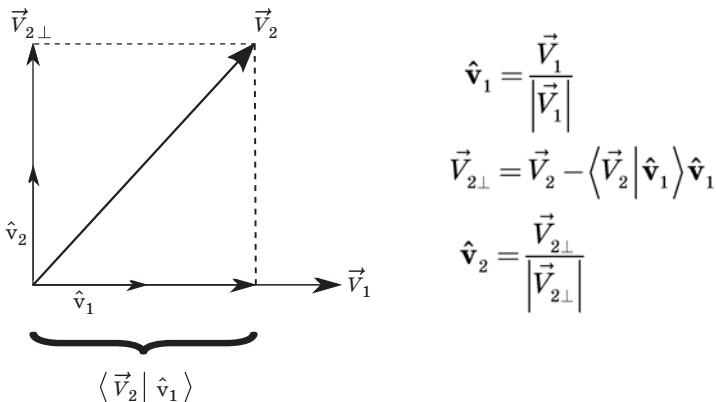


Рис. 3.1. Процесс Грама — Шмидта. По двум данным линейно независимым векторам \vec{V}_1 и \vec{V}_2 , которые необязательно ортогональны, мы конструируем два ортонормированных вектора $\hat{\mathbf{v}}_1$ и $\hat{\mathbf{v}}_2$. Вектор $\vec{V}_{2\perp}$ — промежуточный результат, используемый в процессе конструирования. Данный процесс можно распространить на большего размера набор линейно независимых векторов

Первый шаг состоит в делении \vec{V}_1 на его собственную длину $|\vec{V}_1|$, что дает единичный вектор, параллельный \vec{V}_1 . Назовем это единичный вектор $\hat{\mathbf{v}}_1$, и он станет первым вектором в нашем ортонормированном наборе. Далее, спроектируем \vec{V}_2 на направление $\hat{\mathbf{v}}_1$, построив внутреннее произведение $\langle \vec{V}_2 | \hat{\mathbf{v}}_1 \rangle \hat{\mathbf{v}}_1$. Теперь вычтем

$\langle \vec{V}_2 | \hat{\mathbf{v}}_1 \rangle \hat{\mathbf{v}}_1$ из \vec{V}_2 . Назовем результат этого вычитания $\vec{V}_{2\perp}$. Как видно из рис. 3.1, $\vec{V}_{2\perp}$ ортогонален $\hat{\mathbf{v}}_1$. Наконец, разделим $\vec{V}_{2\perp}$ на его собственную длину и получим второй элемент $\hat{\mathbf{v}}_2$ нашего ортонормированного набора. Должно быть ясно, что этот процесс можно расширить на большие наборы линейно независимых векторов в большем числе измерений. Например, если имеется третий линейно независимый вектор, скажем \vec{V}_3 , выходящий из плоскости страницы, можно вычесть его проекции на каждый из единичных векторов $\hat{\mathbf{v}}_1$ и $\hat{\mathbf{v}}_2$, а затем разделить полученный результат на его собственную длину¹.

3.2. Принципы

Теперь мы полностью готовы сформулировать принципы квантовой механики, так что сделаем это без дальнейших проволочек.

Во всех этих принципах используется понятие наблюдаемых и предполагается существование лежащего в основе комплексного векторного пространства, векторы которого представляют состояния системы. В этой лекции мы сформулируем четыре принципа, которые не затрагивают эволюцию векторов состояния во вре-

¹ В этом примере слова «выходящий из плоскости страницы» не означают, что \vec{V}_3 обязательно перпендикулярен плоскости страницы. Возможность использования неортогональных векторов в качестве исходной точки — главная особенность процесса Грама — Шмидта.

мени. В лекции 4 мы добавим пятый принцип, который относится к изменению состояния системы во времени.

Наблюдаемые можно было бы также называть измеряемыми. Это вещи, которые допускают измерение с помощью подходящего прибора. Ранее мы обсуждали измерение компонент спина σ_x , σ_y и σ_z . Это примеры наблюдаемых. Мы вернемся к ним, но сначала рассмотрим принципы.

- Принцип 1. Наблюдаемые или измеряемые величины в квантовой механике представляются линейными операторами L .

Я понимаю, что это по-своему безнадежно абстрактное утверждение, которое толкает людей к тому, чтобы отложить квантовую механику и вместо нее заняться серфингом. Не беспокойтесь, его смысл полностью прояснится к концу этой лекции.

Вскоре мы увидим, что L также должен быть эрмитовым. Некоторые авторы рассматривают это как постулат или фундаментальный принцип. Мы предпочли вывести его из других принципов. Конечный результат в любом случае один и тот же: операторы, которые представляют наблюдаемые, — эрмитовы.

- Принцип 2. Возможные результаты измерений являются собственными значениями оператора, который представляет наблюдаемую. Мы обозначаем эти собственные значения λ_i . Состояние, для которого результат измерения однозначно равен λ_i , — это со-

ответствующий собственный вектор $|\lambda_i\rangle$. Подождите, не распаковывайте еще доску для серфинга.

Вот другой способ выразить то же самое: если система находится в собственном состоянии $|\lambda_i\rangle$, то результатом измерения гарантированно будет λ_i .

- **Принцип 3.** Однозначно различимые состояния представляются ортогональными векторами.
- **Принцип 4.** Если $|A\rangle$ — вектор состояния системы, и измеряется наблюдаемая L , то вероятность проанаблюдать значение λ_i равна

$$P(\lambda_i) = \langle A | \lambda_i \rangle \langle \lambda_i | A \rangle. \quad (3.11)$$

Напоминаю, что λ_i — это собственные значения L , а $|\lambda_i\rangle$ — соответствующие собственные векторы.

Эти короткие утверждения вряд ли можно признать вполне понятными и не требующими пояснений, и с ними надо поучиться работать. Примем пока первое из них, а именно о том, что любая наблюдаемая отождествляется с линейным оператором. Мы уже начинаем понимать, что оператор — это способ упаковки состояний в форме его собственных значений, которые являются возможными результатами измерения этих состояний. Эти идеи будут проясняться по мере нашего продвижения вперед.

Вспомним некоторые важные моменты из нашего прежнего обсуждения спинов. Начнем с того, что

результат измерений обычно статистически неоднозначен. Однако для любого конкретного измерения есть определенные состояния, результаты для которых совершенно однозначны. Например, если прибор A , измеряющий спины, ориентирован вдоль оси z , то состояние $|u\rangle$ всегда будет приводить к значению $\sigma_z = +1$. Аналогично состояние $|d\rangle$ никогда не даст ничего иного, кроме $\sigma_z = -1$. Принцип 1 дает нам новый взгляд на эти факты. Из него вытекает, что каждая наблюдаемая (σ_x , σ_y и σ_z) отождествляется с определенным линейным оператором в двумерном пространстве состояний, описывающим спин.

Когда наблюдаемая измерена, результат всегда является вещественным числом из множества возможных результатов. Например, если измерена энергия атома, результат будет одним из фиксированных энергетических уровней атома. В знакомом нам случае со спином возможные значения для любых компонент — ± 1 . Прибор никогда не даст никакого другого результата. Принцип 2 определяет связь между оператором, представляющим наблюдаемую, и возможными числовыми результатами измерения. А именно — результат измерения всегда является одним из собственных значений соответствующего оператора. Так, каждая компонента оператора спина должна иметь два собственных значения, равных ± 1 .¹

¹ Мы еще не объяснили, что подразумевается под «компонентами» спинового оператора. Вскоре мы до этого доберемся.

Принцип 3 наиболее интересен. По крайней мере мне так кажется. В нем говорится об *однозначно различных состояниях* — ключевой идее, с которой мы уже встречались. Два состояния физически различны, если есть измерение, которое может различить их без какой-либо неоднозначности. Например, $|u\rangle$ и $|d\rangle$ можно различить, измеряя σ_z . Если вам дали спин и сказали, что он либо в состоянии $|u\rangle$, либо в состоянии $|d\rangle$, то все, что нужно сделать для определения, в каком из этих двух состояний он в действительности находится, это сориентировать A вдоль оси z и измерить σ_z . Тут нет места для ошибки. То же самое верно для $|l\rangle$ и $|r\rangle$. Рассмотреть их можно, измеряя σ_x .

Но допустим, вам сообщили, что спин находится в одном из двух состояний — $|u\rangle$ или $|r\rangle$ (*вверх* или *вправо*). Нет ничего, что вы могли бы измерить, чтобы однозначно сказать, каково истинное состояние спина. Измерение σ_z это не обеспечит. Если получилось $\sigma_z = +1$, то, возможно, исходное состояние было $|r\rangle$, поскольку существует 50-процентная вероятность получения такого результата в состоянии $|r\rangle$. По этой причине говорят, что $|u\rangle$ и $|d\rangle$ являются физически различимыми, а $|u\rangle$ и $|r\rangle$ — нет. Можно сказать, что внутреннее произведение двух состояний служит мерой невозможности уверенно их различить. Иногда это внутреннее произведение называют *перекрытием*. Принцип 3 требует, чтобы физически различные состояния представлялись ортогональными векторами состояний, то есть чтобы

эти векторы не перекрывались. Так, для спиновых состояний $\langle u|d\rangle = 0$, но $\langle u|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Наконец, принцип 4 дает количественное выражение этой идеи, формируя правило для вероятности различных исходов эксперимента. Если предположить, что система подготовлена в состоянии $|A\rangle$ и затем измеряется наблюдаемая L , то результатом будет одно из собственных значений λ_i оператора L . Но в общем случае невозможно сказать, какое из этих значений будет обнаружено. Есть лишь вероятность — назовем ее $P(\lambda_i)$ — того, что исход будет λ_i . Принцип 4 говорит, как вычислить эту вероятность, и она выражается через перекрытие $|A\rangle$ и $|\lambda_i\rangle$. Более строго, вероятность равна квадрату абсолютной величины этого перекрытия:

$$P(\lambda_i) = |\langle A|\lambda_i\rangle|^2$$

или, что эквивалентно,

$$P(\lambda_i) = \langle A|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|A\rangle.$$

Может показаться странным, почему вероятность не задается самим значением перекрытия. Почему она равна его квадрату? Не забывайте, что внутреннее произведение двух векторов не всегда положительно и даже не всегда вещественно. Так что бессмысленно отождествлять $P(\lambda_i)$ с $\langle A|\lambda_i\rangle$. Но квадрат абсолютной величины $\langle A|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|A\rangle$ всегда положителен и вещественен и, таким образом, может быть отождествлен с вероятностью определенного исхода.

Важное следствие этого принципа:

Операторы, представляющие наблюдаемые, — эрмитовы.

Причина тому двоякая. Во-первых, поскольку результат эксперимента должен быть вещественным числом, собственные числа оператора L тоже должны быть вещественными. Во-вторых, собственные векторы, которые представляют однозначно различимые результаты, должны иметь различные собственные значения, а также должны быть ортогональны. Этих условий достаточно, чтобы доказать, что L должен быть эрмитовым.

3.3. Пример: спиновые операторы

В это трудно поверить, но одиничный спин, как бы прост он ни был, все еще может многому нас научить в квантовой механике, и мы намерены выжать из него все, на что он способен. Наша цель в этом разделе — записать спиновые операторы в конкретной форме — как матрицы 2×2 . Затем мы рассмотрим, как они работают в конкретных ситуациях. Вскоре мы непосредственно займемся спиновыми операторами и векторами состояний. Но прежде чем погружаться в детали, я бы хотел поговорить немного о том, как операторы связаны с физическими измерениями. Связь эта весьма тонкая, и по мере обсуждения мы будем к ней возвращаться.

Как вы уже знаете, физики различают несколько типов физических величин, таких как скаляры и векторы. Поэтому не должен удивлять тот факт, что операторы, связанные с измерением векторов (таких как спин), сами имеют векторный характер.

На нашем пути встретилось уже более одного типа векторов. 3-вектор — наиболее простая разновидность, служащая прототипом. Это математическое представление стрелки в трехмерном пространстве и часто представляется тремя вещественными числами, которые записываются как матрица-столбец. Поскольку компоненты 3-векторов — вещественные числа, они недостаточно богаты для представления квантовых состояний. Для этого нужны бра и кеты, которые имеют комплекснозначные компоненты.

Какого рода вектором является спиновый оператор σ ? Это определенно *не* вектор состояния (бра или кет). Это также не совсем 3-вектор, хотя с ним есть выраженное семейное сходство, поскольку σ ассоциирован с направлением в пространстве. Фактически мы часто будем пользоваться σ так, как если бы он был простым 3-вектором. Однако, стараясь соблюсти корректность, мы будем называть его *3-векторным оператором*.

Но что все это действительно значит? В плане физики смысл этого следующий: так же как прибор, измеряющий спины, может лишь *отвечать на вопросы* об ориентации спина вдоль конкретного направления, спиновый оператор способен дать информацию о компоненте спина в определенном направлении. Чтобы фи-

зически измерить спин в другом направлении, нужно повернуть прибор и нацелить в нужную сторону. Эти же соображения применимы и к спиновому оператору: если надо назвать компоненту спина в другом направлении, его также требуется «поворнуть», но этого рода поворот осуществляется математически. Резюмируя, можно сказать, что спиновый оператор существует для каждого направления в пространстве, вдоль которого может быть ориентирован прибор.

3.4. Конструирование спиновых операторов

Теперь давайте проработаем детали спиновых операторов. Первая наша цель — сконструировать операторы, представляющие компоненты спина σ_x , σ_y и σ_z . А затем на их основе построить оператор, который представляет компоненту спина по любому направлению. Как обычно, начнем с σ_z . Мы знаем, что σ_z имеет фиксированную однозначную величину для состояний $|u\rangle$ и $|d\rangle$ и что соответствующие измеренные значения $\sigma_z = +1$ и $\sigma_z = -1$. Вот что говорят нам первые три принципа.

- **Принцип 1.** Каждая компонента σ представляется линейным оператором.
- **Принцип 2.** Собственные векторы σ_z — это $|u\rangle$ и $|d\rangle$. Соответствующие собственные значения — $+1$ и -1 . Это можно выразить абстрактными уравнениями:

$$\begin{aligned}\sigma_z|u\rangle &= |u\rangle, \\ \sigma_z|d\rangle &= -|d\rangle.\end{aligned}\quad (3.12)$$

- Принцип 3. Состояния $|u\rangle$ и $|d\rangle$ ортогональны друг другу. Это можно выразить в виде

$$\langle u|d\rangle = 0. \quad (3.13)$$

Вспоминая представление $|u\rangle$ и $|d\rangle$ в виде колонок из уравнений (2.11) и (2.12), можно записать (3.12) в матричной форме следующим образом:

$$\begin{pmatrix} (\sigma_z)_{11} & (\sigma_z)_{12} \\ (\sigma_z)_{21} & (\sigma_z)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

и

$$\begin{pmatrix} (\sigma_z)_{11} & (\sigma_z)_{12} \\ (\sigma_z)_{21} & (\sigma_z)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Существует единственная матрица, которая удовлетворяет этим уравнениям. Я оставляю вам в качестве упражнения доказать, что это будет

$$\begin{pmatrix} (\sigma_z)_{11} & (\sigma_z)_{12} \\ (\sigma_z)_{21} & (\sigma_z)_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

или, более кратко,

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

УПРАЖНЕНИЕ 3.2

Докажите, что уравнение (3.16) является единственным решением уравнений (3.14) и (3.15).

Это наш самый первый пример квантовомеханического оператора. Давайте подытожим, что в него вошло. Прежде всего, некоторые экспериментальные данные: существуют определенные состояния, обозначенные нами $|u\rangle$ и $|d\rangle$, в которых измерение σ_z однозначно дает результаты ± 1 . Далее, принципы говорят нам, что $|u\rangle$ и $|d\rangle$ ортогональны и являются собственными векторами линейного оператора σ_z . Наконец, из принципов также следует, что соответствующие собственные значения — это наблюдаемые (или измеряемые) значения, опять же равные ± 1 . Это все, что потребовалось для вывода уравнения (3.17).

Можем ли мы сделать то же самое для других компонент спина — σ_x и σ_y ? Да, мы можем¹. Собственные векторы σ_x — это $|r\rangle$ и $|l\rangle$ с собственными значениями $+1$ и -1 соответственно. В виде уравнений:

$$\begin{aligned}\sigma_x|r\rangle &= |r\rangle, \\ \sigma_x|l\rangle &= -|l\rangle.\end{aligned}\tag{3.18}$$

Вспомним, что $|r\rangle$ и $|l\rangle$ — это линейные суперпозиции $|u\rangle$ и $|d\rangle$:

¹ Мы не пытались незаметно пропихнуть политический лозунг. Честное слово. Просто скажи лозунгам *нет*. («Yes We Can» — «Да, мы можем» — слоган, который использовался в предвыборной кампании Барака Обамы в 2008 году. — *Прич. пер.*)

$$\begin{aligned} |r\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle. \\ |l\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle. \end{aligned} \tag{3.19}$$

Подставляя соответствующие векторы-столбцы для $|u\rangle$ и $|d\rangle$, получаем.

$$\begin{aligned} |r\rangle &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \\ |l\rangle &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Конкретизируя уравнение (3.18), можно записать их в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} (\sigma_x)_{11} & (\sigma_x)_{12} \\ (\sigma_x)_{21} & (\sigma_x)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

и

$$\begin{pmatrix} (\sigma_x)_{11} & (\sigma_x)_{12} \\ (\sigma_x)_{21} & (\sigma_x)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Если расписать эти формулы почленно, они превращаются в несложную систему из четырех уравнений для элементов матрицы $(\sigma_x)_{11}$, $(\sigma_x)_{12}$, $(\sigma_x)_{21}$ и $(\sigma_x)_{22}$. Вот ее решение:

$$\begin{pmatrix} (\sigma_x)_{11} & (\sigma_x)_{12} \\ (\sigma_x)_{21} & (\sigma_x)_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

или

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Наконец, можно проделать то же самое для σ_y . Собственные векторы σ_y — это состояния «вперед» и «назад», $|i\rangle$ и $|o\rangle$:

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|d\rangle,$$

$$|o\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|d\rangle.$$

В компонентной форме эти уравнения принимают вид

$$|i\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix},$$

$$|o\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \end{pmatrix},$$

и несложные выкладки приводят к

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Итак, три оператора σ_x , σ_y и σ_z представляются тремя матрицами

$$\begin{aligned} \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.20}$$

Эти три знаменитые матрицы носят имя своего первооткрывателя. Их называют матрицами Паули¹.

¹ Наряду с тем, что это матрицы 2×2 , они также являются кватернионами.

3.5. Распространенные недоразумения

Сейчас наступило подходящее время, чтобы предупредить о потенциальных угрозах. Соответствие между операторами и измерениями фундаментально для квантовой механики. Но его также легко понять неправильно. Вот верные утверждения об операторах в квантовой механике.

1. Операторы — это сущности, используемые для вычисления собственных значений и собственных векторов.
2. Операторы действуют на векторы состояний (которые являются абстрактными математическими объектами), а не на физические системы.
3. Когда оператор действует на вектор состояния, он порождает новый вектор состояния.

Перечислив справедливые суждения об операторах, я хочу предупредить вас о распространенных заблуждениях. Часто думают, что измерение наблюдаемой — это то же самое, что воздействие соответствующим оператором на данное состояние. Допустим, что мы хотим измерить наблюдаемую L . Измерение — это некоего рода операция, которую осуществляет прибор над системой, но эта операция вовсе не то же самое, что воздействия на состояние оператором L . Например, если состояние системы до того, как мы выполнили измерение, было $|A\rangle$, то *некорректно* говорить, что измерение L меняет состояние на $L|A\rangle$.

Чтобы понять суть дела, рассмотрим все подробно на примере. К счастью, спин из предыдущего раздела — как раз то, что для этого нужно. Вспомним уравнения (3.12):

$$\begin{aligned}\sigma_z|u\rangle &= |u\rangle, \\ \sigma_z|d\rangle &= -|d\rangle.\end{aligned}$$

В этих ситуациях нет подвоха, поскольку $|u\rangle$ и $|d\rangle$ являются собственными векторами σ_z . Если система подготовлена, скажем, в состоянии $|d\rangle$, измерение определенно даст результат -1 , а оператор σ_z преобразует приготовленное состояние в соответствующее состояние после измерения: $-|d\rangle$. Состояние $-|d\rangle$ — это то же, что и $|d\rangle$, за исключением множителя, так что эти два состояния в действительности одно и то же. Тут никаких проблем.

Но теперь рассмотрим действие оператора σ_z на приготовленное состояние $|r\rangle$, которое не является его собственным вектором. Из уравнения (3.19) мы знаем, что

$$|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle.$$

Действие оператора σ_z на этот вектор состояния дает результат

$$\sigma_z|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_z|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_z|d\rangle$$

или

$$\sigma_z|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle. \quad (3.21)$$

А вот это уже ловушка. Что бы вы ни думали, вектор состояния в правой части уравнения (3.21) определенно *не* является состоянием, которое образуется в результате измерения σ_z . Результат измерения будет либо +1, и тогда система останется в состоянии $|u\rangle$, либо -1, и тогда она окажется в состоянии $|d\rangle$. Ни один из этих результатов не оставит вектор состояния системы в суперпозиции, представленной уравнением (3.21).

Но ведь наверняка этот вектор состояния должен иметь *некое* отношение к результату измерения? Так оно и есть. Часть ответа мы найдем в главе 4, где будем рассматривать, как новый вектор состояния позволяет нам вычислять вероятности всех возможных исходов измерения. Однако результат измерения нельзя адекватно описать, не принимая во внимание прибор в качестве части системы. Что в действительности происходит во время измерения, обсуждается в разделе 7.8.

3.6. Еще раз о 3-векторных операторах

Теперь вновь обратимся к идее 3-векторного оператора. Я называл σ_x , σ_y и σ_z — компонентами спина вдоль трех осей, подразумевая, что они являются компонентами некоего рода 3-вектора. Сейчас пришло время вернуться к двум понятиям вектора, которые постоянно появляются в физике. Первое — это обыкновенная разновидность векторов в привычном трехмерном пространстве, которую мы решили называть 3-вектором.

Как мы видели, 3-векторы имеют компоненты вдоль трех пространственных направлений.

Совершенно иной смысл термина *вектор* — вектор состояния системы. Так, $|u\rangle$ и $|d\rangle$, $|r\rangle$ и $|l\rangle$ и $|i\rangle$ и $|o\rangle$ — это векторы состояний в двумерном пространстве спиновых состояний. Но что можно сказать про σ_x , σ_y и σ_z . Являются ли они векторами, и если да, то какого рода?

Ясно, что они не являются векторами состояния; они представляют собой операторы (записываемые как матрицы), которые соответствуют трем измеряемым компонентам спина. В действительности эти 3-векторные операторы представляют собой новый тип вектора. Они отличаются как от векторов состояния, так и от обычных 3-векторов. Но поскольку спиновые операторы ведут себя во многом как 3-векторы, нет большой беды думать о них подобным образом, и так мы и будем здесь поступать.

Мы измеряем компоненты спина, ориентируя прибор \mathcal{A} вдоль одной из трех осей и затем активируя его. Но тогда почему не сориентировать \mathcal{A} вдоль любой оси и не измерить компоненту σ вдоль этой оси? Иначе говоря, возьмем любой единичный 3-вектор \hat{n} с компонентами n_x , n_y и n_z и сориентируем прибор \mathcal{A} своей стрелкой вдоль \hat{n} . Активировав \mathcal{A} , мы измерим компоненту σ вдоль оси \hat{n} . Значит, должен существовать оператор, соответствующий этой измеримой величине.

Если σ действительно ведет себя как 3-вектор, то компонента σ вдоль \hat{n} — это не что иное, как обычно

скалярное произведение σ и \hat{n} ^{1,2}. Обозначим σ_n соответствующую компоненту σ , то есть

$$\sigma_n = \vec{\sigma} \cdot \hat{n}$$

или, в развернутом виде,

$$\sigma_n = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z. \quad (3.22)$$

Чтобы прояснить смысл этого уравнения, имейте в виду, что компоненты \hat{n} — это просто числа. Они сами не операторы. Уравнение (3.22) описывает векторный оператор, сконструированный как сумма трех членов, каждый из которых содержит числовой коэффициент n_x , n_y или n_z . Для большей конкретности запишем уравнение (3.22) в матричной форме:

$$\sigma_n = n_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + n_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + n_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Или еще более явно, скомбинировав все эти три члена в единую матрицу:

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} n_z & (n_x - i n_y) \\ (n_x + i n_y) & -n_z \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

¹ Мы начинаем использовать обозначение $\vec{\sigma}$ за исключением случаев, когда ссылаемся на компоненты вроде σ_x .

² Внимательный читатель может тут предъявить претензию, поскольку результат этого «обычного» скалярного произведения матрица 2×2 , а не скаляр, так что оно *не совсем* обычное. Возможно, какое-то успокоение можно найти в том факте, что результирующий матричный оператор соответствует компоненте вектора, которая *является* скаляром. Главное, что в итоге все сходится.

На что это годится? Ни на что, пока мы не нашли собственные значения и собственные векторы σ_n . Но если сделаем это, мы будем знать возможные исходы измерения вдоль направления \hat{n} . И мы также сможем рассчитать вероятности всех этих исходов. Другими словами, мы получим полную картину измерений спина в трехмерном пространстве. На мой вкус, это совершенно замечательно.

3.7. Собираем урожай

Сейчас мы подошли к тому, чтобы выполнить некоторые реальные вычисления, нечто такое, что заставит вашего внутреннего физика прыгать от радости. Рассмотрим специальный случай, где \hat{n} лежит в плоскости $x-z$, которая совпадает с плоскостью этой страницы. Поскольку \hat{n} — единичный вектор, можно записать

$$\begin{aligned} n_z &= \cos\theta, \\ n_x &= \sin\theta, \\ n_y &= 0, \end{aligned}$$

где θ — угол между осями z и \hat{n} . Поставив эти выражения в уравнение (3.23), получим

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}.$$

УПРАЖНЕНИЕ 3.3

Вычислите собственные векторы и собственные значения σ_n . *Подсказка:* сделайте предположения, что собственный вектор λ_1 имеет вид

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix},$$

где α — неизвестный параметр. Оставьте этот вектор в уравнение для собственных значений и выразите α через θ . Почему мы используем лишь один параметр α ? Обратите внимание, что наш предполагаемый вектор-столбец должен иметь единичную длину.

Вот результаты:

$$\lambda_1 = 1,$$

$$|\lambda_1\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

и

$$\lambda_2 = -1,$$

$$|\lambda_2\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Обратите внимание на некоторые важные факты. Впервые, полученные два собственных значения вновь

равны $+1$ и -1 . Это не должно было вас удивить: прибор \mathcal{A} способен выдавать только один из этих двух ответов, независимо от того, куда он направлен. Но все равно хорошо, что это вытекает из уравнений. Во-вторых, два найденных собственных вектора ортогональны.

Теперь мы готовы сделать экспериментальные предсказания. Допустим, \mathcal{A} первоначально указывает вдоль оси z , и мы приготовили спин в состоянии *вверх* $|u\rangle$. Затем мы поворачиваем \mathcal{A} так, чтобы он был направлен вдоль оси \hat{n} . Какова вероятность наблюдать $\sigma_n = +1$? Используем представление $\langle u|$ и $|\lambda_1\rangle$ в виде строки и столбца и, согласно принципу 4, получим ответ:

$$P(+1) = |\langle u | \lambda_1 \rangle|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2}. \quad (3.24)$$

Аналогично для тех же настроек

$$P(-1) = |\langle u | \lambda_2 \rangle|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (3.25)$$

Получив этот результат, мы почти замкнули круг. Когда мы познакомились со спином, то говорили, что если приготовить большое число спинов в состоянии *вверх*, а затем измерить их компоненту вдоль оси \hat{n} , расположенной под углом θ к оси z , то среднее измеренное значение будет $\cos\theta$ — такой же результат мы получили бы для простого 3-вектора в классической физике. Дает ли наше математическое описание такой же результат? *Он даже лучше!* Если теория расходится с экспериментом, такая теория отправляется в изгнание. Посмотрим, как хорошо держится пока наша теория.

К сожалению, нам придется немного сжульничать, используя формулу, которую мы сможем полностью объяснить только на следующей лекции. Эта формула говорит нам, как вычислять среднее значение измерения (также называемое ожидаемым значением). Вот эта формула:

$$\langle L \rangle = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i). \quad (3.26)$$

Достаточно сказать, что (3.26) — это просто стандартная формула для среднего значения. Она неспецифична для квантовой механики.

Чтобы вычислить среднее значение измерения, соответствующее оператору L , мы умножим каждое собственное значение на его вероятность, а затем сложим результаты. Конечно, оператор, который мы рассматриваем сейчас, это просто σ_n . И нам уже известны все необходимые значения. Просто подставим их в формулу. Используя уравнения (3.24) и (3.25) вместе с известными собственными значениями, получаем

$$\sigma_n = (+1) \cos^2 \frac{\theta}{2} + (-1) \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

или

$$\langle \sigma_n \rangle = \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2}.$$

Если вы помните тригонометрию, то это дает

$$\langle \sigma_n \rangle = \cos \theta,$$

что прекрасно согласуется с экспериментом. Да! Мы это сделали!

Зайдя так далеко, вы наверняка захотите приложить руку к немного более общей задаче. Как и прежде, мы начнем с прибора \mathcal{A} , ориентированного по направлению z . Но на этот раз, после того как спин приготовлен в состоянии *вверх*, мы можем перед вторым набором измерений повернуть \mathcal{A} в произвольном направлении в пространстве. В данном случае $n_y \neq 0$. Попробуйте разобраться с этой ситуацией.

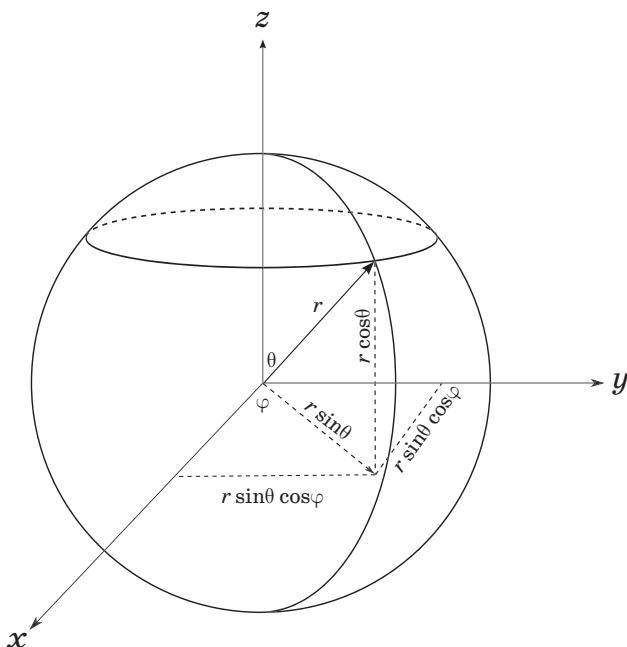


Рис. 3.2. Сферические координаты. На этой схеме показана общепринятая система сферических координат r, θ и φ . Она также иллюстрирует преобразование к физическим координатам:
 $x = r \sin\theta \cos\varphi$, $y = r \sin\theta \sin\varphi$ и $z = r \cos\theta$

УПРАЖНЕНИЕ 3.4

Пусть $n_z = \cos\theta$, $n_x = \sin\theta$ и $n_y = \sin\theta \sin\varphi$. Углы θ и φ соответствуют обычному соглашению о сферических координатах (рис. 3.2). Вычислите собственные значения и собственные векторы для матрицы из уравнения (3.23).

Вы также можете попробовать справиться с гораздо более сложным примером, включающим два направления \hat{n} и \hat{m} . В этом случае *А* не только *заканчивает* работу в произвольном направлении; он также *начинает* с (другого) произвольного направления.

УПРАЖНЕНИЕ 3.5

Пусть спин приготовлен так, что $\sigma_m = +1$. Прибор затем поворачивается в направлении \hat{n} и изменяет σ_n . Какова вероятность того, что в результате будет получено $+1$? Обратите внимание, что $\sigma_m = \sigma \cdot \hat{m}$ — используется то же соглашение об обозначениях, что и для σ_n .

Ответом будет квадрат косинуса половины угла между \hat{n} и \hat{m} . Сможете ли вы это доказать?

3.8. Принцип спиновой поляризации

Существует важная теорема, которую вы можете по-пробовать доказать. Я буду называть ее так:

Принцип спиновой поляризации: любое состояние отдельного спина является собственным вектором некоторой компоненты спина.

Другими словами, для любого состояния

$$|A\rangle = \alpha_u|u\rangle + \alpha_d|d\rangle$$

существует некое направление \hat{n} , такое что

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{n} |A\rangle = |A\rangle.$$

Это значит, что для любого спинового состояния существует некая ориентация прибора \mathcal{A} , при которой он, срабатывая, регистрирует +1. На физическом языке мы говорим, что это состояние спина характеризуется *вектором поляризации*, и компонента спина вдоль вектора поляризации предсказуемо равна +1, при том предположении, конечно, что мы знаем вектор состояния.

Интересное следствие из этой теоремы состоит в том, что не существует состояния, для которого *средние значения* всех трех компонент спина были бы равны нулю. Существует количественный способ выразить это. Рассмотрим среднее значение спина вдоль направления \hat{n} . Поскольку $|A\rangle$ является собственным вектором

$\vec{\sigma} \cdot \vec{n}$ (с собственным значением +1), отсюда следует, что среднее значение можно выразить как

$$\langle \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \rangle = 1.$$

С другой стороны, для компонент, перпендикулярных к σ , средние значения в состоянии $|A\rangle$ равны нулю. Отсюда следует, что квадраты средних значений всех трех компонент σ в сумме дают 1. Более того, для любого состояния верно следующее равенство:

$$\langle \sigma_x \rangle^2 + \langle \sigma_y \rangle^2 + \langle \sigma_z \rangle^2 = 1. \quad (3.27)$$

Запомните этот факт. Мы вернемся к нему в лекции 6.

Лекция 4. Время и изменение

В конце бара в одиночестве сидит пугающего вида громила. На его футболке написано: « -1 ».

Арт: Что это за парень «Минус Один», вон там в углу? Вышибала?

Ленни: Это гораздо больше чем вышибала. Это ЗАКОН.

Без него все это заведение немедленно развалилось бы.

4.1. Напоминание о классике

В *томе I* понадобилось чуть больше страницы, чтобы объяснить, что такое состояние в классической механике. В квантовой версии, чтобы достичь того же самого, понадобилось три лекции, три математических интерлюдии, что по моим подсчетам составляет около 17 000 слов. Теперь мы знаем, что такое состояние.

Однако, так же как в классической физике, знание состояния системы — это только половина истории. Другая половина включает закон, согласно которому состояния изменяются во времени. Им-то мы теперь и займемся.

Но прежде позвольте мне коротко напомнить о природе изменений в классической физике. В классике пространство состояний — это математическое множество. Логика является булевой, а эволюция состояний во времени — детерминистической и обратимой. В простейшем примере, который мы рассматривали, пространство состояний содержало всего несколько точек: Аверс и Реверс для монеты, $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ для игральной кости. Состояния изображались множеством точек на странице, а эволюция во времени была лишь правилом, говорящим, какое состояние будет следующим. Закон движения представлялся графом со стрелками, соединяющими состояния. Главное правило — детерминизм — утверждало, что где бы вы ни оказались в пространстве состояний, следующее состояние полностью определяется законом движения. Но было также и другое правило, называемое обратимостью, — это требование, согласно которому надлежащим образом сформулированный закон должен также говорить, где вы были в предыдущий момент. Хороший закон соответствует графу, в котором ровно одна стрелка входит в каждое состояние и одна из него — выходит.

Есть другой способ описать эти требования. Я называю его *минус первым законом*, поскольку он пред-

шествует всем прочим. Он утверждает, что информация никогда не пропадает. Если две идентичные изолированные системы стартуют из разных состояний, то они останутся в разных состояниях. Более того, в прошлом они тоже были в разных состояниях. С другой стороны, если две идентичные системы находятся в какой-то момент времени в одинаковых состояниях, то их истории и будущая эволюция должны быть идентичными. Различия сохраняются. Квантовая версия минус первого закона называется *унитарностью*.

4.2. Унитарность

Рассмотрим замкнутую систему, которая в момент времени t находится в квантовом состоянии $|\Psi\rangle$. (Греческая буква Ψ [пси] традиционно используется для обозначения квантовых состояний при рассмотрении эволюции систем.) Для указания того, что состояние $|\Psi\rangle$ имело место в определенный момент времени t , мы немного усложним обозначения и будем называть это состояние $|\Psi(t)\rangle$. Конечно, такое обозначение предполагает нечто большее, чем просто «в момент t состояние было $|\Psi\rangle$ ». В нем также подразумевается, что состояние может быть иным в другие моменты времени. Таким образом, мы считаем, что $|\Psi(t)\rangle$ представляет всю историю системы.

Фундаментальное предположение динамики в приложении к квантовой механике состоит в том, что если

известно состояние в один момент времени, то квантовые уравнения движения скажут, каким оно будет в дальнейшем. Без потери общности можно считать начальный момент нулевым, а более поздний момент обозначать t . Состояние в момент t определяется некоей операцией, обозначаемой $\mathbf{U}(t)$, которая воздействует на состояние в нулевой момент. Без дальнейшего уточнения свойств $\mathbf{U}(t)$ это очень мало что нам говорит, за исключением того, что $|\Psi(t)\rangle$ определяется состоянием $|\Psi(0)\rangle$. Запишем эту связь в виде формулы:

$$|\Psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t)|\Psi(0)\rangle. \quad (4.1)$$

Операция \mathbf{U} называется *оператором сдвига во времени* для данной системы.

4.3. Детерминизм в квантовой механике

На этом месте нам необходимо обозначить некоторые очень важные различия. Мы определили $\mathbf{U}(t)$ таким образом, чтобы вектор состояния изменялся детерминистическим образом. Да, вы все правильно услышали — эволюция во времени вектора состояния является *детерминистической*. Это замечательно, поскольку у нас появляется инструмент, с помощью которого можно пытаться делать предсказания. Но как же это согласуется со статистическим характером результатов наших измерений?

Как мы уже видели, знание квантового состояния не означает возможности с уверенностью предсказывать результат эксперимента. Например, знание о том, что спин находится в состоянии $|r\rangle$, позволяет предсказать результат измерения σ_x , но ничего не говорит об измерениях σ_z и σ_y . По этой причине уравнение (4.1) отличается от классического детерминизма, который позволяет предсказывать результаты экспериментов. Квантовая эволюция состояния позволяет вычислять лишь вероятности исходов *последующих* экспериментов.

Это одно из ключевых различий между квантовой механикой и классической. Оно связано с отношением между состояниями и измерениями, о котором говорилось в самом начале этой книги. В классической механике фактически не существует разницы между состояниями и измерениями. В квантовой механике это различие очень глубокое.

4.4. Присмотримся к $\mathbf{U}(t)$

Общепринятая квантовая механика накладывает на $\mathbf{U}(t)$ пару ограничений. Прежде всего, она требует, чтобы операция $\mathbf{U}(t)$ была линейным оператором. Это неудивительно. Взаимосвязи между состояниями в квантовой механике всегда линейные. Это соответствует представлению о том, что пространство состояний является векторным пространством. Однако линейность — это не единственное условие, наклады-

ваемое квантовой механикой на $\mathbf{U}(t)$. Она также требует соблюдения кванто-вомеханического аналога минус первого закона: *сохранение различий*.

Вспомним из предыдущей лекции, что два состояния различимы, если они ортогональны. Будучи ортогональными, два различных базисных вектора представляют два различных состояния. Предположим, что $|\Psi(0)\rangle$ и $|\Phi(0)\rangle$ — два различных состояния; другими словами, существует эксперимент, который может однозначно отличить их друг от друга, а следовательно, они должны быть ортогональными:

$$\langle\Psi(0)|\Phi(0)\rangle = 0.$$

Из требования сохранения различий вытекает, что они будут оставаться ортогональными все время. Это можно выразить следующим образом:

$$\langle\Psi(t)|\Phi(t)\rangle = 0 \tag{4.2}$$

для всех значений t . Из этого принципа есть следствие в отношении оператора сдвига во времени $\mathbf{U}(t)$. Чтобы разобраться, в чем они состоят, превратим кет-вектор из уравнения (4.1) в соответствующий бра-вектор:

$$\langle\Psi(t)| = \langle\Psi(0)|\mathbf{U}^\dagger(t). \tag{4.3}$$

Обратите внимание на крестик, означающий эрмитово сопряжение. Теперь подставим (4.1) и (4.3) в уравнение (4.2):

$$\langle\Psi(0)|\mathbf{U}^\dagger(t)\mathbf{U}(t)|\Phi(0)\rangle = 0. \tag{4.4}$$

Для анализа следствий из этого уравнения рассмотрим ортонормированный базис векторов $|i\rangle$. Годится любой базис. Условие ортонормированности выражается уравнением

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij},$$

где δ_{ij} — уже известный нам символ Кронекера.

Пусть теперь $|\Phi(0)\rangle$ и $|\Psi(0)\rangle$ будут элементами этого ортонормированного базиса. Подстановка в уравнение (4.4) дает

$$\langle i|\mathbf{U}^\dagger(t)\mathbf{U}(t)|j\rangle = 0 \quad (i \neq j),$$

где i и j — не совпадают. С другой стороны, если i и j одинаковы, то это же можно сказать и о результирующих векторах $\mathbf{U}(t)|i\rangle$ и $\mathbf{U}(t)|j\rangle$. В этом случае их внутреннее произведение должно быть равно 1. Таким образом, общая взаимосвязь принимает вид

$$\langle i|\mathbf{U}^\dagger(t)\mathbf{U}(t)|j\rangle = \delta_{ij}.$$

Другими словами, оператор $\mathbf{U}^\dagger(t)\mathbf{U}(t)$ ведет себя как единичный оператор I , когда он действует между любыми членами базиса. Отсюда легко доказать, что $\mathbf{U}^\dagger(t)\mathbf{U}(t)$ действует как единичный оператор I в отношении любых состояний. Оператор \mathbf{U} , удовлетворяющий условию

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = I,$$

называется *унитарным*. На физическом жаргоне говорят, что *эволюция во времени унитарна*.

Унитарные операторы играют колоссальную роль в квантовой механике, представляя все виды преобразований пространства состояний. Эволюция во времени — лишь один пример. Таким образом, в этом разделе мы пришли к пятому принципу квантовой механики.

- Принцип 5. Эволюция вектора состояния во времени унитарна.

УПРАЖНЕНИЕ 4.1

Докажите, что если U — унитарен и если $|A\rangle$ и $|B\rangle$ — любые два вектора состояния, то внутреннее произведение $U|A\rangle$ и $U|B\rangle$ будет таким же, как внутреннее произведение $|A\rangle$ и $|B\rangle$. Это иногда называют *сохранением перекрытия*. Этим выражается тот факт, что логическая связь между состояниями сохраняется во времени.

4.5. Гамильтониан

Изучая классическую механику, мы познакомились с идеей пошаговых изменений во времени. Квантовая механика не отличается в этом отношении: конечные интервалы времени можно составлять, объединяя множество бесконечно малых интервалов. Это приводит

к дифференциальным уравнениям эволюции вектора состояния. Следуя по этому пути, мы заменяем интервал времени t бесконечно малым интервалом времени ε и рассматриваем оператор сдвига во времени для этого малого интервала.

Есть два принципа, которые должны учитываться при рассмотрении таких малых изменений. Первый принцип — унитарность:

$$\mathbf{U}^\dagger(\varepsilon)\mathbf{U}(\varepsilon) = I. \quad (4.5)$$

Второй принцип — непрерывность. Это означает, что вектор состояния изменяется плавно. Чтобы выразить это точно, рассмотрим сначала случай, когда ε равно нулю. Тогда, очевидно, оператор сдвига во времени будет тождественным оператору I . Непрерывность означает, что если ε очень мало, то $\mathbf{U}(\varepsilon)$ близок к тождественному оператору, отличаясь от него на величину порядка ε . Поэтому запишем

$$\mathbf{U}(\varepsilon) = I - i\varepsilon\mathbf{H}. \quad (4.6)$$

Вы, возможно, удивитесь, почему я ставлю перед \mathbf{H} знак минус и i . Эти множители на данном этапе совершенно произвольны. Другими словами, это соглашение, за которым не стоит никакого конкретного смысла. Я использую их с прицелом на будущее, когда мы обнаружим, что \mathbf{H} — это нечто, знакомое нам из классической физики.

Нам также необходимо выражение для \mathbf{U}^\dagger . Помня, что эрмитово сопряжение требует комплексного сопряжения коэффициентов, находим, что

$$\mathbf{U}^\dagger(\varepsilon) = I + i\varepsilon\mathbf{H}^\dagger. \quad (4.7)$$

Теперь подставляем (4.6) и (4.7) в условие унитарности (4.5):

$$(I + i\varepsilon\mathbf{H}^\dagger)(I - i\varepsilon\mathbf{H}) = I.$$

Раскрывая скобки и рассматривая первый порядок по ε , получаем

$$\mathbf{H}^\dagger - \mathbf{H} = 0$$

или, в более явном виде,

$$\mathbf{H}^\dagger = \mathbf{H}. \quad (4.8)$$

Это уравнение выражает условие унитарности. Но оно также говорит, что \mathbf{H} является эрмитовым оператором. Это очень важно. Теперь мы можем утверждать, что \mathbf{H} является наблюдаемой и обладает полным набором ортонормированных собственных векторов с соответствующими собственными значениями. В дальнейшем \mathbf{H} окажется очень знакомым объектом, а именно *квантовым гамильтонианом*. Его собственные значения — это значения, которые могут получаться при измерении энергии квантовой системы. Почему мы отождествляем \mathbf{H} с классическим понятием гамильтониана, а его собственные значения с энергией, вскоре станет ясно.

Вернемся к уравнению (4.1) и применим его к случаю бесконечно малого $t = \varepsilon$. Пользуясь (4.6), находим

$$|\Psi(\varepsilon)\rangle = |\Psi(0)\rangle - i\varepsilon\mathbf{H}|\Psi(0)\rangle.$$

Уравнение такого вида можно легко превратить в дифференциальное. Прежде всего перенесем первый член из правой части в левую, а затем разделим на ε :

$$\frac{|\Psi(\varepsilon)\rangle - |\Psi(0)\rangle}{\varepsilon} = -i\mathbf{H}|\Psi(0)\rangle.$$

Если вы не забыли математический анализ (краткая сводка дана в *томе I*), то заметите, что левая часть этого уравнения очень похожа на определение производной. При переходе к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$ она превращается в производную вектора состояния по времени:

$$\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = -i\mathbf{H}|\Psi\rangle. \quad (4.9)$$

Первоначально мы стали считать значение временнóй переменной равным нулю, однако в выборе $t = 0$ нет ничего особенного. Проделай мы те же вычисления с другим значением времени, получился бы точно такой же результат, как в уравнении (4.9). Оно говорит нам, как изменяется вектор состояния: если мы знаем его в один момент, уравнение позволяет определить, каким он будет в следующий. Уравнение (4.9) достаточно важное, чтобы носить собственное имя. Оно называется *зависящим от времени уравнением Шрёдингера*, или, иногда, *уравнением Шрёдингера*

*в общем случае*¹. Если известен гамильтониан, то он говорит, как состояние невозмущенной системы меняется со временем. Арту нравится называть этот вектор состояния *кетом Шрёдингера*. Он даже хотел добавить к греческой букве небольшие усики², однако я нарисовал черточку в другом месте.

4.6. Что случилось с \hbar ?

Я уверен, что все вы слышали о постоянной Планка. Сам Планк обозначил ее \hbar и оценил, что ее значение составляет около $6,6 \times 10^{-34}$ кг · м²/с. Последователи определили ее, разделив на 2π и обозначив результат \hbar :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054571726\dots \times 10^{-34} \text{ кг} \cdot \text{м}^2/\text{с}.$$

Зачем делить на 2π ? Потому что это избавляет от появления 2π во многих других местах. С учетом значения постоянной Планка для квантовой механики кажется немного странным, что она до сих пор не появлялась. Сейчас мы это исправим.

В квантовой механике, как и в классической физике, гамильтониан — это математический объект, который представляет энергию системы. Отсюда возникает вопрос, который, если вы очень внимательны,

¹ В русскоязычной литературе также встречается термин *нестационарное уравнение Шрёдингера*. — Примеч. науч. ред.

² Ладно-ладно, шучу.

мог вызвать у вас недоумение. Присмотримся к уравнению (4.9). Оно лишено смысла в плане размерности. Если игнорировать $|\Psi\rangle$ в обеих частях уравнения, то размерность его левой части будет обратным временем. Если же квантовый гамильтониан действительно соответствует энергии, то и единицы в правой части должны быть энергетическими. Энергия измеряется в джоулях, или $\text{кг}\cdot\text{м}^2/\text{с}^2$. Очевидно, что я немного смущался. Решение этой проблемы состоит в использовании \hbar , фундаментальной константы, имеющей размерность $\text{кг}\cdot\text{м}^2/\text{с}$. Постоянная с такой размерностью — это как раз то, что нужно, для обеспечения согласованности уравнения (4.9). Перепишем его, добавив постоянную Планка так, чтобы обеспечить согласование размерностей:

$$\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = -i\mathbf{H}|\Psi\rangle. \quad (4.10)$$

Почему постоянная \hbar имеет такое смехотворно малое численное значение? Ответ на этот вопрос больше относится к биологии, чем к физике. Подлинный вопрос не в том, почему \hbar так мала, а в том, почему мы так велики. Используемые нами единицы отражают наши собственные размеры. Происхождение метра, по-видимому, связано с его использованием для измерения длины веревок или тканей: он примерно равен расстоянию от носа человека до кончиков пальцев вытянутой руки. Секунда сопоставима по продолжительности с ритмом сердцебиения. А кило-

грамм — это вес, который удобно носить с собой. Мы используем эти единицы, потому что они удобны, но фундаментальная физика не проявляет о нас особой заботы. Размер атома составляет примерно 10^{-10} метра. Почему он такой маленький? Это неправильный вопрос. Правильный: почему в руке так много атомов? Дело в том, что для создания функционального, умного, пользующегося орудиями труда существа нужно соединить очень много атомов. Аналогичным образом килограмм намного больше атомных масс просто потому, что люди не носят с собой отдельные атомы; их слишком легко потерять. То же относится и ко времени, к нашей длинной, требующей большой усидчивости секунде. В итоге причина малости постоянной Планка состоит в том, что мы очень велики, тяжелы и медлительны.

Физики, которые интересуются микромиром, предпочтают использовать единицы, более приспособленные для изучаемых ими явлений. Если пользоваться атомными масштабами длины, времени и массы, то постоянная Планка уже не будет таким громоздким числом; она будет намного ближе к 1. Фактически единицы измерения, в которых постоянная Планка равна 1, — это естественный выбор для квантовой механики, и чаще всего используют именно их. Однако в этой книге мы обычно будем сохранять \hbar в наших уравнениях.

4.7. Средние (ожидаемые) значения

Сделаем небольшой перерыв, чтобы обсудить важный аспект статистики, а именно идею среднего значения. Мы вскользь упоминали о ней в предыдущей лекции, но сейчас пришло время рассмотреть ее поближе.

В квантовой механике средние значения называют также ожидаемыми значениями. (В определенном смысле это неудачный выбор термина; позднее я объясню почему¹.) Рассмотрим функцию вероятности исхода эксперимента, в котором измеряется наблюдаемая L . Исход должен быть одним из собственных значений $L = \lambda_i$, а функция вероятности — $P(\lambda_i)$. В статистике среднее значение обозначается черточкой над измеряемой величиной. Среднее значение наблюдаемой L будет \bar{L} . В квантовой механике стандартное обозначение другое, выросшее из удачной бра-кет-нотации Поля Дирака. Мы записываем среднее значение L в виде $\langle L \rangle$. Вскоре мы узнаем, почему бра-кет-нотация так естественна, но сначала давайте обсудим смысл термина *среднее*.

С математической точки зрения среднее определяется формулой

$$\langle L \rangle = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i). \quad (4.11)$$

¹ В русскоязычной литературе преимущественно используется термин *среднее значение*. В дальнейшем будет в основном применяться именно он. — Примеч. пер.

Другими словами, это взвешенная сумма, вес в которой представлен функцией вероятности P .

С другой стороны, среднее можно определить экспериментальным путем. Предположим, что выполнен очень большой ряд одинаковых экспериментов и записаны полученные исходы. Определим функцию вероятности чисто наблюдательным способом: будем считать $P(\lambda_i)$ долей наблюдений, в которых фиксируется результат λ_i . Определение (4.11) тогда совпадает с экспериментальным средним по всем наблюдениям. Фундаментальная гипотеза любой статистической теории состоит в том, что если число экспериментов достаточно велико, то математические понятия вероятности и среднего согласуются с экспериментальными. Мы не будем подвергать сомнению эту гипотезу.

Теперь я докажу небольшую красивую теорему, которая объясняет использование бра-кет-нотации для средних. Пусть $|A\rangle$ — нормированное состояние квантовой системы. Разложим $|A\rangle$ по ортонормированному базису собственных векторов L :

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |\lambda_i\rangle. \quad (4.12)$$

Из чистого интереса, без всякой задней мысли попробуем вычислить величину $\langle A | L | A \rangle$. Смысл этого должен быть ясен: сначала действуем на $|A\rangle$ линейным оператором L ¹. Затем возьмем внутреннее произведение

¹ Тот же результат должен получиться, если сначала действовать L на $\langle A |$.

результата с бра $\langle A|$. Выполним первый из этих шагов, применив \mathbf{L} к обеим частям уравнения (4.12):

$$\mathbf{L}|A\rangle = \sum_i \alpha_i \mathbf{L}|\lambda_i\rangle.$$

Помните, что векторы $|\lambda_i\rangle$ являются собственными векторами \mathbf{L} . Учитывая тот факт, что $\mathbf{L}|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle$, можно записать

$$\mathbf{L}|A\rangle = \sum_i \alpha_i \lambda_i |\lambda_i\rangle.$$

Последний шаг состоит в том, чтобы вычислить внутреннее произведение с $\langle A|$. Мы сделаем это, разложив бра $\langle A|$ по собственным векторам в правой части уравнения, а зачем использовав ортонормированность собственных векторов. В результате получится

$$\langle A|\mathbf{L}|A\rangle = \sum_i (\alpha_i^* \alpha_i) \lambda_i. \quad (4.13)$$

Обратившись к принципу вероятности (принципу 4), отождествим $(\alpha_i^* \alpha_i)$ с вероятностью $P(\lambda_i)$ и сразу увидим, что выражение в правой части (4.13) совпадает с выражением в правой части (4.11). То есть можно сказать, что

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \langle A|\mathbf{L}|A\rangle. \quad (4.14)$$

Тем самым мы получили быстрое правило для вычисления средних: просто сделайте сэндвич, поместив наблюдаемую между бра- и кет-представлениями вектора состояния.

В предыдущей лекции (раздел 3.5) было обещание разъяснить, как действие эрмитова оператора на вектор состояния связано с результатами физических измерений. Вооружившись нашим новым знанием о средних значениях, можно теперь выполнить это обещание. Если вернуться к уравнению (3.21), мы увидим пример оператора σ_z , действующего на вектор состояния $|r\rangle$ и дающего новый вектор состояния. Можно рассматривать это уравнение как половину вычисления среднего значения измерения σ_z , соответствующую правой части нашего сэндвича, если вам нравится. Остающаяся часть вычисления включает взятие внутреннего произведения этого вектора состояния с дуальным вектором $\langle r|$. Так что, когда σ_z действует на $|r\rangle$ в уравнении (3.21), получается вектор состояния, по которому можно вычислить вероятности каждого из исходов измерения σ_z .

4.8. Игнорирование фазового множителя

В предыдущих лекциях мы говорили, что можно игнорировать общий фазовый множитель вектора состояния, и обещали в дальнейшем объяснить почему. Разобравшись с правилом для средних, мы можем немного отвлечься и исполнить это обещание.

Что означает игнорирование «общего фазового множителя»? Это значит, что можно умножить любой вектор состояния на константу $e^{i\theta}$, где θ — веществен-

ное число, без изменения физического смысла вектора состояния. Чтобы убедиться в этом, умножим уравнение (4.12) на $e^{i\theta}$ и назовем результат $|B\rangle$:

$$|B\rangle = e^{i\theta} |A\rangle = e^{i\theta} \sum_j \alpha_j |\lambda_j\rangle. \quad (4.15)$$

Обратите внимание, во избежание путаницы индекс суммирования изменен с i на j . Нетрудно заметить, что $|B\rangle$ имеет ту же абсолютную величину, что и $|A\rangle$, поскольку абсолютная величина $e^{i\theta}$ равна единице:

$$\langle B|B\rangle = \langle Ae^{-i\theta}|e^{i\theta}A\rangle = \langle A|A\rangle.$$

Такого же типа сокращение сохраняет и другие величины. Например, амплитуда вероятности α_j состояния $|A\rangle$ становится равной $e^{i\theta}\alpha_j$ для $|B\rangle$, так что амплитуды вероятности различаются. Однако физический смысл имеет реальная вероятность, а не амплитуда. Если система находится в состоянии $|B\rangle$ и мы выполняем изменение, его результат будет собственным значением $|\lambda_j\rangle$ с вероятностью

$$\alpha_j^* e^{-i\theta} e^{i\theta} \alpha_j = \alpha_j^* \alpha_j,$$

которая равна той, что получается для состояния $|A\rangle$. Наконец, используем тот же трюк для среднего значения эрмитова оператора L . Применив уравнение (4.14) к состоянию $|B\rangle$, можно записать

$$\langle L \rangle = \langle B|L|B\rangle.$$

Подставляя $|B\rangle$ из уравнения (4.15), получаем

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \langle A e^{-i\theta} | \mathbf{L} | e^{i\theta} A \rangle$$

или

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \langle A | \mathbf{L} | A \rangle.$$

Другими словами, \mathbf{L} имеет то же среднее значение в состоянии $|B\rangle$, что и в состоянии $|A\rangle$. Обещание выполнено.

4.9. Связи с классической механикой

Среднее, или ожидаемое значение наблюдаемой — это понятие в квантовой механике, самое близкое к классическому понятию величины. Если распределение вероятности для наблюдаемой имеет приятную форму не слишком широкой колоколообразной кривой, то ожидаемое значение — действительно то самое, которое, скорее всего, получится при измерении. Если система столь велика и тяжела, что квантовая механика для нее не слишком важна, то среднее значение наблюдаемой ведет себя почти в точном соответствии с классическими уравнениями движения. По этой причине интересно и важно определить, как средние значения меняются во времени.

Прежде всего, *почему* они меняются во времени? Потому что во времени меняется состояние системы. Предположим, что состояние в момент t представляется

кетом $|\Psi(t)\rangle$ и бра $\langle\Psi(t)|$. Среднее значение для наблюдаемой \mathbf{L} в момент t

$$\langle\Psi(t)|\mathbf{L}|\Psi(t)\rangle.$$

Посмотрим, как меняется эта величина, дифференцируя ее по времени и используя уравнение Шрёдингера для производных по t от $|\Psi(t)\rangle$ и $\langle\Psi(t)|$. По правилу дифференцирования произведения получаем

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\mathbf{L}|\Psi(t)\rangle=\langle\dot{\Psi}(t)|\mathbf{L}|\Psi(t)\rangle+\langle\Psi(t)|\mathbf{L}|\dot{\Psi}(t)\rangle,$$

где, как обычно, точка обозначает производную по времени. \mathbf{L} не имеет явной зависимости от времени, так что просто сохраняется по ходу выкладок. Теперь подставим в бра и кет выражения из уравнения Шрёдингера (4.10):

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\mathbf{L}|\Psi(t)\rangle=\frac{i}{\hbar}\langle\Psi(t)|\mathbf{H}\mathbf{L}|\Psi(t)\rangle-\frac{i}{\hbar}\langle\Psi(t)|\mathbf{L}\mathbf{H}|\Psi(t)\rangle$$

или, в более компактной форме,

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\mathbf{L}|\Psi(t)\rangle=\frac{i}{\hbar}\langle\Psi(t)|[\mathbf{H}\mathbf{L}-\mathbf{L}\mathbf{H}]|\Psi(t)\rangle. \quad (4.16)$$

При использовании обычной алгебры уравнение (4.16) выглядело бы странным. В правой части содержится выражение $\mathbf{H}\mathbf{L} - \mathbf{L}\mathbf{H}$, которое в обычных обстоятельствах равно нулю. Но линейные операторы — это не обычные числа: когда они перемножаются (или последовательно применяются), порядок имеет значение. В общем случае, когда \mathbf{H} действует на $\mathbf{L}|\Psi\rangle$, результат получается не таким, как в случае, когда \mathbf{L} действует

на $\mathbf{H}|\Psi\rangle$. Другими словами, за исключением специальных случаев, $\mathbf{H}\mathbf{L} \neq \mathbf{L}\mathbf{H}$. Если даны два оператора или матрицы, то выражение

$$\mathbf{LM} - \mathbf{ML}$$

называется коммутатором \mathbf{L} и \mathbf{M} и для него используется специальное обозначение:

$$\mathbf{LM} - \mathbf{ML} = [\mathbf{L}, \mathbf{M}].$$

Важно отметить, что $[\mathbf{L}, \mathbf{M}] = -[\mathbf{M}, \mathbf{L}]$ для любой пары операторов. Вооружившись этим обозначением для коммутаторов, мы можем теперь записать уравнение (4.16) в простой форме:

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{L} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{H}, \mathbf{L}] \rangle, \quad (4.17)$$

или, что то же самое,

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{L} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{L}, \mathbf{H}] \rangle. \quad (4.18)$$

Это очень интересное и важное уравнение. Оно связывает производную по времени от среднего значения наблюдаемой \mathbf{L} со средним значением другой наблюдаемой, а именно $-\frac{i}{\hbar}[\mathbf{L}, \mathbf{H}]$.

Если мы предположим, что вероятности описываются красивыми, узкими колоколообразными кривыми, то уравнение (4.18) говорит нам, как пики этих кривых движутся со временем. Уравнения, подобные данному, — это самое близкое, что есть в квантовой механике к уравнениям классической физики. Иногда

мы даже опускаем угловые скобки в таких уравнениях и записываем их в сокращенной форме:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{L}, \mathbf{H}]. \quad (4.19)$$

Но имейте в виду, что квантовые уравнения этого типа должны помещаться в середину сэндвича с бра $\langle \Psi |$, с одной стороны, и кетом $|\Psi \rangle$ — с другой. В то же время о них можно думать как об уравнениях, которые описывают движение центров распределений вероятности.

УПРАЖНЕНИЕ 4.2

Докажите, что если M и L оба являются эрмитовыми, то $i[M, L]$ тоже эрмитов. Обратите внимание на важность i . Коммутатор сам по себе не является эрмитовым.

Не кажется ли вам, что уравнение (4.19) имеет знакомый вид? Если нет, вернитесь к лекциям 9 и 10 в *томе I*, где мы изучали формулировку классической механики с использованием скобки Пуассона. На с. 221 мы находим следующее уравнение¹:

$$\dot{F} = \{F, H\}. \quad (4.20)$$

¹ Том I, лекция 9, формула (10). Еще одно из этих элегантных французских изобретений.

Здесь $\{F, H\}$ является не коммутатором, а скобкой Пуассона. Но все равно формула (4.20) подозрительно похожа на (4.19). На самом деле существует отчетливый параллелизм между коммутаторами и скобками Пуассона и их алгебраические свойства очень похожи. Например, если F и G представляют собой операторы, то и коммутаторы, и скобки Пуассона меняют знак, когда F и G обмениваются местами. Дирак, открывший это, понял, что здесь просматривается важная структурная связь между математикой классической механики и той, что используется в квантовой механике. Формальное отождествление между коммутаторами и скобками Пуассона строится так:

$$[\mathbf{F}, \mathbf{G}] \Leftrightarrow i\hbar \{F, G\}. \quad (4.21)$$

Для подчеркивания сходства с уравнением (4.19) можно подставить обозначения \mathbf{L} и \mathbf{H} , которые использовались в этом разделе:

$$[\mathbf{L}, \mathbf{H}] \Leftrightarrow i\hbar \{L, H\}. \quad (4.22)$$

Попробуем сделать это отождествление насколько возможно ясным. Если начать с (4.19)

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{L}, \mathbf{H}],$$

а затем использовать отождествление, заданное формулой (4.22), для записи классического аналога, то получится

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} (i\hbar \{\mathbf{L}, \mathbf{H}\})$$

или

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \{\mathbf{L}, \mathbf{H}\},$$

что в точности повторяет структуру уравнения (4.20).

УПРАЖНЕНИЕ 4.3

Вернемся к определению скобки Пуассона в *тome I* и проверим, что тождественное, заданное уравнением (4.21), совместимо по размерности. Покажите, что без множителя \hbar это было бы не так.

Уравнение (4.21) разрешает загадку. В классической физике нет разницы между FG и GF . Другими словами, в классике коммутаторы между обычными наблюдаемыми равны нулю. Из (4.21) видно, что коммутаторы в квантовой механике отличны от нуля, но очень малы. Классический предел (в котором классическая механика является точной) — это также предел, в котором \hbar пренебрежимо мала. Таким образом, это предел, в котором коммутаторы очень малы по человеческим меркам.

4.10. Сохранение энергии

Как узнать, сохраняется ли нечто в квантовой механике? Что вообще мы имеем в виду, говоря, что на-

блюдаемая — назовем ее Q — сохраняется? В самом минимальном варианте это означает, что ее среднее значение $\langle Q \rangle$ не меняется со временем (если, конечно, система остается невозмущенной). Еще более строгое условие: $\langle Q^2 \rangle$ (или среднее значение любой степени Q) не меняется во времени.

Глядя на уравнение (4.19), мы видим, что условие, при котором $\langle Q \rangle$ не меняется, это

$$[Q, H] = 0.$$

Другими словами, если величина коммутирует с гамильтонианом, то ее среднее значение сохраняется. Это утверждение можно усилить. Пользуясь свойствами коммутаторов, легко показать, что если $[H, Q] = 0$, то $[Q^2, H] = 0$ и даже более того, $[Q^n, H] = 0$ при любом n . Оказывается, можно сделать и еще более сильное утверждение: если Q коммутирует с гамильтонианом, то средние значения *всех* функций от Q сохраняются. Вот что означает сохранение в квантовой механике.

Самая очевидная сохраняющаяся величина — это сам гамильтониан. Поскольку любой оператор коммутирует сам собой, можно записать

$$[H, H] = 0,$$

что в точности является условием сохранения H . Как и в классической механике, гамильтониан — это другое

слово для энергии системы, фактически это определение энергии. Как мы видим, в самом общем случае энергия в квантовой механике сохраняется.

4.11. Спин в магнитном поле

Попробуем применить гамильтоновы уравнения движения к одиночному спину. Прежде всего нам необходимо задать гамильтониан. Откуда его взять? В общем случае ответ такой же, как и в классической физике: получить из эксперимента, вывести из теории, которая нам нравится, или просто взять какой-нибудь вариант и посмотреть, что получится. Но в случае одиночного спина у нас не так много возможностей. Начнем с тождественного оператора I . Поскольку I коммутирует со всеми операторами, если бы он был гамильтонианом, то никаких изменений во времени не происходило бы. Напоминаю, что зависимость наблюдаемой от времени определяется коммутатором этой наблюдаемой с гамильтонианом.

Единственный иной выбор — это сумма спиновых компонент. Фактически это именно то, что мы получаем из экспериментальных наблюдений за реальным спином — скажем, спином электрона — в магнитном поле. Магнитное поле \vec{B} — это 3-вектор — обычный вектор в пространстве, и он задается тремя декартовыми компонентами B_x , B_y и B_z . Когда классический спин (заряженный волчок) помещают в магнитное

поле, он приобретает энергию, которая зависит от его ориентации. Эта энергия пропорциональна скалярному произведению данного спина и магнитного поля. В квантовой версии это будет

$$H \sim \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z,$$

где символ \sim означает «пропорционально». Не забывайте, что в обсуждаемой квантовой версии σ_x , σ_y и σ_z представляют собой компоненты спинового оператора.

Рассмотрим простой пример, в котором магнитное поле направлено вдоль оси z . В этом случае гамильтониан пропорционален σ_z . Для удобства сведем все числовые постоянные, включая напряженность поля (но не \hbar), в одну константу ω и запишем

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \sigma_z. \quad (4.23)$$

Причина появления числа 2 в знаменателе вскоре прояснится.

Наша цель — найти, как среднее значение спина меняется со временем, другими словами, определить $\langle \sigma_x(t) \rangle$, $\langle \sigma_y(t) \rangle$ и $\langle \sigma_z(t) \rangle$. Для этого мы просто вернемся к уравнению (4.19) и подставим в него компоненты \mathbf{L} . Получится

$$\begin{aligned} \langle \dot{\sigma}_x \rangle &= -\frac{i}{\hbar} [\sigma_x, \mathbf{H}], \\ \langle \dot{\sigma}_y \rangle &= -\frac{i}{\hbar} [\sigma_y, \mathbf{H}], \\ \langle \dot{\sigma}_z \rangle &= -\frac{i}{\hbar} [\sigma_z, \mathbf{H}]. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Подставляя $\mathbf{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z$ из (4.23), получаем

$$\begin{aligned}\langle \dot{\sigma}_x \rangle &= -\frac{i\omega}{2} \langle [\sigma_x, \sigma_z] \rangle, \\ \langle \dot{\sigma}_y \rangle &= -\frac{i\omega}{2} \langle [\sigma_y, \sigma_z] \rangle, \\ \langle \dot{\sigma}_z \rangle &= -\frac{i\omega}{2} \langle [\sigma_z, \sigma_z] \rangle.\end{aligned}\tag{4.25}$$

То, что вычисляется в левой части этих уравнений, как предполагается, должно быть вещественными величинами. Может показаться, что множитель i в этих уравнениях создает трудности. К счастью, ситуацию спасают коммутационные отношения между σ_x , σ_y и σ_z . Подставив матрицы Паули из уравнения (3.20), легко убедиться в том, что

$$\begin{aligned}[\sigma_x, \sigma_y] &= 2i\sigma_z, \\ [\sigma_y, \sigma_z] &= 2i\sigma_x, \\ [\sigma_z, \sigma_x] &= 2i\sigma_y.\end{aligned}\tag{4.26}$$

Каждое из этих уравнений также содержит множитель i , который сокращается с i в уравнениях (4.25). Обратите внимание, что множитель 2 тоже сокращается, в результате чего мы получаем очень простые уравнения:

$$\begin{aligned}\langle \dot{\sigma}_x \rangle &= -\omega \langle \sigma_y \rangle, \\ \langle \dot{\sigma}_y \rangle &= \omega \langle \sigma_x \rangle, \\ \langle \dot{\sigma}_z \rangle &= 0.\end{aligned}\tag{4.27}$$

Это вам ничего не напоминает? Если нет, вернитесь к лекции 10 в *тome I*. Там мы изучали классический

волчок в магнитном поле. Уравнения были точно такими же за исключением того, что вместо средних значений мы работали с реальными движениями детерминированной системы. Но и там, и здесь решение — 3-векторный оператор $\vec{\sigma}$ или 3-вектор \vec{L} в *тотоме I* — прецессирует, подобно гироскопу, вокруг направления магнитного поля. Прецессия происходит равномерно с угловой скоростью ω .

Это сходство с классической механикой очень приятно, но важно также обратить внимание на разницу. *Что* в точности прецессирует? В классической механике — это x - и y -компоненты углового момента. В квантовой механике — это средние значения. Среднее значение для измерения σ_z остается постоянным во времени, но два других средних значения меняются. Несмотря на это, результат каждого отдельного измерения любой компоненты спина по-прежнему будет либо $+1$, либо -1 .

УПРАЖНЕНИЕ 4.4

Проверьте коммутационные отношения в уравнениях (4.26).

4.12. Решая уравнения Шрёдингера

Каноническое уравнение Шрёдингера, которое пишут на футболках, имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x).$$

Не будем пока разбираться со смыслом всех входящих в него обозначений, обратим лишь внимание на то, что это уравнение, говорящее, как нечто меняется во времени. (Это «нечто» является представлением вектора состояния частицы.)

Каноническое уравнение Шрёдингера — это частный случай более общего уравнения, с которым мы уже встречались в формуле (4.9). Это отчасти определение, а отчасти принцип квантовой механики. В качестве принципа оно утверждает, что вектор состояния меняется во времени непрерывно и унитарным образом. В качестве определения оно задает гамильтониан и, таким образом, наблюдаемую, называемую энергией.

Уравнение (4.10)

$$\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = -i\mathbf{H}|\Psi\rangle$$

иногда называют *зависящим от времени* уравнением Шрёдингера. Поскольку оператор гамильтониана \mathbf{H} представляет собой энергию, наблюдаемые значения энергии — это просто собственные значения \mathbf{H} . Обозначим эти собственные значения E_j , а соответствующие собственные векторы $|E_j\rangle$. По определению \mathbf{H} , E_j и $|E_j\rangle$ связаны уравнением для собственных значений

$$\mathbf{H}|E_j\rangle = E_j|E_j\rangle. \quad (4.28)$$

Это *независящее от времени уравнение Шрёдингера*¹ и его используют двумя различными способами.

Если мы работаем в конкретном матричном базисе, то данное уравнение определяет собственные векторы **H**. Можно задать конкретное значение энергии E_j и отыскать кет-вектор $|E_j\rangle$, который служит решением уравнения.

Это также уравнение, которое определяет собственные значения E_j . Если задать произвольное значение E_j , то в общем случае не будет подходящего в качестве решения собственного вектора. Рассмотрим очень простой пример: допустим, что гамильтониан — это матрица $\frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z$. Поскольку σ_z обладает только двумя собственными значениями, а именно ± 1 , гамильтониан также имеет лишь два собственных значения $\pm \frac{\hbar\omega}{2}$. Если подставить в правую часть уравнения (4.28) любое другое значение, то никакого решения не будет. Поскольку оператор **H** представляет энергию, E_j часто называют *энергетическими собственными числами*, а $|E_j\rangle$ *энергетическими собственными векторами* системы.

УПРАЖНЕНИЕ 4.5

Возьмите любой единичный 3-вектор \vec{n} , постройте оператор

¹ Для независящих от времени гамильтонианов его еще называют *стационарным уравнением Шрёдингера*. — Примеч. науч. ред.

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma \cdot \vec{n}.$$

Найдите энергетические собственные числа и собственные векторы, решив независящее от времени уравнение Шрёдингера. Напоминаю, что уравнение (3.23) дает нам $\sigma \cdot \vec{n}$ в компонентной форме.

Допустим, что мы нашли все энергетические собственные числа E_j и соответствующие собственные векторы $|E_j\rangle$. Теперь можно задействовать эту информацию для решения зависящего от времени уравнения Шрёдингера. Идея состоит в использовании того факта, что собственные векторы образуют ортонормированный базис, и в разложении вектора состояния по этому базису. Обозначим вектор состояния $|\Psi\rangle$ и запишем

$$|\Psi\rangle = \sum_j \alpha_j |E_j\rangle.$$

Поскольку вектор состояния $|\Psi\rangle$ меняется во времени, а базисные векторы $|E_j\rangle$ — не меняются, получается, что коэффициенты α_j должны зависеть от времени:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(t) |E_j\rangle. \quad (4.29)$$

Теперь подставим (4.29) в зависящее от времени уравнение. Результат:

$$\sum_j \dot{\alpha}_j(t) |E_j\rangle = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{H} \sum_j \alpha_j(t) |E_j\rangle.$$

Далее используем тот факт, что $\mathbf{H}|E_j\rangle = E_j|E_j\rangle$, и получим

$$\sum_j \dot{\alpha}_j(t) |E_j\rangle = -\frac{i}{\hbar} \sum_j E_j \alpha_j(t) |E_j\rangle$$

или, после перегруппировки,

$$\sum_j \left\{ \dot{\alpha}_j(t) + \frac{i}{\hbar} E_j \alpha_j(t) \right\} |E_j\rangle = 0.$$

Финальный шаг должен быть очевиден. Если сумма по базисным векторам равна нулю, то все коэффициенты должны быть нулевыми. Таким образом, для каждого собственного значения E_j функция $\alpha_j(t)$ должна удовлетворять следующему простому дифференциальному уравнению:

$$\frac{d\alpha_j(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E_j \alpha_j(t).$$

Это, конечно, знакомое дифференциальное уравнение для экспоненциальной функции времени, в данном случае с мнимым показателем. Его решение

$$\alpha_j(t) = \alpha_j(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t}. \quad (4.30)$$

Данное уравнение говорит нам, как α_j меняется во времени. Оно очень общее и не ограничено случаем спинов, поскольку гамильтониан не зависит явным образом от времени. Это наш первый пример глубокой связи между энергией и частотой, которая будет появляться снова и снова по мере изучения квантовой механики и квантовой теории поля. Мы будем часто к этому возвращаться.

В уравнении (4.30) множители $\alpha_j(0)$ — это значения коэффициентов в момент времени ноль. Если известен

вектор состояния $|\Psi\rangle$ в момент ноль, то данные коэффициенты определяются проекциями $|\Psi\rangle$ на базисные собственные векторы. Это можно записать так:

$$\alpha_j(0) = \langle E_j | \Psi(0) \rangle. \quad (4.31)$$

Теперь сведем все воедино и запишем полное решение зависящего от времени уравнения Шрёдингера:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} |E_j\rangle.$$

После подстановки выражения для $\alpha_j(0)$ из формулы (4.31) уравнение приобретает вид

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j E_j |\Psi(0)\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} |E_j\rangle. \quad (4.32)$$

Уравнение (4.32) можно записать в более элегантной форме

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j |E_j\rangle \langle E_j | \Psi(0) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t}, \quad (4.33)$$

которая подчеркивает суммирование по базисным векторам. Вы можете удивиться, откуда возникает «знание» $|\Psi(0)\rangle$. Ответ зависит от обстоятельств, но обычно мы предполагаем, что можем использовать некий специальный прибор для приготовления системы в известном состоянии.

Прежде чем обсуждать глубокий смысл этих уравнений, я хочу переформулировать их в виде рецепта. Я буду предполагать, что вы уже знаете достаточно о системе и ее пространстве состояний, чтобы приступить к делу.

4.13. Рецепт кета Шрёдингера

1. Определите, подсмотрите, догадайтесь, выведите или украдите оператор гамильтониана **H**.
2. Приготовьте начальное состояние $|\Psi(0)\rangle$.
3. Найдите собственные значения и векторы **H**, решив независящее от времени (стационарное) уравнение Шрёдингера

$$\mathbf{H}|E_j\rangle = E_j|E_j\rangle.$$

4. Используйте начальный вектор состояния $|\Psi(0)\rangle$, а также собственные векторы $|E_j\rangle$ из п. 3, для вычисления начальных коэффициентов $\alpha_j(0)$:

$$\alpha_j(0) = \langle E_j | \Psi(0) \rangle.$$

5. Выразите $|\Psi(0)\rangle$ через собственные векторы $|E_j\rangle$ и начальные коэффициенты $\alpha_j(0)$:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_j \alpha_j(0) |E_j\rangle.$$

К этому моменту мы разложили начальный вектор состояния $|\Psi(0)\rangle$ по $|E_j\rangle$ — базисным векторам гамильтониана **H**. Почему этот базис лучше любого другого? Потому что **H** говорит нам, как вещи меняются во времени. Теперь мы используем это знание.

6. В приведенном выше уравнении замените каждое вхождение $\alpha_j(0)$ на $\alpha_j(t)$, чтобы выразить зависимость от времени. В результате $|\Psi(0)\rangle$ превращается в $|\Psi(t)\rangle$:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(t) |E_j\rangle.$$

7. Пользуясь уравнением (4.30), замените каждое вхождение $\alpha_j(t)$ на $\alpha_j(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}$:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t} |E_j\rangle. \quad (4.34)$$

8. Приправьте по вкусу.

Теперь мы можем предсказывать вероятности для каждого возможного исхода эксперимента как функцию времени, и мы не ограничены измерениями энергии. Пусть \mathbf{L} имеет собственные значения λ_i и собственные векторы $|\lambda_i\rangle$. Вероятность для исхода λ равна

$$P\lambda(t) = |\langle \lambda | \Psi(t) \rangle|^2.$$

УПРАЖНЕНИЕ 4.6

Примените рецепт кета Шрёдингера к одиночному спину. Гамильтониан имеет вид $\mathbf{H} = \frac{\omega\hbar}{2} \sigma_z$, а конечная наблюдаемая — σ_x . Заданное начальное состояние — $|u\rangle$ (состояние, в котором $\sigma_z = +1$).

Спустя время t после эксперимента выполняется измерение σ_y . Каковы возможные исходы и вероятности этих исходов?

Поздравляем! Вы только что решили настоящую квантовомеханическую задачу для эксперимента, который реально может быть выполнен в лаборатории. Можете взять с полки пирожок.

4.14. Коллапс

Мы увидели, как эволюционирует вектор состояния между моментом, когда система подготовлена в заданном состоянии, и моментом, когда она приходит в контакт с измерительным прибором. Если бы вектор состояния был в центре внимания наблюдательной физики, мы сказали бы, что квантовая механика детерминистична. Но экспериментальная физика не имеет дела с измерением векторов состояния. Она имеет дело с измерением наблюдаемых. Даже если точно известен вектор состояния, нельзя знать результат любого заданного измерения. Тем не менее будет корректно утверждать, что между наблюдениями состояние системы изменяется строго определенным образом согласно зависящему от времени уравнению Шрёдингера.

Но когда выполняется измерение, происходит нечто иное. Эксперимент по измерению L будет иметь непред-

сказуемый исход, но после того как измерение выполнено, система останется в собственном состоянии \mathbf{L} . В каком из собственных состояний? В том, которое соответствует исходу измерения. Но этот исход непредсказуем. Отсюда следует, что во время эксперимента состояние системы непредсказуемо изменяется, переходя к одному из собственных состояний наблюдаемой, которую подвергают измерению. Это явление называется *коллапсом волновой функции*¹.

Это можно выразить иначе. Пусть вектор состояния перед самым измерением \mathbf{L} равен

$$\sum_j \alpha_j |\lambda_j\rangle.$$

Случайно, с вероятностью $|\alpha_j|^2$, прибор измеряет значение λ_j и оставляет систему в одном собственном состоянии \mathbf{L} , а именно в $|\lambda_j\rangle$. Вся суперпозиция состояний коллапсирует до единственного члена.

Этот странный факт (то, что система одним способом эволюционирует между измерениями и другим способом — во время измерения) десятилетиями был источником разногласий и недоразумений. Возникает вопрос: не должен ли сам акт измерения описываться законами квантовой механики?

Ответ на этот вопрос утвердительный. Законы квантовой механики не нарушаются во время измерения. Однако для анализа самого процесса измерения как

¹ Мы еще не объяснили, что такое волновая функция, но вскоре (в разделе 5.1.2) мы это сделаем.

Квантовая механика

квантовомеханической эволюции мы должны рассматривать экспериментальную установку, включая прибор, как часть единой квантовой системы. Мы обсудим этот вопрос — как системы объединяются в составные системы — в лекции 6. Но сначала несколько слов о неопределенности.

Лекция 5. Неопределенность и зависимость от времени

Ленни: Добрый вечер, Генерал. Рад видеть вас снова.

Генерал: Ленни? Это ты? Целая вечность прошла. Ну, во всяком случае, это было очень давно. Кто твой приятель?

Ленни: Его зовут Арт. Арт, знакомься, это Генерал Неопределенность.

5.1. Математическая интерлюдия: полный набор коммутирующих переменных

5.1.1. Состояния, которые зависят более чем от одного измерения

Физика одиночного спина чрезвычайно проста, и это делает ее очень привлекательным иллюстративным

примером. Но это также означает, что она многого не может проиллюстрировать. Одно из свойств одиночного спина состоит в том, что его состояние можно полностью задать собственным значением одного-единственного оператора, скажем σ_z . Если значение σ_z известно, то нельзя задать значения никаких других наблюдаемых, вроде σ_x . Как мы видели, измерение любой из этих величин уничтожает всякую информацию, которая могла у нас быть о других.

Но в более сложных системах может быть много совместно измеримых наблюдаемых; то есть их значения можно знать одновременно. Вот пара примеров.

- Частица, движущаяся в трехмерном пространстве. Базис состояний для такой системы задается положением частицы, но для этого требуется три пространственные координаты. Так что ее состояние задается тремя числами: $|x, y, z\rangle$. В дальнейшем мы увидим, что все три пространственных координаты частицы могут быть заданы одновременно.
- Система, состоящая из двух независимых спинов; другими словами, система из двух кубитов. Далее мы увидим, как объединять системы для получения более крупных систем. Но сейчас достаточно лишь сказать, что двухспиновая система может быть описана двумя наблюдаемыми. А именно: есть состояние, когда оба спина находятся в состоянии «вверх», когда они оба находятся в состоянии «вниз», когда первый спин находится в состоянии «вверх», а вто-

рой — «вниз», и наоборот. Короче, охарактеризовать двухспиновую систему можно двумя переменными: z -компонентой первого спина и z -компонентой второго спина. Квантовая механика не запрещает одновременно знать обе эти наблюдаемые. Фактически можно выбрать любую компоненту одного спина и любую компоненту другого. Квантовая механика позволяет одновременно знать обе.

В этих ситуациях нам необходимо полностью охарактеризовать состояние системы. Например, в нашей двухспиновой системе каждый спин мы измеряем отдельно и связываем эти измерения с двумя разными операторами. Мы обозначим эти операторы L и M .

Измерение оставляет систему в собственном состоянии (из единственного собственного вектора), соответствующем значению (собственному числу), которое было измерено. Если измеряются оба спина двухспиновой системы, то система перескакивает в состояние, которое является одновременно собственным вектором L и собственным вектором M . Это называется *общим собственным вектором* операторов L и M .

Этот двухспиновый пример дает нам кое-какую конкретную пищу для размышления, но имейте в виду, что наши результаты будут носить гораздо более общий характер: они будут применимы к любой системе, которая характеризуется двумя различными операторами. И, как легко догадаться, в числе два нет ничего магического. Представленные здесь идеи обобщаются на более

крупные системы, для описания которых требуется большое число операторов.

Чтобы работать с двумя различными совместимыми операторами, нам потребуются два набора обозначений для их базисных векторов. Мы будем обозначать их как λ_i и μ_a . Обозначения λ_i и μ_a — это собственные числа **L** и **M**. Индексы i и a пробегают все возможные исходы измерения **L** и **M**. Мы предполагаем, что существует базис из векторов состояний $|\lambda_i, \mu_a\rangle$, которые являются общими собственными векторами обеих наблюдаемых. Другими словами,

$$\begin{aligned} \mathbf{L}|\lambda_i, \mu_a\rangle &= \lambda_i|\lambda_i, \mu_a\rangle, \\ \mathbf{M}|\lambda_i, \mu_a\rangle &= \mu_a|\lambda_i, \mu_a\rangle. \end{aligned}$$

Чтобы сделать эти уравнения немного более удобными для восприятия, пусть и ценой некоторого снижения строгости, я буду иногда опускать индексы:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}|\lambda, \mu\rangle &= \lambda|\lambda, \mu\rangle, \\ \mathbf{M}|\lambda, \mu\rangle &= \mu|\lambda, \mu\rangle. \end{aligned}$$

Для того чтобы имелся базис из общих собственных векторов, операторы **L** и **M** должны коммутировать. В этом легко убедиться. Мы начнем с применения произведения **LM** к любому из базисных векторов, а затем используем тот факт, что базисные векторы являются собственными векторами обоих операторов:

$$\mathbf{LM}|\lambda, \mu\rangle = \mathbf{L}\mathbf{M}|\lambda, \mu\rangle,$$

или

$$\mathbf{LM}|\lambda, \mu\rangle = \lambda\mu|\lambda, \mu\rangle.$$

Собственные значения λ, μ — это, конечно, лишь числа, и не важно, на какое из них умножать первым. Так что если поменять порядок этих операторов и подействовать на тот же базисный вектор оператором \mathbf{ML} , получится тот же самый результат:

$$\mathbf{LM}|\lambda, \mu\rangle = \mathbf{ML}|\lambda, \mu\rangle,$$

или, более кратко,

$$[\mathbf{L}, \mathbf{M}]|\lambda, \mu\rangle = 0, \tag{5.1}$$

где правая часть представлена нулевым вектором. Этот результат не был бы так полезен, если бы он относился только к одному из базисных векторов. Но рассуждения, которые привели к уравнению (5.1), верны для любого из базисных векторов. Этого достаточно для доказательства того, что $[\mathbf{L}, \mathbf{M}] = 0$. Если оператор *аннулирует* любой элемент базиса, он должен также аннулировать все векторы в векторном пространстве¹. А оператор, который аннулирует все векторы, — это и есть то, что называется *нулевым оператором*. Итак, мы доказали, что если существует полный базис общих собственных векторов двух наблюдаемых, то эти две наблюдаемые коммутируют. Оказывается, верна и обратная теорема: если две наблюдаемые коммутируют, то существует полный базис общих собственных векторов

¹ Вам понятно почему?

для этих двух переменных. Проще говоря, в качестве условия совместной измеримости двух наблюдаемых они должны коммутировать.

Как уже упоминалось ранее, данная теорема является более общей. Может потребоваться больше наблюдаемых, чтобы полностью пометить базис. Независимо от числа необходимых наблюдаемых, все они должны коммутировать между собой. Мы называем эту совокупность *полным набором коммутирующих наблюдаемых*.

5.1.2. Волновая функция

Теперь мы введем понятие *волновой функции*. Пока не будем обращать внимания на ее название; в общем случае квантовая волновая функция не имеет ничего общего с волнами. В дальнейшем, когда мы будем изучать квантовую механику частиц (лекции 8–10), мы обнаружим некую связь между волновой функцией и волнами.

Допустим, у нас есть базис состояний для некоторой квантовой системы. Назовем векторы ортонормированного базиса $|a, b, c, \dots\rangle$, где a, b, c, \dots — собственные значения полного набора коммутирующих наблюдаемых **A**, **B**, **C**, \dots . Теперь рассмотрим произвольный вектор состояния $|\Psi\rangle$. Поскольку векторы $|a, b, c, \dots\rangle$ являются ортонормированным базисом, $|\Psi\rangle$ можно разложить по ним:

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b,c,\dots} \psi(a,b,c,\dots) |a,b,c,\dots\rangle.$$

Величины $\Psi(a, b, c, \dots)$ представляют собой коэффициенты в этом разложении. Каждый из них также равен внутреннему произведению $|\Psi\rangle$ на один из базисных векторов:

$$\Psi(a, b, c, \dots) = \langle a, b, c, \dots | \Psi \rangle. \quad (5.2)$$

Набор коэффициентов $\Psi(a, b, c, \dots)$ называется волновой функцией системы в базисе, заданном наблюдаемыми **A**, **B**, **C**, Это математическое определение волновой функции, даваемое формулой (5.2), выглядит формальным и абстрактным, но физический смысл волновой функции очень глубок. Согласно фундаментальному вероятностному принципу квантовой механики, квадрат абсолютной величины волновой функции — это вероятность того, что наблюдаемые примут значения a, b, c, \dots :

$$P(a, b, c, \dots) = \Psi^*(a, b, c, \dots) \Psi(a, b, c, \dots).$$

Форма волновой функции зависит от того, какие именно наблюдаемые мы выделили. Это связано с тем, что вычисления для двух различных наблюдаемыхлагаются на различные наборы базисных векторов. Например, в случае одиночного спина внутренние произведения

$$\Psi(u) = \langle u | \Psi \rangle$$

и

$$\Psi(d) = \langle d | \Psi \rangle$$

определяют волновую функцию в базисе σ_z , тогда как

$$\Psi(r) = \langle r | \Psi \rangle$$

и

$$\Psi(l) = \langle l | \Psi \rangle$$

определяют волновую функцию в базисе σ_x .

Важная особенность волновой функции вытекает из того факта, что полная сумма по всем вероятностям дает единицу:

$$\sum_{a,b,c,\dots} \psi^*(a,b,c,\dots) \psi(a,b,c,\dots) = 1.$$

5.1.3. Замечание о терминологии

Термин *волновая функция*, используемый в этой книге, означает набор коэффициентов (также называемых компонентами), на которые умножаются базисные векторы в разложении по собственным функциям. Например, если мы раскладываем вектор состояния $|\Psi\rangle$ следующим образом

$$|\Psi\rangle = \sum_j \alpha_j |\psi_j\rangle,$$

где $|\psi_j\rangle$ — ортонормированные собственные векторы эрмитова оператора, то набор коэффициентов α_j , которые чуть выше мы обозначали как $\Psi(a, b, c, \dots)$, — это и есть то, что мы понимаем под волновой функцией. В ситуациях, когда вектор состояния представляется

интегралом, а не суммой, волновая функция становится непрерывной, а не дискретной.

До сих пор мы старательно отличали волновую функцию от векторов состояния $|\Psi\rangle$, и это общепринятое соглашение. Однако некоторые авторы рассматривают волновые функции, как если бы они были векторами состояний. Это перестанет сбивать с толку, если понять, что волновая функция действительно может представлять вектор состояния. Разумно рассматривать коэффициенты α_j как координаты вектора состояния в конкретном базисе собственных векторов. Это подобно утверждению о том, что декартовы координаты задают конкретную точку трехмерного пространства в заданной системе координат. Во избежание путаницы просто следите за тем, какое используется соглашение. В этой книге мы обычно будем использовать прописные буквы, такие как Ψ , для обозначения векторов состояния, а строчные буквы, такие как ψ , — для волновых функций.

5.2. Измерение

Вернемся к понятию измерения. Допустим, мы измеряем две наблюдаемые L и M в одном эксперименте, и система оставлена в состоянии, которое является общим собственным вектором этих двух наблюдаемых. Как мы узнали в разделе 5.1.1, это значит, что L и M должны коммутировать.

Но что, если они не коммутируют? Тогда, в общем случае, невозможно получить надежное знание о них вместе. Далее мы выразим это количественно в форме принципа неопределенности (частным случаем которого является принцип Гейзенберга).

Вернемся к нашей тестовой задаче про одиночный спин. Любое наблюдение спина представляется эрмитовой матрицей 2×2 , а любая такая матрица имеет вид

$$\begin{pmatrix} r & w \\ w^* & r' \end{pmatrix},$$

где диагональные элементы являются вещественными, а два других — комплексно сопряженными. Как следствие, существуют только четыре вещественных параметра, характеризующих это наблюдение. В действительности есть изящный способ записать любую спиновую наблюдаемую через матрицы Паули σ_x , σ_y и σ_z и еще одну матрицу — единичную матрицу I . Как вы помните,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Любая эрмитова матрица L размером 2×2 может быть записана как сумма четырех членов

$$L = a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z + dI,$$

где a, b, c и d — вещественные числа.

УПРАЖНЕНИЕ 5.1

Проверьте это утверждение.

Единичный оператор I формально считается наблюдаемой, поскольку он является эрмитовым, но это очень скучная штука. Есть лишь одно возможное значение, которое может иметь эта тривиальная наблюдаемая, а именно 1, и любой вектор состояния является ее собственным вектором. Если игнорировать I , то наиболее общего вида наблюдаемой является суперпозиция трех спиновых компонент σ_x, σ_y и σ_z . Можно ли одновременно измерить любую пару спиновых компонент? Только если они коммутируют. Вычислить коммутатор для спиновых компонент не представляет труда. Просто воспользуйтесь приведенным матричным представлением, перемножьте матрицы в том и другом порядке и возьмите разность полученных результатов.

Коммутационные соотношения, перечисленные в уравнении (4.26),

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= 2i\sigma_z, \\ [\sigma_y, \sigma_z] &= 2i\sigma_x, \\ [\sigma_z, \sigma_x] &= 2i\sigma_y, \end{aligned}$$

прямо говорят нам, что никакие две спиновые компоненты нельзя измерить одновременно, поскольку правые части уравнений ненулевые. Фактически нельзя одновременно измерить две компоненты спина вдоль любых двух осей.

5.3. Принцип неопределенности

Неопределенность — один из отличительных признаков квантовой механики, но далеко не всегда результат эксперимента является неопределенным. Если система находится в собственном состоянии наблюдаемой, нет никакой неопределенности относительно результата соответствующего наблюдения. Но в любом состоянии всегда есть неопределенность относительно некоторой наблюдаемой. Если состояние оказалось собственным вектором некоего эрмитова оператора, обозначим его **A**, то оно не будет собственным вектором другого оператора, который не коммутирует с **A**. Отсюда правило: если **A** и **B** не коммутируют, то должна быть неопределенность в одном из них, если не в обоих.

Традиционный пример такой взаимной неопределенности дает принцип неопределенности Гейзенберга, который в своей первоначальной форме относился к по-

ложению и импульсу частицы. Но идеи Гейзенберга могут быть расширены до гораздо более общего принципа, применимого к любым двум наблюдаемым, которые оказались некоммутиирующими. Например, к двум компонентам спина. Теперь у нас есть все ингредиенты, необходимые для вывода принципа неопределенности в общей форме.

5.4. Смысл неопределенности

Нам необходимо очень четко определить, что означает *неопределенность*, если мы хотим охарактеризовать ее количественно. Обозначим a собственное значение наблюдаемой \mathbf{A} . Тогда для данного состояния $|\Psi\rangle$ существует распределение вероятности $P(a)$ с привычными свойствами. Среднее значение \mathbf{A} является обычным средним:

$$\langle \Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle = \sum_a a P(a).$$

Грубо говоря, это означает, что распределение $P(a)$ центрировано на среднем значении. То, что имеется в виду под «*неопределенностью* \mathbf{A} », — это так называемое *стандартное отклонение*. Чтобы вычислить стандартное отклонение, сначала вычтем из \mathbf{A} его среднее значение. Определим оператор $\bar{\mathbf{A}}$ следующим образом:

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle.$$

Смысл такого определения $\bar{\mathbf{A}}$ путем вычитания среднего значения из оператора не вполне ясен. Присмотримся внимательнее. Само среднее значение является вещественным числом. Любое вещественное число также является оператором, а именно оператором, пропорциональным тождественному, или единичному оператору I . Для полной ясности можно записать $\bar{\mathbf{A}}$ в более полной форме:

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle I.$$

Распределение вероятности для $\bar{\mathbf{A}}$ точно такое же, как и для \mathbf{A} , за исключением такого смещения, что среднее для $\bar{\mathbf{A}}$ равно нулю. Собственные векторы $\bar{\mathbf{A}}$ такие же, как и у \mathbf{A} , а собственные значения просто сдвинуты так, что их среднее тоже равно нулю. Иными словами, собственные значения $\bar{\mathbf{A}}$ это

$$\bar{a} = a - \langle \mathbf{A} \rangle.$$

Квадрат неопределенности (или стандартное отклонение) \mathbf{A} , обозначаемый $(\Delta \mathbf{A})^2$, определяется как

$$(\Delta \mathbf{A})^2 = \sum_a \bar{a}^2 P(a) \quad (5.3)$$

или

$$(\Delta \mathbf{A})^2 = \sum_a (a - \langle \mathbf{A} \rangle)^2 P(a). \quad (5.4)$$

Это можно записать в виде

$$(\Delta \mathbf{A})^2 = \langle \Psi | \bar{\mathbf{A}}^2 | \Psi \rangle.$$

Если среднее значение \mathbf{A} равно нулю, то выражение для неопределенности $\Delta \mathbf{A}$ упрощается:

$$(\Delta \mathbf{A})^2 = \langle \Psi | \mathbf{A}^2 | \Psi \rangle.$$

Другими словами, квадрат неопределенности — это среднее значение оператора \mathbf{A}^2 .

5.5. Неравенство Коши — Шварца

Принцип неопределенности — это неравенство, которое говорит, что произведение неопределенностей \mathbf{A} и \mathbf{B} больше некой величины, связанной с их коммутатором. Из элементарной математики нам знакомо неравенство треугольника. Оно утверждает, что в любом векторном пространстве абсолютная величина одной стороны треугольника не превосходит суммы абсолютных величин двух других сторон. Для вещественных векторных пространств мы выводим

$$|X| |Y| \geq |X \cdot Y|, \quad (5.5)$$

из неравенства треугольника

$$|X| + |Y| \geq |X + Y|.$$

5.6. Неравенство треугольника и неравенство Коши — Шварца

Неравенство треугольника связано, конечно, со свойствами обычных треугольников, но в действитель-

ности оно носит гораздо более общий характер и применимо к намного более широкому классу векторных пространств. Суть идеи можно уловить, взглянув на рис. 5.1, где стороны треугольника представлены обычными геометрическими векторами на плоскости. Неравенство треугольника — это просто утверждение о том, что сумма любых двух сторон больше третьей стороны, а лежащая в основе этого идея состоит в том, что кратчайший путь между двумя точками — прямая линия. Кратчайший путь между точками 1 и 3 — это сторона Z , а сумма двух других сторон, очевидно, больше.

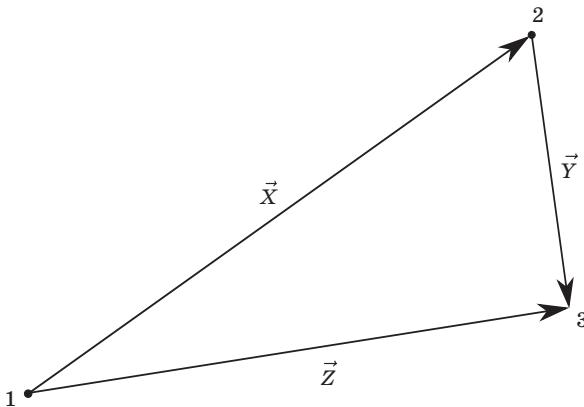


Рис. 5.1. Неравенство треугольника.

Сумма длин векторов \vec{X} и \vec{Y} больше или равна длине вектора \vec{Z} . (Кратчайший путь между двумя точками — прямая линия)

Неравенство треугольника может быть выражено в более общем виде. Начнем с исходного определения,

а затем «докрутим» его до той формы, которая нам требуется. Мы знаем, что

$$|X| + |Y| \geq |Z|.$$

Если рассматривать X и Y в качестве векторов, для которых определено сложение, то это можно записать в виде

$$|\vec{X}| + |\vec{Y}| \geq |\vec{X} + \vec{Y}|.$$

Возводя в квадрат это уравнение, получаем

$$|\vec{X}|^2 + |\vec{Y}|^2 + 2|\vec{X}||\vec{Y}| \geq |\vec{X} + \vec{Y}|^2.$$

Но правая часть может быть раскрыта как

$$|\vec{X} + \vec{Y}|^2 = |\vec{X}|^2 + |\vec{Y}|^2 + 2(\vec{X} \cdot \vec{Y}).$$

Почему? Потому что $|\vec{X} + \vec{Y}|^2$ — это просто $(\vec{X} + \vec{Y}) \cdot (\vec{X} + \vec{Y})$. Объединяя эти результаты, получаем

$$|\vec{X}|^2 + |\vec{Y}|^2 + 2|\vec{X}||\vec{Y}| \geq |\vec{X}|^2 + |\vec{Y}|^2 + 2(\vec{X} \cdot \vec{Y}).$$

Теперь, просто вычтя из обеих частей $|\vec{X}|^2 + |\vec{Y}|^2$ и разделив на 2, мы остаемся со следующим неравенством:

$$|\vec{X}||\vec{Y}| \geq \vec{X} \cdot \vec{Y}. \quad (5.6)$$

Это другая форма неравенства треугольника. Она утверждает, что для любых двух векторов \vec{X} и \vec{Y} произведение не меньше их скалярного произведения. Это неудивительно, скалярное произведение часто определяется как

$$\vec{X} \cdot \vec{Y} = |\vec{X}| |\vec{Y}| \cos \theta,$$

где θ — угол между двумя векторами. Но мы знаем, что косинус угла всегда лежит в диапазоне от -1 до $+1$, так что правая часть всегда должна быть меньше либо равна $|\vec{X}| |\vec{Y}|$. Данное соотношение истинно для вектора в двух измерениях, в трех измерениях и в произвольном числе измерений. Оно верно даже для векторов в комплексных векторных пространствах. Оно вообще истинно для векторов в *любом* векторном пространстве при условии, что длина вектора определяется как квадратный корень из внутреннего произведения вектора с самим собой. Двигаясь далее, мы планируем использовать неравенство (5.6), возводя его в квадрат:

$$|\vec{X}|^2 |\vec{Y}|^2 \geq (\vec{X} \cdot \vec{Y})^2$$

или

$$|\vec{X}|^2 |\vec{Y}|^2 \geq |\vec{X} \cdot \vec{Y}|^2. \quad (5.7)$$

В этой форме оно называется неравенством Коши — Шварца.

В комплексных векторных пространствах неравенство треугольника принимает немного более сложный вид. Пусть $|X\rangle$ и $|Y\rangle$ — два вектора в комплексном векторном пространстве. Абсолютные величины трех векторов $|X\rangle$, $|Y\rangle$ и $|X\rangle + |Y\rangle$ равны

$$\begin{aligned} |X| &= \sqrt{\langle X | X \rangle}, \\ |Y| &= \sqrt{\langle Y | Y \rangle}, \\ |X + Y| &= \sqrt{(\langle X | + \langle Y |)(\langle X \rangle + \langle Y \rangle)}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Теперь выполним те же самые шаги, что мы сделали в вещественном случае. Сначала запишем

$$|X| + |Y| \geq |X + Y|.$$

Далее возведем в квадрат и упростим:

$$2|X| |Y| \geq |\langle X | Y \rangle + \langle Y | X \rangle|. \quad (5.9)$$

Эта форма неравенства Коши — Шварца приведет нас к принципу неопределенности. Но какое оно имеет отношение к двум наблюдаемым **A** и **B**? Мы выясним это, хитро определив $|X\rangle$ и $|Y\rangle$.

5.7. Общий принцип неопределенности

Пусть $|\Psi\rangle$ — это любой кет, а **A** и **B** — любые две наблюдаемые. Теперь определим $|X\rangle$ и $|Y\rangle$ следующим образом:

$$\begin{aligned} |X\rangle &= \mathbf{A}|\Psi\rangle, \\ |Y\rangle &= i\mathbf{B}|\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Обратите внимание на i во втором определении. Теперь подставим (5.10) в (5.9) и получим

$$2\sqrt{\langle \mathbf{A}^2 \rangle \langle \mathbf{B}^2 \rangle} \geq |\langle \Psi | \mathbf{AB} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \mathbf{BA} | \Psi \rangle|. \quad (5.11)$$

Знак минус связан с множителем i во втором определении в формуле (5.10). Используя определение коммутатора, находим, что

$$2\sqrt{\langle \mathbf{A}^2 \rangle \langle \mathbf{B}^2 \rangle} \geq |\langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle|. \quad (5.12)$$

Допустим на мгновение, что \mathbf{A} и \mathbf{B} имеют средние значения равные нулю. В этом случае $\langle \mathbf{A}^2 \rangle$ — это просто квадрат неопределенности \mathbf{A} , то есть $(\Delta \mathbf{A}^2)$, а $\langle \mathbf{B}^2 \rangle$ — это просто $(\Delta \mathbf{B}^2)$. Тогда можно переписать уравнение (5.12) в виде

$$\Delta \mathbf{A} \Delta \mathbf{B} \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle|. \quad (5.13)$$

Задержитесь ненадолго на этом математическом неравенстве. В левой части мы видим произведение неопределенностей двух наблюдаемых \mathbf{A} и \mathbf{B} в состоянии Ψ . Неравенство говорит нам, что это произведение не может быть меньше правой части, которая включает коммутатор \mathbf{A} и \mathbf{B} . А именно оно утверждает, что произведение неопределенностей не может быть меньше, чем половина абсолютной величины среднего значения коммутатора.

Общий принцип неопределенности — это количественное выражение того, о чём мы уже догадывались: если коммутатор не равен нулю, то две наблюдаемые \mathbf{A} и \mathbf{B} не могут одновременно иметь определенные значения.

Но что, если средние значения \mathbf{A} и \mathbf{B} не равны нулю?
В этом случае используется прием, вводящий два новых оператора, для которых средние значения вычитаются:

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle,$$
$$\bar{\mathbf{B}} = \mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle.$$

Затем весь процесс повторяется с заменой \mathbf{A} и \mathbf{B} на $\bar{\mathbf{A}}$ и $\bar{\mathbf{B}}$. Следующее упражнение послужит вам руководством в этом деле.

УПРАЖНЕНИЕ 5.2

1) Покажите, что $\Delta \bar{\mathbf{A}}^2 = \langle \bar{\mathbf{A}}^2 \rangle$ и $\Delta \bar{\mathbf{B}}^2 = \langle \bar{\mathbf{B}}^2 \rangle$.

2) Покажите, что $[\bar{\mathbf{A}}, \bar{\mathbf{B}}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]$.

3) Используя эти соотношения, покажите что

$$\Delta \mathbf{A} \Delta \mathbf{B} \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle|.$$

Далее, в лекции 8, мы используем эту чрезвычайно общую версию принципа неопределенности для доказательства первоначальной формы принципа неопределенности Гейзенберга: *произведение неопределенностей положения и импульса частицы не может быть меньше половины постоянной Планка.*

Лекция 6. Объединение систем: запутанность

Арт: И все же тут милое и приятное заведение. Если не считать этого типа Минус Один, никто не скучает в одиночестве.

Ленни: Да, mestечко вполне тусовочное. И дело не только в тесноте. Следи за кошельком и не впутайся во что-нибудь слишком серьезное.

6.1. Математическая интерлюдия: тензорное произведение

6.1.1. Встреча с Алисой и Бобом

Понимание того, как более крупные системы образуются за счет объединения меньших, составляет значительную часть физики. Вряд ли мне нужно говорить о том, что атом — это совокупность нуклонов и электронов, каждый из которых сам по себе может рассматриваться как квантовая система.

Когда мы говорим о составных системах, легко сбиться на использование сухого формального языка и начать рассуждать о *системе A* и *системе B*. Большинство физиков предпочитает более легкий, неформальный язык, так что *Алиса* и *Боб* стали почти универсальными заменителями для *A* и *B*. Об Алисе и Бобе можно говорить как о хозяевах сложных систем и лабораторных установок самого разного рода. Их оборудование и опыт ограничены лишь нашим воображением, и они с радостью берутся за трудные дела и опасные задания вроде прыжков в черные дыры. Они настоящие научные супергерои!

Допустим, Алиса и Боб располагают двумя системами — Алисиной системой и системой Боба. Система Алисы, что бы она собой ни представляла, описывается пространством состояний, обозначаемым S_A , и аналогично система Боба описывается пространством состояний S_B .

Пусть теперь мы хотим объединить эти две системы в единую составную систему. Прежде чем двигаться дальше, давайте добавим немного конкретики в отношении систем, с которыми мы имеем дело. Например, Алисина система может быть квантовомеханической монетой с двумя основными состояниями — *H* и *T*¹. Конечно, классическая монета должна находиться либо

¹ От англ. *head* — аверс, решка и *tail* — реверс, орел. — *Примеч. пер.*

в одном состоянии, либо в другом, но квантовая монета может быть в суперпозиции:

$$\alpha_H|H\rangle + \alpha_T|T\rangle.$$

Как видите, я использую для Алисиных кет-векторов необычное обозначение. Это для того, чтобы отличать их кетов Боба. Новое обозначение должно предостеречь нас от сложения векторов Алисиного пространства S_A с векторами из пространства Боба S_B . Двумерное векторное пространство Алисы S_A задается двумя базисными векторами $|H\rangle$ и $|T\rangle$.

Система Боба тоже могла бы оказаться монетой, но вполне может быть и чем-то другим. Пусть это будет квантовая игральная кость. Пространство состояний Боба S_B будет тогда шестимерным с базисом

$$\begin{aligned} &|1\rangle, \\ &|2\rangle, \\ &|3\rangle, \\ &|4\rangle, \\ &|5\rangle, \\ &|6\rangle, \end{aligned}$$

означающим шесть граней кости. Так же как Алисина монета, кость Боба является квантовомеханической и ее шесть состояний могут аналогичным образом находиться в суперпозиции.

6.1.2. Представление составной системы

Теперь представим себе, что системы Боба и Алисы обе существуют и образуют единую составную систему. Первый вопрос: как сконструировать пространство состояний, назовем его S_{AB} , для составной системы? Ответ — построить тензорное произведение S_A и S_B . Эта операция обозначается так:

$$S_{AB} = S_A \otimes S_B.$$

Чтобы определить S_{AB} , достаточно задать его базисные векторы, и они именно такие, как можно ожидать. В верхней половине рис. 6.1 представлена таблица, столбцы которой соответствуют шести базисным векторам Боба, а строки — двум базисным векторам Алисы. Каждая клетка таблицы обозначает базисный вектор системы S_{AB} . Например, клетка, помеченная $H4$, представляет состояние S_{AB} , в котором на монете виден аверс, а на кости — число 4. Всего в объединенной системе имеется 12 базисных векторов.

Существуют разные способы символического представления этих состояний. Можно использовать для состояния $H4$ явные обозначения, например $|H\rangle \otimes |4\rangle$ или $|H|4\rangle$. Но обычно удобнее использовать составную нотацию: $|H4\rangle$. Она подчеркивает, что мы говорим об одном состоянии с меткой, состоящей из двух частей. Левая половина относится к Алисиной подсистеме, а правая половина — к подсистеме Боба. Явная нотация

и составная имеют один и тот же смысл — они ссылаются на одно и то же состояние.

Метки состояний составной системы S_{AB}

		Метки состояний Боба					
		1	2	3	4	5	6
Метки состояний Алисы	H	H1	H2	H3	H4	H5	H6
	T	T1	T2	T3	T4	T5	T6



Рис. 6.1. В таблице представлены базисные состояния составной системы S_{AB} . Сверху перечислены метки состояний кости Боба. Метки состояний Алисиной монеты приведены слева. Метки состояний составной системы находятся в клетках таблицы. Каждая составная метка состояния показывает состояние обеих подсистем. Например, метка состояния H4 обозначает состояние, в котором Алисина монета выпала решкой (H), а кость Боба — четверкой

Как только базисные векторы перечислены — в данном случае их оказалось двенадцать, — можно построить их линейную комбинацию для любой суперпозиции. Таким образом, пространство тензорного произведения в данном случае является двенадцатимерным.

Суперпозиция двух таких базисных векторов может выглядеть как-то так

$$\alpha_{h3}|H3\rangle + \alpha_{t4}|T4\rangle.$$

В каждом случае первая половина метки состояния обозначает состояние Алисиной монеты, а вторая половина описывает состояние кости Боба.

Иногда нам понадобится сослаться на произвольный базисный вектор в S_{AB} . Для этого мы будем использовать кет-векторы такого вида:

$$|ab\rangle$$

или такого:

$$|a'b'\rangle.$$

В этой нотации a или a' (или другой символ, находящийся в левой части обозначения) представляет Алисины состояния, а b или b' — состояния Боба.

У этой нотации есть одна хитрая особенность. Несмотря на то что метки состояний в S_{AB} имеют двойной индекс, кет-векторы вроде $|ab\rangle$ или $|H3\rangle$ представляют собой единое состояние составной системы. Другими словами, мы используем двойной индекс для обозначения единого состояния. К этому надо немного привыкнуть. Алисина часть метки состояния всегда слева, а часть Боба — всегда справа: соблюдение алфавитного порядка Алисы и Боба позволяет легко запомнить это соглашение.

Правила остаются неизменными и для систем более общего вида. Единственное отличие состоит в том, что на месте двух А-состояний и шести В-состояний оказываются N_A и N_B состояний соответственно, а тензорное произведение будет иметь размерность

$$N_{AB} = N_A N_B.$$

Системы с тремя и более компонентами можно представить тензорными произведениями трех и более пространств состояний, но нам здесь это не понадобится.

Теперь, когда у нас описаны отдельные пространства S_A и S_B для Алисы и Боба, а также составное пространство S_{AB} , остается договориться еще об одной детали в обозначениях. У Алисы есть набор операторов σ , действующих на ее систему. У Боба есть аналогичный набор для его системы, который мы будем обозначать τ , чтобы не путать с операторами Алисы. У Алисы может быть несколько операторов σ , так же как у Боба — несколько операторов τ . Имея на руках этот расклад, мы готовы глубже исследовать составную систему. В дальнейшем, в лекции 7, будет объяснено, как работать с тензорным произведением операторов в компонентной форме, то есть в представлении в виде матриц и векторов-столбцов.

К этому моменту у вас не должно оставаться сомнений в том, что квантовая физика отличается от классической в самых своих логических основаниях. В этой лекции, а также в следующей я намерен еще более укрепить вас в этой идее. Мы обсудим особенность

квантовой физики, которая настолько отличает ее от физики классической, что к моменту написания этих строк она озадачивала — и притягивала — физиков и философов уже почти 80 лет. Своего открывателя, Эйнштейна, эта особенность привела к заключению, что в квантовой механике не хватает чего-то очень важного, и с тех пор физики спорят об этом. Эйнштейн осознавал, что принимая квантовую механику, мы получаем взгляд на реальность, радикально отличающийся от классического.

6.2. Классическая корреляция

Прежде чем заняться квантовым запутыванием, давайте потратим несколько минут на то, что можно назвать классическим запутыванием. В следующем эксперименте Алисе (A) и Бобу (B) помогает Чарли (C).

У Чарли в руках две монеты — цент и десятицентовик. Он встряхивает их и оставляет по одной монете в каждой руке — для Алисы и Боба, которые затем им вручает. Никто не подсматривает и не знает, у кого какая монета. Затем Алиса садится в шаттл до альфы Центавра, а Боб остается в Пало-Альто. Чарли сделал свое дело и может уйти (сожалею, Чарли).

Перед тем как отправиться в долгое путешествие, Алиса синхронизирует часы с Бобом — они изучали теорию относительности и учитывают замедление времени и все такое. Они договариваются, что Алиса посмотрит

на свою монету за одну-две секунды до того, как Боб посмотрит на свою.

Все идет гладко, и когда Алиса прилетает на альфу Центавра, она действительно смотрит на свою монету. Замечательно, что в этот же момент она сразу узнаёт, какую монету увидит Боб, хотя он на свою еще не смотрел. Странно? Неужели Алисе и Бобу удалось нарушить самый главный закон теории относительности, утверждающий, что информация не может передаваться быстрее скорости света?

Нет, конечно. Нарушением теории относительности это было бы, если бы после Алисиного наблюдения *Боб немедленно узнал*, чего ему ожидать. Алиса может знать, какую монету увидит Боб, но она не может ему об этом сказать без отправки реального общения с альфы Центавра, на доставку которого свету понадобится не меньше четырех лет.

Проделаем этот эксперимент многократно, либо со многими парами Алиса — Боб, либо с одной и той же парой в разное время. Чтобы результат был количественным, Чарли (он вернулся, приняв наши извинения) надписывает « $\sigma = +1$ » на каждом центе и « $\sigma = -1$ » — на десятицентовиках. Если считать, что Чарли, встряхивая монеты, обеспечивает абсолютную случайность, то обнаружатся следующие факты.

- В среднем А и В получат одинаковое количество центов и десятицентовиков. Обозначив σ_A результат наблюдений А и σ_B — результат наблюдений В, этот факт можно выразить математически так:

$$\begin{aligned}\langle \sigma_A \rangle &= 0, \\ \langle \sigma_B \rangle &= 0.\end{aligned}\tag{6.1}$$

- Если А и В записывают свои наблюдения, а затем снова встречаются в Пало-Альто, чтобы сравнить их, то они обнаружат сильную корреляцию¹. При каждой попытке, если А обнаруживает $\sigma = +1$, то В наблюдает $\sigma = -1$, и наоборот. Другими словами, произведение $\sigma_A \sigma_B$ всегда равно -1 :

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle = -1.$$

Обратите внимание, что среднее значение произведения (σ_A и σ_B) не равно произведению средних — уравнения (6.1) говорят нам, что $\langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle$ равно нулю. То есть

$$\langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle \neq \langle \sigma_A \sigma_B \rangle$$

или

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle - \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle \neq 0.\tag{6.2}$$

Это говорит о том, что наблюдения Алисы и Боба *коррелированы*. В действительности величина

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle - \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle$$

называется статистической корреляцией между наблюдениями Боба и Алисы. Этот термин применяется и тогда, когда соответствующее значение равно нулю. Когда же статистическая корреляция отлична от нуля,

¹ На самом деле, в этом примере корреляция будет идеальной.

мы говорим, что наблюдения коррелированы. Источником этой корреляции служит тот факт, что первоначально Алиса и Боб находились в одном и том же месте, а у Чарли было по одной монете каждого типа. Корреляция сохраняется, когда Алиса отправляется на альфу Центавра, просто потому, что монеты не изменяются во время путешествия. В этом нет совершенно ничего странного, как и в неравенстве (6.2). Это очень распространенное свойство статистических распределений.

Пусть имеется распределение вероятности $P(a, b)$ для двух переменных a и b . Если эти переменные совершенно некоррелированы, то вероятность будет факторизоваться:

$$P(a, b) = P_A(a)P_B(b), \quad (6.3)$$

где $P_A(a)$ и $P_B(b)$ — вероятности для a и b по отдельности. (Я добавил индексы к обозначению функции в качестве напоминания о том, что они могут быть разными функциями своих аргументов.) Легко заметить, что если вероятность факторизуется подобным образом, то никакой корреляции нет; другими словами, среднее произведения равно произведению средних.

УПРАЖНЕНИЯ 6.1

Докажите, что если $P(a, b)$ факторизуется, корреляция между a и b равна нулю.

Позвольте мне привести пример, иллюстрирующий такую ситуацию, когда вероятности факторизуются. Допустим, что вместо одного Чарли у нас их двое — Чарли-А и Чарли-В, и они не взаимодействуют между собой. Чарли-В встряхивает свои две монеты и вручает одну из них Бобу, а другую выбрасывает.

Чарли-А делает в точности то же самое с тем лишь исключением, что дает свою монету Алисе. В результате вероятности факторизуются, и корреляции не возникает.

В классической физике мы пользуемся статистикой и теорией вероятности в тех случаях, когда не знаем чего-то, что, в принципе, можно узнать. Например, после встряхивания монет в первом эксперименте Чарли может сделать незаметное наблюдение (подсмотреть), а затем вручить монеты Алисе и Бобу. Это никак не повлияет на результаты. В классической механике распределение вероятности $P(a, b)$ отражает неполное описание состояния системы. Об этой системе еще есть что узнать, и это может быть узнано. Использование вероятности в классической физике всегда связано с неполнотой знания относительно всего того, что может быть известно.

Связанный с этим момент состоит в том, что полное знание о системе в классической физике подразумевает также полное знание обо всех ее частях. Не имеет никакого смысла говорить, что Чарли знает все, что можно знать о системе из двух монет, но не располагает информацией об отдельных монетах.

Эти классические понятия глубоко укоренены в нашем мышлении. Они являются основой нашего инстинктивного понимания физического мира и от них очень трудно избавиться, но это придется сделать, если мы хотим понять квантовый мир.

6.3. Объединение квантовых систем

Две монеты Чарли образуют единую классическую систему, составленную из двух классических подсистем. Как мы видели в математической интерлюдии, посвященной тензорным произведениям (раздел 6.1), квантовая механика тоже позволяет объединять системы.

Алиса и Боб любезно согласились предоставить аналоги тех систем с монетой/костью, которые они одаливали нам в интерлюдии о тензорных произведениях. Вместо монеты и кости новая система основана на двух спинах, а значит, мы имеем возможность применить на практике наши знания об одиночных спинах.

Как и прежде, мы иногда будем использовать нестандартное обозначение $|a\rangle$ для напоминания о том, что Алисины векторы состояния — это не то же самое, что векторы состояния Боба, и что нам нельзя их складывать. С другой стороны, помните, что каждый элемент ортонормированного базиса S_{AB} помечен парой векторов — одним из S_A , а другим из S_B . Мы часто будем использовать запись $|ab\rangle$ для обозначения единого базисного вектора объединенной системы. Эти базис-

ные векторы с двойным индексом можно складывать друг другом, и мы будем часто это делать.

Как объяснялось в интерлюдии, пометка базисных векторов парой индексов требует некоторого привыкания. Следует думать о паре ab как о единой индексной метке единого состояния.

Рассмотрим пример. Пусть некий линейный оператор \mathbf{M} действует в пространстве состояний составной системы. Как обычно, его можно представить матрицей. Элементы этой матрицы конструируются путем помещения оператора, как в сэндвич, между базисными векторами. То есть элементы матрицы \mathbf{M} выражаются следующим образом:

$$\langle a' b' | \mathbf{M} | ab \rangle = M_{a'b'ab}.$$

Каждая строка этой матрицы помечена единым индексом $(a' b')$ составной системы, а каждый столбец — индексом (ab) .

Векторы $|ab\rangle$ выбраны ортонормированными, а значит, их внутренние произведения равны нулю, если не совпадают обе метки (что означает *не* совпадение a и b , а совпадение ab и $a'b'$). Этую идею можно выразить с помощью дельта-символа Кронекера:

$$\langle ab | a' b' \rangle = \delta_{aa'} \delta_{bb'}.$$

Правая часть равна нулю, если только не выполняются равенства $a = a'$ и $b = b'$. Если же эти метки совпадают, то внутреннее произведение равно единице.

Теперь, когда у нас есть базисные векторы, можно строить любые их линейные комбинации. Так, любое состояние составной системы раскладывается по базисным векторам следующим образом:

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b} \psi(a,b) |ab\rangle.$$

6.4. Два спина

Вернемся к нашему примеру и представим себе два спина — у Алисы и Боба. Чтобы упростить себе визуализацию, будем считать, что спины связаны с двумя частицами, которые зафиксированы в пространстве в двух близких, но различных точках.

У Алисы и Боба есть собственные приборы, обозначаемые соответственно \mathcal{A} и \mathcal{B} , которыми они могут пользоваться для приготовления состояний и измерения компонент спина. Каждый из этих приборов может быть независимо сориентирован вдоль любой оси.

Нам необходимо дать названия этим двум спинам. Когда у нас есть лишь один спин, мы просто называем его σ , и у него есть три компоненты вдоль осей x , y и z . Теперь у нас два спина, и вопрос в том, как обозначать их, не загромождая запись многочисленными верхними и нижними индексами. Можно обозначить их σ^A и σ^B , а компоненты σ_x^A , σ_y^B и так далее. На мой вкус, здесь слишком много индексов и за ними трудно уследить,

особенно на доске. Поэтому я буду придерживаться того же соглашения, которое мы использовали в интерлюдии о тензорных произведениях. Я буду называть спин Алисы σ , а следующую букву греческого алфавита, τ , присвою спину Боба. Полный набор компонент для спинов Алисы и Боба будет тогда состоять из

$$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$$

и

$$\tau_x, \tau_y, \tau_z.$$

Согласно принципам, которые были изложены выше, пространство состояний двухспиновой системы является тензорным произведением. Можно составить таблицу состояний точно так же, как мы делали в интерлюдии. На этот раз она будет квадратом 2×2 , состоящим из четырех базисных состояний.

Будем работать в базисе, в котором заданы z -компоненты обоих спинов. Вот базисные векторы:

$$|uu\rangle, |ud\rangle, |du\rangle, |dd\rangle,$$

где первая часть каждой метки соответствует состоянию σ , а вторая часть — τ . Например, первый базисный вектор $|uu\rangle$ представляет состояние, в котором оба спина находятся в состоянии «вверх». Вектор $|du\rangle$ — это состояние, в котором Алисин спин направлен «вниз», а спин Боба — «вверх».

6.5. Сепарабельные состояния

Простейший тип состояний составной системы называется *сепарабельными состояниями*¹. Сепарабельное состояние — это результат совершенно независимого приготовления состояния Алисой и Бобом, когда они по отдельности используют свои приборы для приготовления спина. Воспользуемся явной нотацией и запишем, что Алиса подготовила свой спин в состоянии

$$\alpha_u|u\rangle + \alpha_d|d\rangle,$$

а Боб подготовил свой спин в состоянии

$$\beta_u|u\rangle + \beta_d|d\rangle.$$

Мы также предполагаем, что каждое состояние нормализовано:

$$\begin{aligned} \alpha^* u \alpha_u + \alpha^* d \alpha_d &= 1, \\ \beta^* u \beta_u + \beta^* d \beta_d &= 1. \end{aligned} \tag{6.4}$$

Надо сказать, что эти отдельные уравнения нормализации для каждой системы играют ключевую роль в определении сепарабельных состояний. Если они не соблюдаются, мы не получим сепарабельного состоя-

¹ В оригинале используется термин *product states*, то есть, буквально, состояния, являющиеся *произведениями* [состояний]. Это подчеркивает параллель с тензорным *произведением* пространств, но вместе с тем создает возможность для путаницы, что ниже оговаривает автор. В русском языке таких параллелей не прослеживается. — Примеч. пер.

ния. Сепарабельное состояние, описывающее составную систему, имеет вид

$$\begin{aligned} & | \text{сепарабельное состояние} \rangle = \\ & = \{ \alpha_u | u \rangle + \alpha_d | d \rangle \} \otimes \{ \beta_u | u \rangle + \beta_d | d \rangle \}, \end{aligned}$$

где первый множитель представляет состояние Алисы, а второй множитель — состояние Боба. Раскладывая правую часть на множители и переходя к композитной нотации, получаем

$$\alpha_u \beta_u | uu \rangle + \alpha_u \beta_d | ud \rangle + \alpha_d \beta_u | du \rangle + \alpha_d \beta_d | dd \rangle. \quad (6.5)$$

Главная особенность сепарабельного состояния состоит в том, что каждая из его подсистем ведет себя независимо от другой. Если Боб выполняет эксперимент над своей собственной подсистемой, результат будет точно таким же, как если бы подсистемы Алисы не существовало. То же самое верно, конечно, и в отношении Алисы.

УПРАЖНЕНИЕ 6.2

Покажите, что если два условия нормализации (6.4) удовлетворяются, то вектор состояния (6.5) тоже автоматически будет нормализованным. Другими словами, покажите, что для этого сепарабельного состояния нормализация всего вектора состояния не накладывает никаких дополнительных ограничений на α и β .

Я хочу отметить, что тензорные произведения и сепарабельные состояния — две разные вещи, несмотря на сходные названия¹. Тензорное произведение — это *векторное пространство* для изучения составных систем. Сепарабельное состояние — это *вектор состояния*, один из многих векторов состояния, населяющих произведение пространств. Как мы увидим, большинство векторов состояния в произведении пространств *не являются сепарабельными*.

6.6. Подсчет параметров для сепарабельного состояния

Рассмотрим, сколько параметров требуется для задания такого сепарабельного состояния. Каждый множитель требует двух комплексных чисел (α_u и α_d для Алисы и β_u и β_d для Боба), а значит, всего нужно четыре комплексных числа. Это эквивалентно восьми вещественным параметрам. Но помните, что условия нормализации в уравнениях (6.4) уменьшают это число на два. Далее, общие фазы для каждого из состояний не имеют физического смысла, так что общее число вещественных параметров равно четырем. Тут нет ничего удивительного: для описания состояния одного спина необходимо два параметра, так что для двух независимых спинов требуется четыре.

¹ Иногда вместо термина *тензорное произведение* используется термин *пространство тензорного произведения* или просто *произведение пространств*.

6.7. Запутанные состояния

Принципы квантовой механики позволяют нам строить суперпозиции базисных векторов далеко не только в виде сепарабельных состояний. Наиболее общего вида вектор в композитном пространстве состояний имеет вид

$$\Psi_{uu}|uu\rangle + \Psi_{ud}|ud\rangle + \Psi_{du}|du\rangle + \Psi_{dd}|dd\rangle,$$

где символ Ψ с индексами использован для представления комплектных коэффициентов вместо α и β . И вновь требуется четыре комплексных числа, но в этот раз у нас есть лишь одно условие нормализации

$$\Psi^*_{uu}\Psi_{uu} + \Psi^*_{ud}\Psi_{ud} + \Psi^*_{du}\Psi_{du} + \Psi^*_{dd}\Psi_{dd} = 1$$

и лишь одна общая фаза, которую можно игнорировать. В результате это наиболее общее состояние двухспиновой системы имеет шесть вещественных параметров. Очевидно, данное пространство состояний богаче совокупности тех сепарабельных состояний, которые могут быть приготовлены Бобом и Алисой независимо друг от друга. Появляется нечто новое. И это новое называется *запутанностью*¹.

¹ *Запутанность* (запутанные состояния) — наиболее часто встречающийся в русском языке термин. Однако в ходу и много других вариантов: *перепутанность*, *сцепленность*, *зацепленность*, *нелокальность*, *несепарабельность*. — *Прич. пер.*

Запутанность — это не бинарное свойство. Некоторые состояния запутаны сильнее других. Вот пример максимально запутанного состояния, которое запутано настолько, насколько это возможно. Оно называется *синглетным* состоянием и может быть записано как

$$|sing\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle).$$

Синглетное состояние нельзя представить как сепарабельное. То же самое верно и в отношении триплетных состояний

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle + |du\rangle),$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|uu\rangle + |dd\rangle),$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|uu\rangle - |dd\rangle),$$

которые тоже являются максимально запутанными. Причина, по которой они называются синглетным и триплетными, будет объяснена позже.

УПРАЖНЕНИЕ 6.3

Докажите, что состояние $|sing\rangle$ нельзя представить как сепарабельное состояние.

Что такого замечательного в максимально запутанных состояниях? Я могу резюмировать это в двух тезисах:

- Запутанное состояние — это исчерпывающее описание составной системы. Больше о ней ничего узнать нельзя.
- В максимально запутанном состоянии об индивидуальных подсистемах ничего не известно.

Как такое может быть? Как мы можем владеть *максимально возможным знанием* о системе из двух спинов Алиса — Боб и тем не менее *ничего* не знать об отдельных спинах, которые являются ее субкомпонентами? Это загадка запутывания, и я надеюсь, что к концу этой лекции вы станете понимать правила игры, даже если глубинная природа запутывания еще будет казаться парадоксальной.

6.8. Наблюдаемые Алисы и Боба

До сих пор мы обсуждали пространство состояний двухспиновой системы Алисы — Боба, но не ее наблюдаемые. Некоторые из этих наблюдаемых очевидны, даже если этого не скажешь об их математическом представлении. В частности, используя свои приборы \mathcal{A} и \mathcal{B} , Алиса и Боб могут измерять компоненты своих спинов:

$$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$$

и

$$\tau_x, \tau_y, \tau_z.$$

Как эти наблюдаемые представляются эрмитовыми операторами в композитном пространстве состояний? Ответ прост. Операторы Боба действуют на спиновые состояния Боба в точности так же, как если бы Алисы не было. То же самое верно и для Алисы. Давайте проверим, как спиновые операторы действуют на состояния одиночного спина. Сначала рассмотрим Алисин спин:

$$\begin{aligned}\sigma_z|u\rangle &= |u\rangle, \\ \sigma_z|d\rangle &= -|d\rangle, \\ \sigma_x|u\rangle &= |d\rangle, \\ \sigma_x|d\rangle &= |u\rangle, \\ \sigma_y|u\rangle &= i|d\rangle, \\ \sigma_y|d\rangle &= -i|u\rangle.\end{aligned}\tag{6.6}$$

Конечно, ситуация у Боба идентична Алисиной, так что можно записать параллельный набор уравнений, показывающий, как компоненты τ влияют на состояния Боба:

$$\begin{aligned}\tau_z|u\rangle &= |u\rangle, \\ \tau_z|d\rangle &= -|d\rangle, \\ \tau_x|u\rangle &= |d\rangle, \\ \tau_x|d\rangle &= |u\rangle, \\ \tau_y|u\rangle &= i|d\rangle, \\ \tau_y|d\rangle &= -i|u\rangle.\end{aligned}\tag{6.7}$$

Теперь давайте рассмотрим, как должны быть определены операторы, когда они действуют на состояния из тензорного произведения: $|uu\rangle$, $|ud\rangle$, $|du\rangle$ и $|dd\rangle$. Ответ состоит в том, что σ при своем действии просто игнори-

рует относящуюся к Бобу половину метки состояния. Имеется много возможных комбинаций операторов и состояний, но я выберу лишь несколько из них случайным образом. Остальные варианты вы можете проанализировать сами или посмотреть их в приложении. Начнем с Алисиных операторов:

$$\begin{aligned}
 \sigma_z|uu\rangle &= |uu\rangle, \\
 \sigma_z|du\rangle &= -|du\rangle, \\
 \sigma_x|ud\rangle &= |dd\rangle, \\
 \sigma_x|dd\rangle &= |ud\rangle, \\
 \sigma_y|uu\rangle &= i|du\rangle, \\
 \sigma_y|du\rangle &= -i|uu\rangle, \\
 \tau_z|uu\rangle &= |uu\rangle, \\
 \tau_z|du\rangle &= |du\rangle, \\
 \tau_x|ud\rangle &= |uu\rangle, \\
 \tau_x|du\rangle &= |dd\rangle, \\
 \tau_y|uu\rangle &= i|ud\rangle, \\
 \tau_y|dd\rangle &= -i|du\rangle.
 \end{aligned} \tag{6.8}$$

И вновь правило состоит в том, что Алисины компоненты спина действуют только на Алисину половину составной системы. Половина Боба является пассивным наблюдателем, не принимающим участия в процессе. В символической записи: когда действуют операторы σ_x , σ_y или σ_z , половина спинового состояния, относящаяся к Бобу, не меняется. А когда действуют операторы Боба τ , пассивной, аналогичным образом, остается Алисина половина.

Мы допускаем некоторую вольность в обозначениях. Векторы тензорного произведения пространств — это *новые* векторы, построенные из векторов двух меньших пространств. Формально то же самое относится и к операторам. Будь мы педантичны, то должны были бы настаивать на том, чтобы записывать σ_z и τ_x для тензорного произведения в виде $\sigma_z \otimes I$ и $I \otimes \tau_x$ соответственно, где I — тождественный оператор. И действительно, можно подчеркнуть два важных свойства операторов в тензорном произведении пространств, если переписать уравнение

$$\sigma_z |du\rangle = -|du\rangle \quad (6.9)$$

в виде

$$(\sigma_z \otimes I)(|d\rangle \otimes |u\rangle) = (\sigma_z |d\rangle \otimes I|u\rangle) = (-|d\rangle \otimes |u\rangle). \quad (6.10)$$

Эта форма записи громоздка, и обычно мы пользуемся сокращенным языком, как в уравнении (6.9). Тем не менее язык уравнения (6.10) поясняет две важные вещи.

1. Составной оператор $\sigma_z \otimes I$ действует на составной вектор $|d\rangle \otimes |u\rangle$ и дает новый составной вектор $-|d\rangle \otimes |u\rangle$.
2. Алисина (левая) половина составного оператора действует только на ее половину составного вектора. Аналогично половина оператора, относящаяся к Бобу, действует только на его половину вектора.

Мы еще обсудим составные операторы в следующем разделе, а затем, в лекции 7, язык уравнения (6.10) поможет нам понять, как работать с тензорным произведением в компонентной форме.

УПРАЖНЕНИЕ 6.4

Используя матричные представления для σ_x , σ_y или σ_z и векторы-столбцы для $|u\rangle$ и $|d\rangle$, проверьте уравнение (6.6). Затем используйте (6.6) и (6.7) для записи уравнений, которые опущены в (6.8). Проверить свои ответы можно по приложению.

УПРАЖНЕНИЕ 6.5

Докажите следующую теорему.

Когда любой из спиновых операторов Алисы или Боба действует на сепарабельное состояние, результат остается сепарабельным состоянием.

Покажите, что в сепарабельном состоянии среднее значение любой компоненты $\vec{\sigma}$ или $\vec{\tau}$ в точности такое же, каким оно было бы в отдельном односпиновом состоянии.

В последнем упражнении доказывается важное утверждение о сепарабельных состояниях. В сепарабельном состоянии любое предсказание, относящееся к той

половине системы, которая принадлежит Бобу, будет точно таким же, как в соответствующей односпиновой теории. То же самое верно и в отношении Алисы.

В качестве примера, где проявляется это свойство сепарабельных состояний, я назову *принцип спиновой поляризации* из лекции 3. Удобно выразить этот принцип так:

Для любого состояния одиночного спина существует определенное направление, для которого этот спин равен +1.

Как я уже объяснял, это означает, что средние значения компонент удовлетворяют уравнению

$$\langle \sigma_x \rangle^2 + \langle \sigma_y \rangle^2 + \langle \sigma_z \rangle^2 = 1, \quad (6.11)$$

которое говорит, что не все средние значения могут быть равны нулю. Этот факт сохраняется и для любых сепарабельных состояний. Однако он не соблюдается для запутанного состояния $|sing\rangle$. В действительности, как мы сейчас покажем, для состояния $|sing\rangle$ правая часть уравнения (6.11) становится равной нулю.

Напомню, что запутанное состояние $|sing\rangle$ определено как

$$|sing\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle).$$

Рассмотрим средние значения σ в этом состоянии. У нас есть все необходимое для вычислений. Начнем с $\langle \sigma_z \rangle$:

$$\langle \sigma_z \rangle = \langle sing | \sigma_z | sing \rangle = \langle sing | \sigma_z \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle) \rangle.$$

Здесь пригодится уравнение (6.8) (а также упражнение 6.4, в котором набор уравнений доводится до полноты!). Они говорят, как σ_z действует на каждый из векторов базиса. В результате получаем

$$\langle sing | \sigma_z | sing \rangle = \langle sing | \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle ud \rangle + \langle du \rangle) \rangle$$

или

$$\langle \sigma_z \rangle = \frac{1}{2} (\langle ud \rangle - \langle du \rangle) (\langle ud \rangle + \langle du \rangle).$$

Несложная проверка показывает, что эта величина равна нулю. Теперь рассмотрим $\langle \sigma_x \rangle$:

$$\langle \sigma_x \rangle = \langle sing | \sigma_x | sing \rangle = \langle sing | \sigma_x \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle ud \rangle - \langle du \rangle) \rangle$$

или

$$\langle \sigma_x \rangle = \frac{1}{2} (\langle ud \rangle - \langle du \rangle) (\langle dd \rangle - \langle uu \rangle).$$

И вновь получается ноль. Наконец, обратимся к $\langle \sigma_y \rangle$:

$$\langle \sigma_y \rangle = \langle sing | \sigma_y | sing \rangle = \frac{1}{2} (\langle ud \rangle - \langle du \rangle) (i \langle dd \rangle + i \langle uu \rangle).$$

Как вы могли догадаться, и здесь тоже получается ноль. Таким образом, мы показали, что для состояния $|sing\rangle$

$$\langle \sigma_z \rangle = \langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle = 0,$$

и вообще все средние значения σ равны нулю. Нет нужды говорить, что это также относится к средним значениям τ . Ясно, что $|sing\rangle$ радикально отличается от сепарабельных состояний. Что из этого следует в отношении измерений, которые можно выполнить?

Раз среднее значение компоненты σ равно нулю, значит исход эксперимента с равной вероятностью будет $+1$ или -1 . Иными словами, исход является совершенно неопределенным. Несмотря на то что мы точно знаем вектор состояния $|sing\rangle$, нам ничего неизвестно об исходе какого-либо измерения любой из компонент спина.

Возможно, это означает, что состояние $|sing\rangle$ в каком-то смысле неполное, то есть существуют детали устройства системы, которые мы упускаем и не измеряем. В конце концов, ранее мы видели идеально классический пример, в котором Алиса и Боб ничего не знают о своих монетах, пока не посмотрят на них. Почему в квантовой версии должно быть иначе?

В нашем примере «классического запутывания» с Алисой, Бобом и Чарли совершенно ясно, что о системе известно не все. Чарли мог бы подсмотреть монеты, ничего этим не меняя, поскольку классические измерения могут быть сколь угодно аккуратными.

Могут ли быть у квантовой системы так называемые *скрытые переменные*? Ответ: согласно законам квантовой механики нет ничего, что можно было бы узнать, сверх того, что закодировано в векторе состояния — в данном случае в $|sing\rangle$. Вектор состояния — это максимально полное описание системы. Так что, похоже, в квантовой механике мы можем знать о составной

системе всё, — всё, что о ней вообще можно знать, — и при этом ничего не знать о ее составных частях. Это и есть то самое странное свойство запутанности, которое так беспокоило Эйнштейна.

6.9. Составные наблюдаемые

Представим себе квантовомеханическую версию эксперимента с Алисой, Бобом и Чарли. Роль Чарли состоит в приготовлении двух спинов в запутанном состоянии $|sing\rangle$. Затем, не подсматривая за этими спинами (помните, квантовые измерения *не являются* аккуратными), он вручает один спин Алисе, а другой — Бобу. Хотя Алиса и Боб точно знают, в каком состоянии находится составная система, они не могут предсказать исхода своих индивидуальных измерений.

Но, безусловно, знание точного состояния составной системы должно говорить им *что-то*, даже если это состояние сильно запутанное. Так оно и есть. Однако для понимания, что именно оно им говорит, мы должны рассмотреть более широкое семейство наблюдаемых, чем те, которые Алиса и Боб могут измерить по отдельности, когда каждый использует *только* свой собственный детектор. Оказывается, есть такие наблюдаемые, которые можно измерить, только используя оба детектора вместе. Результат таких измерений может

стать известным Алисе или Бобу, если они встретятся и сравнят свои записи.

Первый вопрос состоит в том, могут ли Алиса и Боб одновременно измерить свои собственные наблюдаемые. Мы видели, что есть величины, которые нельзя измерить одновременно. В частности, две наблюдаемые, которые не коммутируют между собой, нельзя вместе измерить так, чтобы измерения не мешали друг другу. Но для Алисы и Боба, как нетрудно убедиться, любая компонента σ коммутирует с любой компонентой τ . Это общий факт, относящийся к тензорным произведениям. Операторы, которые действуют на два сомножителя по отдельности, коммутируют друг другом. Так что Алиса может выполнять измерения своего спина, а Боб — своего, никак не мешая экспериментам друг друга.

Допустим, Алиса измеряет σ_z , а Боб — τ_z , а затем они перемножают результаты. Другими словами, они сговариваются измерить произведение $\tau_z\sigma_z$.

Произведение $\tau_z\sigma_z$ — это наблюдаемая, которая математически представляется применением к кету сначала σ_z , а затем τ_z . Не забывайте, что это лишь математические операции, которые определяют новый оператор: они отличаются от акта выполнения физического измерения. Вам не нужны приборы для умножения двух операторов; достаточно карандаша и бумаги. Посмотрим, что случится, если применить произведение $\tau_z\sigma_z$ к состоянию $|sing\rangle$:

$$\tau_z \sigma_z \frac{1}{\sqrt{2}} (\lvert ud \rangle - \lvert du \rangle).$$

Сначала, используя таблицу в уравнении (6.8), применим σ_z :

$$\tau_z \sigma_z \frac{1}{\sqrt{2}} (\lvert ud \rangle - \lvert du \rangle) = \tau_z \frac{1}{\sqrt{2}} (\lvert ud \rangle + \lvert du \rangle).$$

Теперь применим τ_z

$$\tau_z \sigma_z \frac{1}{\sqrt{2}} (\lvert ud \rangle - \lvert du \rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\lvert ud \rangle + \lvert du \rangle).$$

Обратите внимание, что конечный результат — это просто $\lvert sing \rangle$ с обратным знаком:

$$\tau_z \sigma_z \lvert sing \rangle = -\lvert sing \rangle.$$

Очевидно, что $\lvert sing \rangle$ — это собственный вектор наблюдаемой $\tau_z \sigma_z$ с собственным значением -1 . Давайте разберемся, в чем смысл этого результата. Алиса измеряет σ_z , а Боб — τ_z ; когда они встречаются и сравнивают результаты, то обнаруживают, что получили противоположные значения. Иногда Боб измеряет $+1$, а у Алисы получается -1 . В других случаях Алиса получает $+1$, а Боб — -1 . Произведение этих двух измерений всегда равно -1 .

В таком результате не должно быть ничего удивительного. Вектор состояния $\lvert sing \rangle$ — это суперпозиция двух векторов $\lvert ud \rangle$ и $\lvert du \rangle$, которые оба состоят из двух спинов с противоположными z -компонентами. Эта ситуация совершенно аналогична классическому варианту с Чарли и его двумя монетами.

Но тут мы подходим к чему-то, не имеющему классического аналога. Допустим, что вместо измерения

z -компонент своего спина Алиса и Боб измеряют x -компоненты. Чтобы выяснить, как коррелированы их результаты, нам надо изучить наблюдаемую $\tau_x \sigma_x$.

Подействуем на $|sing\rangle$ этим произведением. Вот последовательность шагов:

$$\begin{aligned}\tau_x \sigma_x |sing\rangle &= \tau_x \sigma_x \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle) = \\ &= \tau_x \frac{1}{\sqrt{2}}(|dd\rangle - |uu\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|du\rangle - |ud\rangle)\end{aligned}$$

или, проще,

$$\tau_x \sigma_x |sing\rangle = -|sing\rangle.$$

Вот это уже немного неожиданно: $|sing\rangle$ оказывается также собственным вектором $\tau_x \sigma_x$ с собственным значением -1 . При взгляде на $|sing\rangle$ совсем неочевидно, что x -компоненты двух спинов всегда противоположны. Тем не менее всякий раз, когда Алиса и Боб их измеряют, оказывается, что σ_x и τ_x имеют противоположные значения. На этом месте вы, вероятно, уже не будете удивлены, узнав, что то же самое относится и к y -компонентам.

УПРАЖНЕНИЕ 6.6

Допустим, Чарли подготовил два спина в синглетном состоянии. На этот раз Боб измерил τ_y , а Алиса — σ_x . Каким будет среднее значение $\sigma_x \tau_y$?

Что это нам говорит о корреляции между данными двумя измерениями?

УПРАЖНЕНИЕ 6.7

Затем Чарли приготовил спины в другом состоянии, назовем его $|T_1\rangle$, где

$$|T_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle + |du\rangle).$$

В этих примерах T обозначает *триплет*. Триплетные состояния радикально отличаются от состояний в примерах с монетой и костью. Каковы будут средние значения операторов $\sigma_z \tau_z$, $\sigma_x \tau_x$ и $\sigma_y \tau_y$?

Насколько же существенным может быть различие в знаке!

УПРАЖНЕНИЕ 6.8

Сделайте то же самое для двух других запутанных триплетных состояний:

$$|T_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|uu\rangle + |dd\rangle),$$

$$|T_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|uu\rangle - |dd\rangle)$$

и интерпретируйте результаты.

Наконец, рассмотрим еще одну наблюдаемую. Она не может быть измерена Алисой и Бобом, выполняющими по отдельности измерения собственными приборами, даже если они потом встретятся и сравнят свои записи. Тем не менее квантовая механика настаивает, что можно создать прибор, который будет измерять эту наблюдаемую.

Наблюдаемую, о которой я веду речь, можно представлять себе как обычное скалярное произведение векторов-операторов $\vec{\sigma}$ и $\vec{\tau}$:

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} = \sigma_x \tau_x + \sigma_y \tau_y + \sigma_z \tau_z.$$

Можно подумать, что значение этой наблюдаемой найдется, если Боб измерит все компоненты τ , а Алиса измерит все компоненты σ ; тогда они смогут перемножить эти компоненты и сложить результаты. Проблема, однако, в том, что Боб не может одновременно измерять отдельные компоненты τ , поскольку они не коммутируют. Аналогично Алиса не может за раз измерить более одной компоненты σ . Чтобы измерить $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$, нужно построить новый тип прибора, который определяет $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$ без измерения отдельных компонент. Совершенно неочевидно, что это можно сделать. Вот конкретный пример того, как такое измерение могло бы быть выполнено. Некоторые атомы обладают спинами, которые описываются точно так же, как спины электронов. Когда два таких атома находятся близко друг к другу — например, соседствуют в кристалли-

ческой решетке, — гамильтониан будет зависеть от их спинов. В некоторых ситуациях гамильтониан для соседствующих спинов пропорционален $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$. Когда это так, измерение $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$ эквивалентно определению энергии пары атомов. Это будет одно измерение составного оператора, не связанное с измерением отдельных компонент спина.

УПРАЖНЕНИЕ 6.9

Докажите, что четыре вектора $|sing\rangle$, $|T_1\rangle$, $|T_2\rangle$ и $|T_3\rangle$ являются собственными векторами $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$. Каковы их собственные значения?

Присмотритесь к результатам последнего упражнения. Понятно ли вам, почему один из этих векторов состояния назван синглетом, а все остальные — триплетом? Дело в том, что если вы обратите внимание на их отношения с оператором $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$, то синглет — это собственный вектор с одним собственным значением, а триплеты являются собственными векторами с другим *вырожденным* собственным числом.

Вот хороший пример, объединяющий запутанность с понятиями времени и изменения из лекции 4. Воспользуйтесь им, чтобы вспомнить идею унитарной эволюции во времени и смысл гамильтониана.

УПРАЖНЕНИЕ 6.10

Система из двух спинов имеет гамильтониан

$$\mathbf{H} = \frac{\omega}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$$

Каковы возможные энергии системы и каковы собственные векторы этого гамильтониана?

Допустим, что система первоначально находится в состоянии $|ii\rangle$. Каким будет ее состояние в любой последующий момент? Ответьте на тот же вопрос для исходных состояний $|ud\rangle$, $|du\rangle$ и $|dd\rangle$.

Лекция 7. Еще о запутанности

«Гильбертс Плэйс», лето 1935

Через вращающиеся двери входят двое неряшливо одетых завсегдатаев, возбужденно о чем-то разговаривая. Один с взлохмаченными седеющими волосами в прожженном свитере говорит: «Нет, я не приму вашу теорию, пока вы не скажете мне, что представляют собой элементы физической реальности».

Другой оглядывается и, разводя руками в жесте безнадежного разочарования, обращается к Арту и Ленни: «Он снова за свое. Элементы реальности, ЭПР, ЭПР... — это единственное, о чем он думает. Альберт, брось свои навязчивые идеи и просто прими факты, как они есть».

«Ни за что! Я не могу принять, что можно знать о вещи все, но при этом ничего не знать о ее частях. Это полный абсурд, Нильс».

«Извини, Альберт. Просто так уж оно устроено. Дай я куплю тебе пива».

В этой лекции мы глубже рассмотрим явление запутанности. Для этого нам понадобятся дополнительные математические инструменты. Прежде всего мы разберемся, как работать с тензорным произведением в компонентной форме. Затем познакомимся с новым оператором, который называется *матрицей плотности*. Эти инструменты не так трудно освоить, но они требуют сосредоточиться и как следует повоевать с индексами.

7.1. Математическая интерлюдия: тензорное произведение в компонентной форме

В лекции 6 было объяснено, как построить тензорное произведение двух векторных пространств с использованием абстрактной нотации бра, кетов и обозначений операторов вроде σ_z . Как переводится всё это в столбцы, строки и матрицы?

Строить тензорные произведения матриц и векторов-столбцов несложно. Правила, как мы сейчас убедимся, вполне очевидны. Самое хитрое здесь — понять, почему эти правила работают: почему они позволяют строить матрицы и векторы-столбцы, *которые обладают нужными нам свойствами*. Мы подойдем к делу двумя разными способами. Сначала мы построим составные операторы, пользуясь методом проб и ошибок, разработанным в лекции 3. Затем покажем, как

строить составные операторы непосредственно из их компонентных операторов.

7.1.1. Построение матриц тензорного произведения на основе базовых принципов

Вернемся к лекции 3, где было показано, как *любую* наблюдаемую \mathbf{M} записать в матричной форме относительно заданного базиса. Не поленитесь еще раз посмотреть формулы с (3.1) до (3.4). В этом разделе мы подсчитаем численное значение элементов m_{jk} матрицы \mathbf{M} , пользуясь выражением

$$m_{jk} = \langle j | \mathbf{M} | k \rangle, \quad (7.1)$$

где $|j\rangle$ и $|k\rangle$ представляют базисные векторы. Каждая комбинация $|j\rangle$ и $|k\rangle$ порождает соответствующий элемент матрицы¹.

Наш план состоит в том, чтобы применить эту формулу к некоторым тензорным произведениям операторов и посмотреть, что получится. Ввиду нашего соглашения о двойных индексах для базисных векторов тензорного произведения, «сэндвич» в этих уравнениях будет выглядеть немного иначе, чем в формуле (7.1). С каждой стороны сэндвича мы должны перебрать все

¹ В лекции 3 мы записывали индекс k слева от матрицы \mathbf{M} , а j — справа, в противоположность тому, как поступаем теперь. Но поскольку j и k — индексные переменные, это не имеет значения, пока мы придерживаемся одного подхода в группе уравнений.

базисные векторы: $|uu\rangle$, $|ud\rangle$, $|du\rangle$ и $|dd\rangle$.¹ Для простоты мы будем в качестве примера использовать оператор $\sigma_z \otimes I$, где I — тождественный оператор. Мы видели, $\sigma_z \otimes I$ действует на Алисину половину вектора состояния как σ_z , а на половину Боба *вообще никак* не влияет. Поскольку мы работаем в четырехмерном векторном пространстве, должна получиться матрица 4×4 . Опуская символ \otimes , чтобы он не мозолил глаза, эту матрицу можно записать так:

$$\sigma_z \otimes I = \\ = \begin{pmatrix} \langle uu | \sigma_z I | uu \rangle & \langle uu | \sigma_z I | ud \rangle & \langle uu | \sigma_z I | du \rangle & \langle uu | \sigma_z I | dd \rangle \\ \langle ud | \sigma_z I | uu \rangle & \langle ud | \sigma_z I | ud \rangle & \langle ud | \sigma_z I | du \rangle & \langle ud | \sigma_z I | dd \rangle \\ \langle du | \sigma_z I | uu \rangle & \langle du | \sigma_z I | ud \rangle & \langle du | \sigma_z I | du \rangle & \langle du | \sigma_z I | dd \rangle \\ \langle dd | \sigma_z I | uu \rangle & \langle dd | \sigma_z I | ud \rangle & \langle dd | \sigma_z I | du \rangle & \langle dd | \sigma_z I | dd \rangle \end{pmatrix}. \quad (7.2)$$

Для вычисления значений элементов этой матрицы можно позволить σ_z и I действовать либо налево, либо направо. Предположим, σ_z действует налево, а I — направо. Поскольку I ничего не делает, нам надо лишь позаботиться о том, как подействует σ_z на бра-вектор слева. В этом бра-векторе σ_z действует только на левую (то есть Алисину) часть метки состояния. Пользуясь правилами, которые мы уже вывели (см. уравнения (6.6) и (6.7)), можно вычислить все эти результаты действия σ_z и получить матрицу из внутренних произведений:

¹ Конечно, мы можем использовать другой набор базисных векторов, например $|rr\rangle$, $|rl\rangle$ и т. д. В этом случае получится другой набор элементов матрицы.

$$\sigma_z \otimes I = \begin{pmatrix} \langle uu|uu\rangle & \langle uu|ud\rangle & \langle uu|du\rangle & \langle uu|dd\rangle \\ \langle ud|uu\rangle & \langle ud|ud\rangle & \langle ud|du\rangle & \langle ud|dd\rangle \\ -\langle du|uu\rangle & -\langle du|ud\rangle & -\langle du|du\rangle & -\langle du|dd\rangle \\ -\langle dd|uu\rangle & -\langle dd|ud\rangle & -\langle dd|du\rangle & -\langle dd|dd\rangle \end{pmatrix}. \quad (7.3)$$

Поскольку эти собственные векторы ортонормированные, данная матрица упрощается до

$$\sigma_z \otimes I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.4)$$

Как записать собственные векторы $|uu\rangle$, $|ud\rangle$, $|du\rangle$ и $|dd\rangle$ в виде векторов-столбцов? Сейчас я просто скажу, что мы будем представлять $|uu\rangle$ и $|du\rangle$ как

$$|uu\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |du\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7.5)$$

Посмотрим, что происходит, когда $\sigma_z \otimes I$ действует на эти векторы-столбцы. Применив полученную матрицу к $|uu\rangle$, получаем

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Другими словами,

$$\sigma_z \otimes I |uu\rangle = |uu\rangle,$$

как мы и ожидали. А что, если подействовать той же матрицей на вектор-столбец $|du\rangle$ из формулы (7.5)? Выполнив матричное умножение, получаем, что результат будет, как и следовало ожидать, $-|du\rangle$.

7.1.2. Построение тензорного произведения матриц по компонентным матрицам

Приведенный выше метод вычисления элементов матрицы имеет чрезвычайно общий характер — он работает для *всех* наблюдаемых. Если нам требуется построить тензорное произведение двух операторов и мы *уже знаем* матричные элементы строительных блоков, то можем непосредственно их скомбинировать. Вот правила комбинирования матриц 2×2 для получения матрицы 4×4 :

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11}B & A_{12}B \\ A_{21}B & A_{22}B \end{pmatrix} \quad (7.6)$$

или

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & A_{12}B_{11} & A_{12}B_{12} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & A_{12}B_{21} & A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & A_{22}B_{11} & A_{22}B_{12} \\ A_{21}B_{21} & A_{21}B_{22} & A_{22}B_{21} & A_{22}B_{22} \end{pmatrix}. \quad (7.7)$$

Та же схема работает для матриц любого размера. Этот способ умножения матриц называют иногда *кронекеровым произведением*, термином, который применим только к матрицам и означает матричную версию тензорного произведения. Кронекерово произведение двух матриц 2×2 является матрицей 4×4 , и та же схема

применима к матрицам любого размера. В общем случае кронекерово произведение матрицы $m \times n$ и матрицы $p \times q$ — это матрица $mp \times nq$.

Все это прекрасно применимо к векторам-столбцам и векторам-строкам, которые являются частными случаями матриц. Тензорное произведение двух векторов-столбцов 2×1 — это вектор-столбец 4×1 . Если a и b — векторы-столбцы 2×1 , их тензорное произведение выглядит так:

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} \\ a_{11}b_{21} \\ a_{21}b_{11} \\ a_{21}b_{21} \end{pmatrix}. \quad (7.8)$$

Посмотрим, как это работает для Алисы и Боба. Сначала сконструируем четыре тензорных произведения базисных векторов, используя $|u\rangle$ и $|d\rangle$ в качестве строительных блоков. Напомню, что согласно уравнениям (2.11) и (2.12) из лекции 2,

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Если подставить соответствующие комбинации $|u\rangle$ и $|d\rangle$ в формулу (7.8), то четырьмя нашими векторами-столбцами 4×1 будут

$$|uu\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned}
 |ud\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 |du\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 |dd\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{7.9}$$

Далее мы используем правило из формулы (7.7) для комбинирования операторов σ_z и τ_x . С использованием определений σ_z и τ_x из формулы (3.20) это дает нам тензорное произведение матриц

$$\sigma_z \otimes \tau_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Сравним этот результат с произведением σ_x и τ_z

$$\sigma_x \otimes \tau_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Обратите внимание, что $\sigma_x \otimes \tau_z$ — не то же самое, что $\sigma_z \otimes \tau_x$. Это естественно, поскольку они представляют различные наблюдаемые.

Пока все хорошо. Но дальше мы увидим кое-что немного более интересное. В помощью нескольких упражнений мы попытаемся убедить вас в том, что кронекерово произведение действительно является тензорным произведением матриц, иными словами, что Алисина половина матрицы влияет только на ее половину вектора-столбца, и аналогично обстоит дело для Боба. Это немного нетривиально из-за того способа, которым кронекерово произведение перемешивает элементы своих строительных блоков.

В качестве примера рассмотрим, как действует $\sigma_z \otimes \tau_x$ на $|ud\rangle$. Переведя абстрактные символы в компонентную форму, можно записать

$$(\sigma_z \otimes \tau_x)|ud\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Но вектор-столбец в правой части соответствует $|uu\rangle$ в (7.9). Сделав обратный перевод в абстрактные обозначения, получаем

$$(\sigma_z \otimes \tau_x)|ud\rangle = |uu\rangle.$$

Это в точности то, что мы хотели, — матричное представление наших абстрактных операторов и векто-

ров состояния, которые воспроизводят их известное поведение.

Следующее упражнение поможет выкристаллизовать идею о том, что σ -половина $\sigma \otimes \tau$ влияет только на Алисину половину вектора состояния и что τ -половина влияет только на часть, относящуюся к Бобу. Это упражнение также обеспечит некоторую практику работы с матричными элементами оператора в условиях, когда мы уже знаем, что оператор делает с каждым базисным вектором.

УПРАЖНЕНИЕ 7.1

Запишите тензорное произведение $I \otimes \tau_x$ как матрицу и примените ее к каждому из векторов-столбцов $|uu\rangle$, $|ud\rangle$, $|du\rangle$ и $|dd\rangle$. Покажите, что Алисина половина вектора состояния во всех случаях остается неизменной. Напоминаю, что I — это единичная матрица 2×2 .

УПРАЖНЕНИЕ 7.2

Вычислите матричные элементы $\sigma_z \otimes \tau_x$, построив внутреннее произведение, как в формуле (7.2).

Третье упражнение несколько утомительное, зато оно по-настоящему закрепляет понимание. Рассмотрим уравнение

$$(A \otimes B) \quad (a \otimes b) = (Aa \otimes Bb). \quad (7.10)$$

Как и в формулах (7.7) и (7.8), A и B представляют матрицы 2×2 (или операторы), а a и b — векторы-столбцы 2×1 . В упражнении от вас требуется расписать уравнение покомпонентно и показать, что левая сторона совпадает с правой.

УПРАЖНЕНИЕ 7.3

- а) Перепишите формулу (7.10) в компонентной форме, замените обозначения A , B , a и b матрицами и векторами-столбцами из формул (7.7) и (7.8).
- б) Выполните умножение матриц Aa и Bb в правой части. Убедитесь, что каждый результат является матрицей 4×1 .
- в) Распишите все три кронекеровых произведения.
- г) Проверьте размеры строк и столбцов в каждом кронекеровом произведении:
 - $(A \otimes B)$: 4×4 ;
 - $(a \otimes b)$: 4×1 ;
 - $(Aa \otimes Bb)$: 4×1 .
- д) Выполните матричное умножение в левой части, получив вектор-столбец 4×1 . Каждая строка должна быть суммой четырех отдельных членов.
- е) Наконец, проверьте, что получившиеся в результате векторы в левой и правой частях совпадают.

7.2. Математическая интерлюдия: внешнее произведение

Имея бра $\langle \varphi |$ и кет $|\Psi\rangle$, можно построить внутреннее произведение $\langle \varphi | \Psi \rangle$. Как мы видели, внутреннее произведение — это комплексное число. Однако существует произведение другого типа, называемое внешним, которое записывается в виде

$$|\Psi\rangle\langle\varphi|.$$

Внешнее произведение — это не число; это линейный оператор. Рассмотрим, что происходит, когда $|\Psi\rangle\langle\varphi|$ действует на другой кет $|A\rangle$:

$$|\psi\rangle\langle\varphi| |A\rangle.$$

В этих примерах разделительный пробел используется вместо скобок для группировки операций. Напоминаю, что все операции с бра, кетами и линейными операторами ассоциативны, то есть их можно группировать произвольным образом, если только порядок их следования остается неизменным¹. Действие оператора внешнего произведения очень простое и может быть определено как

$$|\psi\rangle\langle\varphi| |A\rangle \equiv |\psi\rangle \langle\varphi| A \rangle.$$

Другими словами, мы берем внутреннее произведение $\langle\varphi|$ и $|A\rangle$ (результат является комплексным числом)

¹ Иногда можно менять и порядок, но при этом нужно быть более внимательным.

и умножаем на кет $|\Psi\rangle$. Бра-кет-нотация настолько эффективна, что практически вынуждает нас это сделать. В этом нашла отражение гениальность Поля Дирака. Легко доказать, что внешнее произведение также действует и на бра:

$$\langle B| |\psi\rangle \langle \varphi| \equiv \langle B|\psi\rangle \langle \varphi|.$$

Особым случаем является внешнее произведение кета на соответствующий бра $|\Psi\rangle\langle\varphi|$. Если допустить, что $|\Psi\rangle$ отнормирован, этот оператор называется *проекционным оператором*. Вот как он действует:

$$|\psi\rangle\langle\psi| |A\rangle = |\psi\rangle \langle\psi| A \rangle.$$

Обратите внимание, что результат всегда пропорционален $|\Psi\rangle$. О проекционном операторе можно сказать, что он проецирует вектор на направление, заданное $|\Psi\rangle$. Вот некоторые свойства проекционных операторов, которые вы легко можете доказать (напоминаю, что $|\Psi\rangle$ нормирован на 1).

- Проекционный оператор — эрмитов.
- Вектор $|\Psi\rangle$ является собственным вектором проекционного оператора с собственным числом 1:

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

- Любой вектор, ортогональный $|\Psi\rangle$, является собственным вектором с собственным числом 0. Таким образом, все собственные числа $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ — это 0 и 1,

и существует лишь один собственный вектор с единичным собственным числом. Этот собственный вектор и есть сам $|\Psi\rangle$.

- Квадрат проекционного оператора — это то же самое, что сам проекционный оператор:

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

- След оператора (или любой квадратной матрицы) определяется как сумма диагональных элементов. С использованием обозначения Tr для следа, можно записать, что след оператора \mathbf{L} будет

$$Tr \mathbf{L} = \sum_i \langle i | \mathbf{L} | i \rangle,$$

что означает просто суммирование диагональных элементов матрицы \mathbf{L} .

След проекционного оператора равен 1. Это следует из того факта, что след эрмитова оператора равен сумме его собственных значений¹.

- Если сложить все проекционные операторы для базиса системы, то получится тождественный оператор:

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = I. \quad (7.11)$$

¹ Эрмитову матрицу \mathbf{M} можно диагонализировать, подвергнув трансформации $\mathbf{P}^\dagger \mathbf{M} \mathbf{P}$, где \mathbf{P} — унитарная матрица, столбцы которой представляют собой нормированные собственные векторы \mathbf{M} . След \mathbf{M} является инвариантом при таких преобразованиях. Мы не будем доказывать этот широко известный результат.

Наконец, вот важная теорема о проекционных операторах и средних значениях. Среднее значение любой наблюдаемой \mathbf{L} в состоянии $|\Psi\rangle$ дается уравнением

$$\langle \psi | \mathbf{L} | \psi \rangle = Tr |\psi\rangle \langle \psi| \mathbf{L}. \quad (7.12)$$

Вот шаги доказательства этого утверждения. Выберите любой базис $|i\rangle$. Затем, используя определение *следа*, запишите

$$Tr |\psi\rangle \langle \psi| \mathbf{L} = \sum_i \langle i | \psi \rangle \langle \psi | \mathbf{L} | i \rangle.$$

Два множителя под знаком суммы — это просто числа, так что можно поменять их порядок:

$$Tr |\psi\rangle \langle \psi| \mathbf{L} = \sum_i \langle \psi | \mathbf{L} | i \rangle \langle i | \psi \rangle.$$

Вынесем множители из-под знака суммы и, используя равенство $\sum |i\rangle \langle i| = I$, получим

$$Tr |\psi\rangle \langle \psi| \mathbf{L} = \langle \psi | \mathbf{L} | \psi \rangle.$$

Правая часть — это как раз среднее значение \mathbf{L} .

7.3. Матрицы плотности: новый инструмент

До сих пор мы учились делать предсказания относительно системы, зная ее точное квантовое состояние. Но гораздо чаще мы не имеем полной информации о ее состоянии. Например, допустим, Алиса подготовила спин, используя прибор, ориентированный вдоль

некоторой оси. Она передает этот спин Бобу, но не говорит ему, вдоль какой оси был ориентирован прибор. Возможно, она дает ему частичную информацию, вроде того факта, что это либо ось z , либо ось x , но отказывается сообщить что-то большее. Что делать Бобу? Как ему использовать эту информацию для предсказаний?

Боб рассуждает следующим образом: если Алиса приготовила спин в состоянии $|\Psi\rangle$, то среднее значение любой наблюдаемой \mathbf{L} будет

$$\text{Tr } |\Psi\rangle \langle \Psi| \mathbf{L} = \langle \Psi | \mathbf{L} | \Psi \rangle.$$

С другой стороны, если Алиса приготовила спин в состоянии $|\varphi\rangle$, то среднее значение \mathbf{L} будет

$$\text{Tr } |\varphi\rangle \langle \varphi| \mathbf{L} = \langle \varphi | \mathbf{L} | \varphi \rangle.$$

Как быть, если имеется 50-процентная вероятность, что приготовлено состояние $|\Psi\rangle$, и 50-процентная вероятность, что приготовлено состояние $|\varphi\rangle$? Очевидно, что среднее значение будет

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} |\psi\rangle \langle \psi| \mathbf{L} + \frac{1}{2} \text{Tr} |\varphi\rangle \langle \varphi| \mathbf{L}.$$

Все, что мы делаем, — это осредняем состояния, приготовленные Алисой, по незнанию Боба.

Но теперь мы можем объединить эти члены в одно выражение, определив матрицу плотности ρ , которая кодирует знание Боба. В данном случае матрица плот-

ности — это половина проекционного оператора на $|\varphi\rangle$ плюс половина проекционного оператора на $|\Psi\rangle$:

$$\rho = \frac{1}{2}|\psi\rangle\langle\psi| + \frac{1}{2}|\varphi\rangle\langle\varphi|.$$

Тем самым мы упаковали всё знание Боба о системе в один оператор ρ . Теперь правило вычисления средних значений становится очень простым:

$$\langle L \rangle = Tr \rho L. \quad (7.13)$$

Это выражение можно обобщить. Допустим, Алиса говорит Бобу, что она приготовила одно из нескольких состояний — назовем их $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle$ и так далее. Более того, она задала вероятности P_1, P_2, P_3, \dots для каждого из этих состояний. Боб по-прежнему может упаковать все свое знание в матрицу плотности:

$$\rho = P_1|\varphi_1\rangle\langle\varphi_1| + P_2|\varphi_2\rangle\langle\varphi_2| + P_3|\varphi_3\rangle\langle\varphi_3| + \dots.$$

Далее он может использовать все то же правило (7.13) для вычисления среднего значения.

Когда матрица плотности соответствует единственному состоянию, то это проекционный оператор, который проецирует на данное состояние. В таком случае мы говорим, что состояние является *чистым*. Чистое состояние дает максимальное знание, которым Боб может располагать о квантовой системе. Но в общем случае матрица плотности — это смесь проекционных операторов. Мы тогда говорим, что матрица плотности представляет *смешанное* состояние.

Я использую термин *матрица плотности*, но, строго говоря, ρ — это оператор. Он становится матрицей, только когда выбран базис. Допустим, мы выбрали базис $|a\rangle$. Матрица плотности — это просто матрица, представляющая ρ по отношению к этому базису:

$$\rho_{aa'} = \langle a | \rho | a' \rangle.$$

Если $L_{a',a}$ — матричное представление \mathbf{L} , то (7.13) приобретает форму

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_{a,a'} L_{a',a} \rho_{a,a'}. \quad (7.14)$$

7.4. Запутанность и матрицы плотности

В классической физике тоже есть понятие чистых и смешанных состояний, хотя они так и не называются. Просто для иллюстрации рассмотрим систему из двух частиц, движущихся вдоль прямой линии. Согласно законам классической механики, можно вычислить орбиты этих частиц, если известны значения их координат (x_1 и x_2) и импульсов (p_1 и p_2) в определенный момент времени. Состояние системы, таким образом, задается четырьмя числами: x_1 , x_2 , p_1 и p_2 . Если известны эти четыре числа, то наше описание системы из двух частиц является настолько полным, насколько это возможно: больше о ней узнать нечего. Назовем это чистым классическим состоянием.

Часто, однако, мы не знаем состояние точно, а обладаем лишь вероятностной информацией. Так информация может быть задана плотностью вероятности

$$\rho(x_1, x_2, p_1, p_2).$$

Классическое чистое состояние — это просто особый случай плотности вероятности, в котором ρ имеет ненулевое значение только в одной точке. Но в общем случае ρ будет размазанным, и тогда мы будем говорить о классическом смешанном состоянии¹. Когда ρ размазана, это означает, что наше знание о системе неполно. Чем сильнее она размазана, тем больше наше незнание.

Одно в этом примере должно быть совершенно очевидно: если вы знаете чистое состояние для объединенной двухчастичной системы, то вы знаете все о каждой частице. Другими словами, чистое состояние для двух *классических* частиц предполагает чистое состояние для каждой отдельной частицы.

Но именно это *неверно* для запутанной системы в квантовой механике. Состояние составной системы может быть абсолютно чистым, но каждая из ее составляющих должна описываться смешанным состоянием.

Возьмем систему, состоящую из двух частей *A* и *B*. Это могут быть два спина или любая другая составная

¹ Под размазанностью мы имеем в виду то, что $\rho(x_1, x_2, p_1, p_2)$ будет ненулевым для диапазона аргументов, содержащего более одного значения. Чем больше этот диапазон, тем сильнее размазана ρ .

система. В данном случае мы предполагаем, что Алиса имеет полную информацию о состоянии составной системы. Другими словами, она знает волновую функцию

$$\Psi(a, b).$$

В составной системе нет ничего, ускользнувшего от ее знания. При этом Алису не интересует B , но она хочет узнать как можно больше об A , не подглядывая за B . Она выбирает наблюдаемую \mathbf{L} , которая принадлежит A , и, когда действует, ничего не делает с B . Правило для вычисления среднего значения \mathbf{L}

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_{ab, a'b'} \psi^*(a'b') L_{a'b', ab} \psi(ab). \quad (7.15)$$

До сих пор все это имеет максимально общую форму. Однако если наблюдаемая \mathbf{L} связана только с A , она тривиально действует на индекс b , и выражение для среднего значения можно переписать так:

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_{a, b, a'} \psi^*(a'b) L_{a'a} \psi(ab). \quad (7.16)$$

Теперь Алиса может выразить все свое знание, по крайней мере в том, что относится к изучению A , в форме матрицы ρ :

$$\rho_{aa'} = \sum_b \psi^*(a'b) \psi(ab). \quad (7.17)$$

Удивительным образом уравнение (7.16) имеет в точности такую форму, как и (7.14) для среднего значения смешанного состояния. В действительности только в очень специальном случае сепарабельного состояния

ρ будет иметь вид проекционного оператора. Другими словами, несмотря на тот факт, что составная система описывается идеально чистым состоянием, подсистема A должна описываться смешанным состоянием.

Есть тонкий момент, касающийся нашей системы обозначений для матрицы плотности, на который стоит обратить внимание: в уравнении (7.17) правый индекс ρ , то есть индекс a' , соответствует комплексно сопряженному вектору состояния $\Psi^*(a'b)$ при суммировании. Это следствие нашего соглашения

$$L_{aa'} = \langle a | \mathbf{L} | a' \rangle$$

об обозначении элементов матрицы оператора \mathbf{L} . Применяя это соглашение к

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|,$$

получаем

$$\rho_{aa'} = \langle a | \Psi \rangle \langle \Psi | a' \rangle$$

или

$$\rho_{aa'} = \Psi(a)\Psi^*(a').$$

7.5. Запутывание для двух спинов

Прежде чем вести вас дальше в мир запутанности, я дам вам простое определение и короткое упражнение для разогрева. Если у Алисы только один спин находится

в известном состоянии, ее матрица плотности определяется так:

$$\rho_{aa'} = \Psi^*(a')\Psi(a).$$

Это уравнение говорит, как вычислить элемент Алисиной матрицы плотности. Если мы придерживаемся знакомого нам базиса σ_z , каждый из индексов a и a' может принимать значения «вверх» и «вниз», так что у Алисы получается матрица плотности 2×2 .

УПРАЖНЕНИЕ 7.4

Вычислите матрицу плотности для

$$|\Psi\rangle = \alpha|u\rangle + \beta|d\rangle.$$

Ответ:

$$\Psi(u) = \alpha; \quad \Psi^*(u) = \alpha^*,$$

$$\Psi(d) = \beta; \quad \Psi^*(d) = \beta^*,$$

$$\rho_{a'a} = \begin{pmatrix} \alpha^*\alpha & \alpha^*\beta \\ \beta^*\alpha & \beta^*\beta \end{pmatrix}.$$

Теперь попробуйте подставить вместо α и β какие-нибудь числа. Не забудьте, что они должны быть отнормированы на 1. Например, $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}, \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Этот простой пример — хороший способ понять свойства матрицы плотности. Вы можете возвращаться к нему по мере того, как мы будем рассматривать более сложные примеры запутанности.

Допустим, мы знаем волновую функцию составного состояния, например

$$\Psi(a, b),$$

но нас интересует только Алисина подсистема. Другими словами, мы хотим отслеживать все, что может измерить Алиса. Надо ли вам знать всю волновую функцию? Или есть какой-то способ избавиться от переменных Боба? Ответ на последний вопрос — утвердительный; можно получить полное описание для Алисы в терминах матрицы плотности ρ .

Рассмотрим наблюдаемую \mathbf{L} Алисиной системы. Как и любая наблюдаемая, она может, конечно, быть представлена в виде матрицы:

$$L_{a'b', ab} = \langle a'b'|\mathbf{L}|ab\rangle.$$

Не забывайте, что для составной системы пара ab — это в действительности один индекс, указывающий базисный вектор.

Когда мы говорим, « \mathbf{L} — это наблюдаемая Алисы», мы подразумеваем, что \mathbf{L} никак не влияет на половину метки состояния, относящуюся к Бобу. Это накладывает некоторые ограничения на форму \mathbf{L} . Идея состоит в том, чтобы отфильтровать (приравнить нулю) любые

элементы матрицы L , которые заставляют меняться половину метки состояния, относящуюся к Бобу. Другими словами, L имеет специальный вид

$$L_{a'b',ab} = L_{a'a} \delta_{b'b}. \quad (7.18)$$

Это внешне простое уравнение требует некоторых пояснений, и вам может понадобиться вернуться к материалу по тензорным произведениям в компонентной форме, изложенному в интерлюдии о тензорных произведениях (раздел 6.1). В левой части этого уравнения стоит элемент матрицы 4×4 . Каждый из его двух индексов может принимать четыре различных значения: ii , id , du , dd . А что можно сказать о правой части? Матричный элемент $L_{a'b'}$ имеет два индекса, но каждый из них может принимать только два различных значения: i или d . Фактически буква L используется для обозначения двух различных матриц в разных частях уравнения (7.18).

На первый взгляд может показаться, будто мы приравниваем матрицу 4×4 и матрицу 2×2 , и это, конечно, было бы проблемой. Однако множитель $\delta_{b'b}$ все приводит в порядок. Член $L_{a'a} \delta_{b'b}$ является элементом тензорного произведения двух матриц 2×2 , а такое тензорное произведение как раз и есть матрица 4×4 .¹ Вот как следует понимать уравнение (7.18):

¹ Его также можно называть кронекеровским произведением, поскольку мы говорим о матрицах. Формальные различия для наших целей несущественны.

Матрицу $4 \times 4 L_{a'b',ab}$ можно представить как тензорное произведение двух матриц 2×2 : $L_{a'a}$ и $\delta_{b'b}$, где $\delta_{b'b}$ — эквивалент единичной матрицы 2×2 .

Теперь давайте вычислим среднее значение \mathbf{L} (в версии 4×4), используя всю технику работы с составными системами:

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Psi \rangle = \sum_{a,b,a',b'} \psi^*(a',b') L_{a'b',ab} \psi(a,b).$$

Как я предупреждал, получается множество индексов. Но все упрощается, если использовать специальную форму матрицы L . Множитель $\delta_{b'b}$ в уравнении (7.18) — дельта-символ Кронекера — отфильтровывает все элементы, которые меняют половину метки, относящуюся к Бобу, и оставляет все остальные нетронутыми. Он предписывает нам приравнять $b' = b$ и получить

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Psi \rangle = \sum_{a',b,a} \psi^*(a',b) L_{a',a} \psi(a,b). \quad (7.19)$$

На время забудем о суммировании по a и a' и сосредоточимся на суммировании по b . При этом мы встретимся с величиной

$$\rho_{a'a} = \sum_b \psi^*(a,b) \psi(a',b). \quad (7.20)$$

Эта матрица $\rho_{a'a}$ размером 2×2 является Алисиной матрицей плотности. Обратите внимание, что $\rho_{a'a}$ не зависит ни от какого b -индекса, поскольку по индексу b уже выполнено суммирование. Это в чистом виде функция Алисиных переменных a и a' . Фактически

мы сохранили обозначение b в этом уравнении только для того, чтобы легче было разбираться с примером из следующего раздела.

Уравнение (7.19) можно упростить, поставив $\rho_{a'a}$ из уравнения (7.20). Среднее значение L (в версии 2×2) выражается тогда так:

$$\langle L \rangle = \sum_{aa'} \rho_{a'a} L_{a,a'}. \quad (7.21)$$

Просуммировав по b , мы сжали матрицу 4×4 до матрицы 2×2 . В этом есть смысл. Мы ожидаем, что оператор, действующий на составную систему, должен быть матрицей 4×4 , и мы ожидаем, что Алисин оператор будет 2×2 .

Обратите внимание, что правая часть уравнения (7.21) является суммой диагональных элементов матрицы. Другими словами, это след матрицы ρL , который можно записать как

$$\langle L \rangle = Tr \rho L.$$

Урок состоит в следующем: для вычисления Алисиной матрицы плотности ρ нам нужно знать полную новую функцию, включая зависимость от переменных Боба. Но как только мы знаем ρ , можно забыть, откуда мы ее получили, и использовать ее для вычисления любых Алисиных наблюдаемых. В качестве простого примера можно использовать ρ для вычисления вероятности $P(a)$ того, что Алисина система останется в состоянии a ,

если выполнить измерение. Для определения $P(a)$ мы начнем с $P(a, b)$ — вероятности того, что составная система находится в состоянии $|ab\rangle$. Это просто:

$$P(a, b) = \Psi^*(a, b)\Psi(a, b).$$

По стандартным правилам для вероятности, если суммировать по b , получится вероятность для a :

$$P(a) = \sum_b \psi^*(a, b)\psi(a, b).$$

Это просто диагональный элемент матрицы плотности:

$$P(a) = \rho_{aa}. \quad (7.22)$$

Вот некоторые свойства матриц плотности.

- Матрицы плотности эрмитовы:

$$\rho_{aa'} = \rho^*_{a'a}.$$

- След матрицы плотности равен 1:

$$Tr(\rho) = 1.$$

Уравнение (7.22) должно помочь это понять, поскольку левая часть здесь является вероятностью.

- Все собственные значения матрицы плотности положительные числа в диапазоне от 0 до 1. Отсюда следует, что если одно из собственных чисел равно 1, то все остальные равны 0. Удастся ли вам интерпретировать этот результат?

- Для чистого состояния:

$$\rho^2 = \rho, \\ Tr(\rho^2) = 1.$$

- Для смешанного или запутанного состояния:

$$\rho^2 \neq \rho, \\ Tr(\rho^2) < 1.$$

Два последних свойства дают ясный математический способ различать чистые и смешанные состояния. Подсистема запутанного состояния (вроде Алисиной половины синглетного состояния) рассматривается как смешанное состояние.

Тут стоит немного задержаться, чтобы получше уяснить себе эти два свойства. Для упрощения предположим, что ρ — диагональная матрица, другими словами, все ее недиагональные элементы равны нулю. Это упрощение ничего нам не будет стоить, поскольку ρ — эрмитова, а эрмитовы матрицы, как мы уже выяснили, могут быть приведены к диагональной форме в некотором базисе¹. Возвести в квадрат диагональную матрицу очень просто: все, что нужно, это возвести в квадрат каждый ее отдельный элемент. Поскольку ρ представляет смешанное состояние и диагональные элементы ρ должны в сумме давать 1, никакой из диа-

¹ Как уже упоминалось в разделе 7.2, эрмитову матрицу M можно диагонализировать с помощью преобразования $P^\dagger M P$, где P — унитарная матрица, столбцы которой являются нормированными собственными векторами M .

гональных элементов ρ не может быть *равен 1*. В противном случае ρ представляла бы чистое состояние. Таким образом, ρ должна иметь как минимум два положительных диагональных элемента меньше 1. Возведя эти элементы в квадрат, мы получим новую матрицу ρ^2 , элементы которой еще меньше. Отсюда вытекают оба свойства ρ для смешанного состояния.

Прежде чем перейти к следующему упражнению, я напомню еще об одной вещи, относящейся к следу. Оказывается, след обладает множеством интересных математических свойств. Среди них одно из самых полезных состоит в том, что след произведения двух матриц не зависит от порядка их перемножения. Иначе говоря,

$$\text{Tr } AB = \text{Tr } BA,$$

даже если

$$AB \neq BA.$$

Я упоминаю об этом, поскольку иногда вам будет встречаться запись следа матрицы плотности в виде $\text{Tr } L\rho$ вместо $\text{Tr } \rho L$. Эти два выражения эквивалентны.

УПРАЖНЕНИЕ 7.5

а) Покажите, что

$$\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & b^2 \end{pmatrix}.$$

б) Теперь допустим, что

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/3 & 0 \\ 0 & 2/3 \end{pmatrix}.$$

Вычислите

$$\begin{aligned} \rho^2, \\ Tr(\rho), \\ Tr(\rho^2). \end{aligned}$$

в) Если ρ является матрицей плотности, представляет ли она чистое состояние или смешанное?

УПРАЖНЕНИЕ 7.6

Используйте уравнение (7.22) для демонстрации того, что если ρ является матрицей плотности, то

$$Tr(\rho) = 1.$$

7.6. Конкретный пример: вычисление Алисиной матрицы плотности

До сих пор обсуждение матриц плотности носило для некоторых читателей излишне абстрактный характер. Сейчас мы рассмотрим пример, который должен способствовать более отчетливому их пониманию. Вспомним

определение Алисиной матрицы плотности в уравнении (7.20):

$$\rho_{a'a} = \sum_b \psi^*(a, b) \psi(a', b). \quad (7.23)$$

Теперь рассмотрим вектор состояния

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle + |du\rangle).$$

Обратите внимание, что два базисных вектора взяты с коэффициентом $\frac{1}{\sqrt{2}}$, в то время как другие два имеют коэффициент ноль. Состояние нормировано, поскольку сумма квадратов коэффициентов равна 1. Также все 4 коэффициента оказались вещественными, что упрощает процесс комплексного сопряжения.

Вычислим Алисину матрицу плотности для этого состояния. Прежде всего для всех возможных a и b определим значения $\Psi(a, b)$. Напомню, что это просто коэффициенты при базисных векторах:

$$\psi(u, u) = 0,$$

$$\psi(u, d) = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$\psi(d, u) = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$\psi(d, d) = 0.$$

Далее, используем эти четыре уравнения для вычисления каждого элемента Алисиной матрицы плотности, выполняя суммирование по формуле (7.23). Раскрывая сумму, обратите внимание, что в выражении $\Psi^*(a, b)$

$\Psi(a', b)$ состояние Боба одинаково для обоих множителей. Мы отбросили все члены, которые не обладают этим свойством. В этом смысле «приравнивания b' и b при суммировании». Итак, раскрываем суммы:

$$\rho_{uu} = \psi^*(u,u)\psi(u,u) + \psi^*(u,d)\psi(u,d) = \frac{1}{2},$$

$$\rho_{du} = \psi^*(d,u)\psi(u,u) + \psi^*(d,d)\psi(u,d) = 0,$$

$$\rho_{ud} = \psi^*(u,u)\psi(d,u) + \psi^*(u,d)\psi(d,d) = 0,$$

$$\rho_{dd} = \psi^*(d,u)\psi(d,u) + \psi^*(d,d)\psi(d,d) = \frac{1}{2}.$$

Эти значения являются элементами матрицы 2×2 :

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.24)$$

След этой матрицы равен единице. Для матрицы плотности это годится¹.

УПРАЖНЕНИЕ 7.7

Примените уравнение (7.24) для вычисления ρ^2 . Каким образом этот результат подтверждает, что ρ представляет запутанное состояние? Вскоре мы откроем, что существуют другие способы проверки на запутанность.

¹ Арт — немного поэт, но он об этом даже не догадывается.

УПРАЖНЕНИЕ 7.8

Рассмотрите следующие состояния:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2}(|uu\rangle + |ud\rangle + |du\rangle + |dd\rangle),$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|uu\rangle + |dd\rangle),$$

$$|\psi_a\rangle = \frac{1}{5}(3|uu\rangle + 4|ud\rangle).$$

Для каждого из них вычислите матрицу плотности Алисы и матрицу плотности Боба. Проверьте их свойства.

7.7. Проверка на запутанность

Допустим, я задал вам волновую функцию

$$\Psi(a, b)$$

для составной системы S_{AB} . Как вы можете определить, является ли соответствующее состояние запутанным? Я говорю не об экспериментальной проверке, но о математической процедуре. С этим связан вопрос о том, существуют ли различные степени запутанности. И если существуют, то как их можно количественно охарактеризовать?

Запутанность — это квантовомеханическое обобщение корреляции. Другими словами, она указывает на то, что Алиса может кое-что узнать о половине системы

Боба, измеряя только свою собственную половину. На классическом примере в предыдущей лекции я проиллюстрировал эту идею корреляции с использованием монет. Если Алиса наблюдает монету, которую ей вручил Чарли, она не только знает, достался ей цент или десятицентовик, она также знает, какую монету получил Боб. Это экспериментальная сторона дела. Математическим указанием на корреляцию является то, что распределение вероятности $P(a, b)$ не раскладывается на множители (то есть не может быть представлено как в уравнении (6.3)). Всегда, когда распределение вероятности не факторизуется, существует ненулевая корреляция, описанная мною в неравенстве (6.2).

7.7.1. Корреляционный тест на запутанность

Пусть **A** — Алисина наблюдаемая, а **B** — наблюдаемая Боба. Корреляция между ними определяется через средние значения (также называемые ожидаемыми значениями) отдельных наблюдаемых и их произведения. Пусть

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{A} \rangle, \\ \langle \mathbf{B} \rangle, \\ \langle \mathbf{AB} \rangle —\end{aligned}$$

это средние значения. Корреляция $C(A, B)$ между **A** и **B** определяется как

$$C(A, B) = \langle \mathbf{AB} \rangle - \langle \mathbf{A} \rangle \langle \mathbf{B} \rangle.$$

УПРАЖНЕНИЕ 7.9

Взяв любую наблюдаемую Алисы A и наблюдаемую Боба B , покажите, что для сепарабельного состояния корреляция $C(A, B)$ равна нулю.

Из этого упражнения мы можем кое-что узнать о запутывании. Если система находится в состоянии, в котором можно обнаружить, что какие-либо две наблюдаемые A и B коррелированы (то есть $C(A, B) \neq 0$), то такое состояние является запутанным. Корреляции по определению лежат в диапазоне от -1 до $+1$. Эти предельные значения представляют собой наивысшие возможные корреляции — отрицательную и положительную. Чем больше абсолютная величина $C(A, B)$, тем более запутанным является состояние. Если $C(A, B) = 0$, то никакой корреляции (и никакого запутывания) нет.

7.7.2. Проверка матрицы плотности на запутанность

Для вычисления корреляций вам нужны знания об обеих — Бобе и Алисе — частях системы, наряду с волновой функцией всей системы. Но есть другой тест на запутанность, который требует знать только матрицу плотности Алисы (или Боба). Допустим, что $|\Psi\rangle$ является сепарабельным состоянием, причем множитель Боба — $|\varphi\rangle$, а множитель Алисы — $|\Psi\rangle$. Это значит, что

составная волновая функция также является произведением множителя Боба и множителя Алисы:

$$\Psi(a, b) = \Psi(a)\varphi(b).$$

Теперь выведем матрицу плотности Алисы. Воспользовавшись определением (7.20), получаем

$$\rho_{a'a} = \psi^*(a)\psi(a')\sum_b \varphi^*(b)\varphi(b).$$

Но если состояние Боба нормированное, то

$$\sum_b \varphi^*(b)\varphi(b) = 1,$$

что делает матрицу плотности Алисы исключительно простой:

$$\rho_{a'a} = \psi^*(a)\psi(a'). \quad (7.25)$$

Обратите внимание, что это выражение зависит только от Алисиных переменных. Возможно, не так уж и удивительно, что всё необходимое знание об Алисиной системе содержится в Алисиной волновой функции.

Теперь я собираюсь доказать ключевую теорему о собственных числах Алисиной матрицы плотности в предположении, что состояние системы сепарабельное. Это верно только для незапутанных состояний и служит для их идентификации. Теорема утверждает, что для любого сепарабельного состояния матрица плотности Алисы (или Боба) имеет ровно одно ненулевое собственное значение, и оно в точности

равно 1. Мы начнем доказательство теоремы с того, что запишем выражение для собственных значений матрицы ρ :

$$\sum_a \rho_{a'a} \alpha_a = \lambda \alpha_{a'}.$$

Другими словами, матрица ρ действует на вектор — столбец α , давая тот же самый вектор, умноженный на собственное число λ . Используя простую форму ρ из уравнения (7.25), можно записать

$$\psi(a') \sum_a \psi^*(a) \alpha_a = \lambda \alpha_{a'}. \quad (7.26)$$

Теперь можно заметить пару моментов. Прежде всего, величина

$$\sum_a \psi^*(a) \alpha_a$$

имеет вид внутреннего произведения. Если вектор-столбец α ортогонален Ψ , то левая часть уравнения (7.26) равна нулю. Такой вектор является собственным вектором ρ с собственным числом 0.

Если размерность Алисиного пространства состояний равна N_A , то существует $N_A - 1$ векторов, ортогональных Ψ . Каждый из них является собственным вектором ρ с собственным числом 0. Поэтому остается одно единственное возможное направление для собственного вектора с ненулевым собственным числом, а именно вектор $\Psi(a)$. Фактически если отставить $\alpha_a = \Psi(a)$, мы действительно обнаружим, что это собственный вектор ρ с собственным числом 1.

Резюмирую доказательство теоремы: если составная система Алисы и Боба находится в сепарабельном состоянии, то матрица плотности Алисы (или Боба) имеет одно и только одно собственное значение, равное 1, а все остальные равны нулю. Более того, собственный вектор с ненулевым собственным значением — это не что иное, как волновая функция Алисиной половины системы.

В этом случае Алисина система находится в чистом состоянии. Все Алисины наблюдения описываются так, как если бы Боба с его системой никогда не существовало, и система Алисы описывается волновой функцией $\Psi(a')$.

Полной противоположностью чистого состояния является *максимально запутанное* состояние. Это такое состояние составной системы, в котором ничего неизвестно о составляющих ее подсистемах, несмотря на наличие полного — насколько позволяет квантовая механика — описания системы в целом. Состояние $|sing\rangle$ — это максимально запутанное состояние.

Когда Алиса вычисляет свою матрицу плотности для максимально запутанного состояния, она обнаруживает нечто крайне разочаровывающее: матрица плотности пропорциональна единичной матрице. Все собственные значения равны между собой, и, поскольку, в сумме они дают единицу, каждое из них равно $1/N_A$. Другими словами,

$$\rho_{a'a} = \frac{1}{N_A} \delta_{a'a}. \quad (7.27)$$

Почему Алиса разочарована? Вернитесь к уравнению (7.22). Оно говорит, что вероятность для конкретного состояния α — это диагональный элемент ρ , но уравнение (7.27) говорит нам, что все эти вероятности равны между собой. Что может быть менее информативным, чем распределение вероятности, настолько бесструктурное, что даже все возможные исходы равновероятны?

Максимальное запутывание подразумевает полную потерю информации об Алисиной подсистеме для экспериментов, которые задействуют только эту подсистему. С другой стороны, это подразумевает сильную корреляцию между измерениями Алисы и Боба. Для синглетного состояния, если Алиса измерит любую компоненту своего спина, она автоматически узнает результат, который получил бы Боб, если бы он измерил ту же самую компоненту своего спина. Это именно такое знание, которого не бывает в сепарабельных состояниях.

Так что в каждом типе состояний одни вещи предсказуемы, а другие нет. В сепарабельном состоянии можно делать статистические предсказания об измерениях, выполняемых в каждой отдельной подсистеме, но Алисины измерения ничего не говорят о подсистеме Боба. С другой стороны, в максимально запутанном состоянии Алиса не может предсказать ничего относительно своих собственных измерений, но она очень

много знает о связи между ее результатами и результатами Боба.

7.8. Процесс измерения

Мы видели, что квантовые системы изменяются различными способами, которые выглядят взаимно несоставимыми: посредством унитарной эволюции между измерениями и путем коллапса волновой функции в момент, когда совершается измерение. Это обстоятельство привело к одной из самых напряженных дискуссий и множеству сбивающих с толку утверждений о так называемой реальности. Я собираюсь держаться подальше от этой полемики и поближе к фактам. Узнав о том, как работает квантовая механика, вы можете решить для себя, видите ли вы здесь какую-то проблему.

Начнем с замечания о том, что любое измерение затрагивает систему и прибор. Но если квантовая механика является непротиворечивой теорией, то должна быть возможность объединить систему и прибор в единую более крупную систему. Прибор \mathcal{A} — тот же, что мы использовали в самой первой лекции. В окошке прибора может быть три различных показания. Первое — пустое, представляющее нейтральное состояние прибора, до того как он вошел в контакт со спином. Два других показания — это два возможных исхода измерения: $+1$ и -1 .

Если прибор является квантовой системой (конечно, он должен ею быть), то он описывается пространством

состояний. В простейшем описании прибор имеет ровно три состояния: пустое состояние и два состояния с исходами измерений. Таким образом, базисные векторы для прибора

$$\begin{aligned} |b\rangle, \\ |+1\rangle, \\ |-1\rangle. \end{aligned}$$

Между тем базисные состояния спина можно представить обычными состояниями «вверх» и «вниз»:

$$\begin{aligned} |u\rangle, \\ |d\rangle. \end{aligned}$$

Из этих двух наборов базисных векторов мы можем построить составное пространство состояний (тензорное произведение), имеющее шесть базисных векторов

$$\begin{aligned} |u, b\rangle, \\ |u, +1\rangle, \\ |d, -1\rangle, \\ |d, b\rangle, \\ |d, +1\rangle, \\ |d, -1\rangle. \end{aligned}$$

Точный механизм того, что происходит, когда система встречается с прибором, может быть очень сложным, но мы свободно можем выдвинуть некоторое допущение о том, как будет развиваться объединенная система.

Пусть прибор начинает работу в пустом состоянии, а спин изначально находится в состоянии «вверх». После того как прибор взаимодействует со спином, конечное состояние системы (по нашему допущению) будет

$$|u, +1\rangle.$$

Другими словами, взаимодействие оставляет спин неизменным, но переводит прибор в состояние $+1$. Это можно записать в виде

$$|u, b\rangle \rightarrow |u, +1\rangle. \quad (7.28)$$

Аналогичным образом если спин находится в состоянии «вниз», тогда прибор переключится в состояние -1 :

$$|d, b\rangle \rightarrow |d, -1\rangle. \quad (7.29)$$

Так что, взглянув на прибор после его взаимодействия со спином, можно сказать, каким спин был первоначально. Теперь предположим, что первоначально спин был в более общем состоянии, а именно

$$\alpha_u|u\rangle + \alpha_d|d\rangle.$$

Если включить прибор в качестве части системы, то начальным состоянием будет

$$\alpha_u|u, b\rangle + \alpha_d|d, b\rangle. \quad (7.30)$$

Это начальное состояние — сепарабельное, а именно оно является произведением начального состояния спина

и пустого состояния прибора. Можете сами проверить, что это совершенно незапутанное состояние.

УПРАЖНЕНИЕ 7.10

Убедитесь, что вектор состояния (7.30) действительно представляет собой совершенно незапутанное состояние.

Поскольку мы знаем из формул (7.28) и (7.29), как изменяются отдельные множители в (7.30), легко можно определить конечное состояние:

$$\alpha_u|u, b\rangle + \alpha_d|d, b\rangle \rightarrow \alpha_u|u, +1\rangle + \alpha_d|d, -1\rangle.$$

Это состояние является запутанным. Фактически если $\alpha_u = -\alpha_d$, это будет максимально запутанное состояние. На деле кто-то может взглянуть на прибор и сразу сказать, каково спиновое состояние: если прибор показывает $+1$, значит, спин направлен «вверх», а если прибор показывает -1 , значит, спин направлен «вниз». Более того, вероятность того, что в итоге прибор покажет $+1$, равна

$$\alpha_u^* \alpha_u.$$

Это число представляет собой вероятность — она в точности такая же, как и исходная вероятность того, что спин направлен «вверх». В этом описании измерения нет места коллапсу волновой функции. Вместо него за

счет унитарной эволюции вектора состояния между прибором и системой возникает запутывание.

Единственная проблема состоит в том, что в некотором смысле мы просто отложили наше затруднение. Вряд ли нас удовлетворит утверждение о том, что прибор «знает» спиновое состояние, прежде чем экспериментатор, скажем Алиса, сможет взглянуть на его показания. И разве не правда, что когда она все-таки взглянет, то вызовет коллапс волновой функции составной системы? И да, и нет. Для всех Алисных целей — да; она придет к выводу, что прибор и спин находятся в одном из двух возможных состояний, и будет обращаться с ними соответственно.

Но теперь добавим в нашу картину Боба. До сих пор он не взаимодействовал со спином, прибором или Алисой. С его точки зрения, все эти три объекта образуют единую квантовую систему. Когда Алиса смотрит на прибор, никакого коллапса волновой функции не происходит. Вместо этого, как утверждает Боб, Алиса запутывается с остальными двумя компонентами системы.

Все это хорошо, но что происходит, когда Боб смотрит на Алису? Для своих задач он может считать, что вызывает коллапс волновой функции. Но ведь есть еще старый добрый Чарли...

Действительно ли последнее существо, которое смотрит на систему, вызывает коллапс волновой функ-

ции или оно просто запутывается с ней? И существует ли последний наблюдатель? Я не буду пытаться ответить на эти вопросы, но должно быть ясно, что квантовая механика представляет собой непротиворечивые исчисления вероятностей для определенного типа экспериментов, включающих систему и прибор. Мы пользуемся ею, и она работает, но пытаясь ставить вопросы о лежащей в ее основе «реальности», мы приходим в недоумение.

7.9. Запутывание и локальность

Нарушает ли квантовая механика локальность? Некоторые считают, что так оно и есть. Эйнштейн сетовал на «призрачное действие на расстоянии» (*spukhafte Fernwirkung*), которое, как он утверждал, предполагается квантовой механикой. А Джон Белл стал почти культовой фигурой, доказав, что квантовая механика является нелокальной.

С другой стороны, большинство физиков-теоретиков, особенно те из них, кто занимается квантовой теорией поля, которая вся пропитана запутанностью, обычно утверждают противоположное: квантовая механика при корректном использовании сохраняет локальность.

Проблема, конечно, состоит в том, какой смысл эти две группы вкладывают в понятие *локальности*. Начнем с того, как понимают этот термин специалисты по квантовой теории поля. С этой точки зрения локаль-

ность имеет лишь один смысл: невозможно послать сигнал быстрее скорости света. Я покажу вам, как квантовая механика гарантирует выполнение этого требования.

Для начала позвольте мне расширить определение *Алисиной системы из системы Боба*. До сих пор мы использовали термин *Алисина система* для обозначения системы, которую Алиса держит при себе и с которой может экспериментировать. До конца этого раздела я буду использовать этот термин несколько иначе: система Алисы состоит не только из некоторой системы, которой она владеет, но также из прибора, которым она пользуется, и даже из нее самой. То же самое, конечно, относится и к системе Боба. Базис кет-векторов

$$|a\rangle$$

описывает всё, с чем может взаимодействовать Алиса. Аналогичным образом кет-векторы

$$|b\rangle$$

описывают всё, с чем может взаимодействовать Боб. А тензорное произведение состояний

$$|ab\rangle$$

описывает объединение миров Алисы и Боба.

Мы будем предполагать, что Алиса и Боб некоторое время назад находились достаточно близко, чтобы взаимодействовать друг с другом, но сейчас Алиса находится

ся на альфе Центавра, а Боб в Пало-Альто. Волновая функция Алисы-Боба

$$\Psi(ab),$$

и она может быть запутанной. Алисино полное описание, включающее ее систему, ее прибор и ее саму, содержится в ее матрице плотности ρ :

$$\rho_{aa'} = \sum_b \psi^*(a'b) \psi(ab). \quad (7.31)$$

Рассмотрим следующий вопрос: может ли Боб со своей стороны сделать что-нибудь, немедленно изменяющее Алисину матрицу плотности? Имейте в виду, что Боб может делать лишь то, что позволяют ему законы квантовой механики. В частности, эволюция Боба, чем бы она ни была вызвана, должна быть унитарной. Другими словами, ее можно описать унитарной матрицей

$$\mathbf{U}_{bb'}.$$

Матрица \mathbf{U} представляет все, что происходит с системой Боба, независимо от того, выполняет ли Боб эксперимент. Она воздействует на волновую функцию и порождает новую волновую функцию, которую мы назовем «конечной» волновой функцией:

$$\psi_{final}(ab) = \sum_{b'} \mathbf{U}_{bb'} \psi(ab').$$

Можно также записать комплексное сопряжение этой волновой функции:

$$\psi_{final}^*(a'b) = \sum_{b''} \psi^*(a'b'') \mathbf{U}_{b''b}^\dagger.$$

Обратите внимание, что мы добавили штрихи к некоторым обозначениям, чтобы они не смешивались между собой на следующем шаге. Теперь вычислим новую Алисину матрицу плотности. Мы будем использовать уравнение (7.31), но заменим первоначальную волновую функцию конечной:

$$\rho_{aa'} = \sum_{b,b',b''} \psi^*(a'b'') \mathbf{U}_{b''b}^\dagger \mathbf{U}_{bb'} \psi(ab').$$

Здесь оказалось много индексов, но выкладки не так сложны, как это кажется. Посмотрите, как матрица \mathbf{U} входит в выражение

$$\mathbf{U}_{b''b}^\dagger \mathbf{U}_{bb'}.$$

Эта конструкция — просто матричное произведение $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U}$. Но вспомните, что \mathbf{U} унитарна. Это значит, что произведение $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U}$ является единичной матрицей $\delta_{b''b'}$. Как и прежде, это означает команду включать все члены, для которых $b'' = b'$, и игнорировать все остальные. С этим упрощением мы получаем

$$\rho_{aa'} = \sum_b \psi^*(a'b) \psi(ab).$$

Это в точности то же самое, что и уравнение (7.31). Другими словами, $\rho_{aa'}$ — *точно такая же, как была до воздействия \mathbf{U}* . Ничто, происходящее на конце Боба, не имеет немедленного влияния на Алисину матрицу плотности, даже если Боб и Алиса максимально запутаны. Это означает, что Алисино восприятие ее подсистемы (ее статистическая модель) остается в точности таким,

каким было. Этот замечательный результат может показаться неожиданным для максимально запутанной системы, но он также гарантирует, что невозможно послать сигнал быстрее скорости света.

7.10. Квантовая симуляция: введение в теорему Белла

Интересно, что унитарность играет важнейшую роль в том, чтобы гарантировать невозможность мгновенной передачи сигнала. Если бы U не была унитарной, конечная матрица плотности Алисы могла бы оказаться под влиянием Боба.

Что же в таком случае столь обеспокоило Эйнштейна, если он говорил о призрачном действии на расстоянии? Чтобы ответить на этот вопрос, важно понимать, что он и Белл говорили о совершенно ином понятии локальности. Для иллюстрации я придумал компьютерную игру. Эта игра пытается обмануть вас, заставив думать, будто бы внутри компьютера есть квантовый спин в магнитном поле. Вам предстоит экспериментировать для проверки этой возможности. Схема эксперимента изображена на рис. 7.1.

Вот как она работает: внутри компьютера в памяти хранятся два комплексных числа α_u и α_d , подчиняющихся обычному правилу нормировки

$$\alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d = 1.$$

В начале игры коэффициенты α инициализируются некоторыми значениями. Затем компьютер решает уравнение Шрёдингера и обновляет значения α в точности так, как если бы они были компонентами спинового вектора состояния.

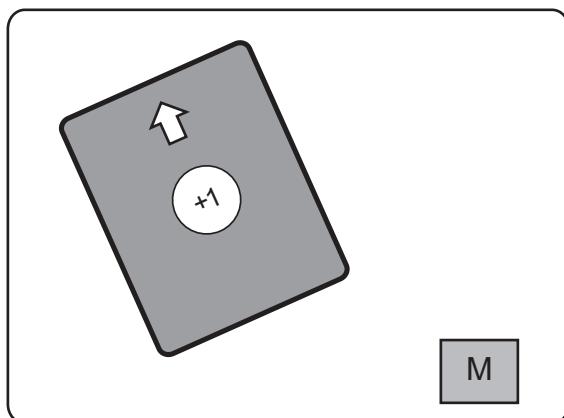


Рис. 7.1. Квантовый симулятор. На компьютерном экране изображен прибор, ориентацией которого управляет пользователь. Для простоты показана возможность ориентирования только в двух измерениях. Пользователь может нажать кнопку M, когда хочет произвести измерение спина (не показано). Между измерениями спиновое состояние изменяется в соответствии с уравнением Шрёдингера

Компьютер также помнит классическую трехмерную ориентацию прибора в виде двух углов или единичного вектора. С клавиатуры вы можете задавать эти углы и произвольно их менять. Еще один элемент, хранимый в памяти, — это значение (+1 или -1), пред-

ставляющий число, отображаемое прибором. В роли экспериментатора вы выбираете, как ориентировать ваш прибор. Имеется также кнопка M , которая приводит его в действие.

Последний элемент программы — генератор случайных чисел, который выдает результаты измерений $+1$ или -1 с вероятностями $\alpha_u^* \alpha_u$ и $\alpha_d^* \alpha_d$ соответственно. Не забывайте, что генераторы случайных чисел на самом деле не генераторы случайных чисел; это симуляторы случайных чисел. Они основаны на чисто классических детерминистских механизмах, использующих для генерации чисел такие вещи, как цифры числа π . Тем не менее они достаточно хороши, чтобы нас обмануть.

Игра начинается, и компьютер непрерывно обновляет значения α_u и α_d . Вы ждете столько, сколько хотите, а затем нажимаете кнопку M . Затем с помощью генератора случайных чисел игра выдает результат, который отображается на экране. Основываясь на этом результате, компьютер обновляет состояние, выполняя коллапс. Если результат — $+1$, то значение α_d сбрасывается в ноль, значение α_u устанавливается в единицу. Если результатом было -1 , то значение α_d становится единицей, а α_u сбрасывается в ноль. Далее уравнение Шредингера опять возобновляет свое действие, пока вы не нажмете M снова.

Будучи хорошим экспериментатором, вы проводите много тестов и набираете статистику, которую срав-

ниваете с квантовомеханическими предсказаниями. Если всё работает правильно, вы заключаете: квантовая механика корректно описывает то, что происходит в компьютере. Конечно, компьютер остается полностью классическим, но он без особых затруднений симулирует поведение квантового спина.

Далее, попробуем проделать то же самое с двумя компьютерами A и B , симулирующими поведение квантовых спинов. Если спины исходно находятся в сепарабельном состоянии и никогда не взаимодействует, мы можем просто играть в нашу игру на каждом из двух компьютеров без всякой коммуникации между ними. Но теперь Алиса, Боб и Чарли возвращаются помочь нам. Чарли, конечно, хочет создать запутанную пару. Он начинает с того, что соединяет два компьютера кабелем, и мы предполагаем, что кабель может передавать сигналы мгновенно. В памяти объединенного компьютера теперь хранятся четыре комплексных числа:

$$\alpha_{uu}, \alpha_{ud}, \alpha_{du}, \alpha_{dd},$$

и он обновляет эти числа в соответствии с уравнением Шрёдингера. На экране каждого компьютера отображается прибор. На Алисином экране — A , а на экране Боба — B . Каждый виртуальный прибор можно независимо ориентировать и независимо активировать, нажимая его собственную кнопку M . Когда нажата одна из кнопок M , объединенная память (с помощью

генератора случайных чисел) посыпает сигнал соответствующему прибору и генерирует результат.

Может ли это устройство симулировать квантовую механику двухспиновой системы? Да, может, — если только не отключать кабель, соединяющий компьютеры, и если он может передавать сообщения мгновенно. Но отключение компьютеров друг от друга нарушит симуляцию, если только система не находится и не остается все время в сепарабельном состоянии.

Можем ли мы это доказать? Ответ вновь утвердительный — и это самая суть теоремы Белла. Любая классическая симуляция квантовой механики, в которой делается попытка пространственно разделить приборы Алисы и Боба, нуждается в кабеле, который мгновенно связывает разделенные компьютеры с центральной памятью, где хранится и обновляется вектор состояния.

Но значит ли это, что информацию, нарушающую локальность, можно передавать по кабелю? Это было бы так, если бы Алиса, Боб и Чарли могли делать всё, на что способны нерелятивистские классические системы¹. Но если всё, что им позволено, — это симуляция квантовых операций, то ответ будет отрицательный. Как мы видели, квантовая механика не позволяет действием Боба влиять на Алисину матрицу плотности.

Эта проблема не является проблемой квантовой механики. Это проблема *симуляции* квантовой механики

¹ Другими словами, системы, которым позволено мгновенно передавать сигналы.

с помощью классического булевого компьютера. То есть суть теоремы Белла: классические компьютеры должны быть соединены кабелем для мгновенных сообщений, чтобы иметь возможность симулировать запутанность.

7.11. Запутанность: резюме

Из всех континтуитивных выводов, к которым нас вынуждает квантовая механика, принять запутанность, пожалуй,最难的 всего. Не существует классического аналога для систем, полное описание состояния которых не содержит информации об отдельных компонентах. Нелокальность, на удивление, трудно даже определить. Лучший способ освоиться с такими вещами — использовать математику. Далее приведена компактная сводка того, что мы узнали от запутанности. В частности, мы попытались четко обозначить разницу между запутанными, незапутанными и частично запутанными состояниями, сделав «шпаргалки» для трех характерных примеров — синглетного состояния, сепарабельного состояния и «почти синглетного» состояния. Мы надеемся, что такой формат поможет прояснить математические сходства и различия. Пожалуйста, потратьте некоторое время на анализ этого материала и выполнение упражнений, прежде чем двигаться дальше.

Шпаргалка по векторам состояния. Лист 1

Название: сепарабельное состояние (нет запутанности).

Востребовано для: предельной локальности, воплощения классических систем.

Описание: каждая система полностью охарактеризована. Нет корреляции между системами Алисы и Боба.

Вектор состояния: $\alpha_u\beta_u|uu\rangle + \alpha_u\beta_d|ud\rangle + \alpha_d\beta_u|du\rangle + \alpha_d\beta_d|dd\rangle$.

Нормировка: $\alpha_u^*\alpha_u + \alpha_d^*\alpha_d = 1$, $\beta_u^*\beta_u + \beta_d^*\beta_d = 1$.

Матрица плотности: Алисина матрица плотности имеет ровно одно ненулевое собственное значение, равное 1. Собственный вектор с ненулевым собственным значением — это волновая функция Алисиной подсистемы. То же самое относится и к Бобу.

Волновая функция: разлагается на множители: $\Psi(a)\varphi(b)$.

Средние значения:

$$\langle\sigma_x\rangle^2 + \langle\sigma_y\rangle^2 + \langle\sigma_z\rangle^2 = 1.$$

$$\langle\tau_x\rangle^2 + \langle\tau_y\rangle^2 + \langle\tau_z\rangle^2 = 1.$$

Корреляция: $\langle\sigma_z\tau_z\rangle - \langle\sigma_z\rangle\langle\tau_z\rangle = 0$.

Шпаргалка по векторам состояния. Лист 2

Название: синглетное состояние (максимальная запутанность).

Востребовано для: нелокальности, максимальной квантовой странности.

Описание: составная система как целое полностью охарактеризована. Нет никакой информации о подсистемах Алисы и Боба.

Вектор состояния: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle)$.

Нормировка: $\Psi_{uu}^* \Psi_{uu} + \Psi_{ud}^* \Psi_{ud} + \Psi_{du}^* \Psi_{du} + \Psi_{dd}^* \Psi_{dd} = 1$.

Матрица плотности: Полная составная система: $\rho^2 = \rho$ и $Tr \rho^2 = 1$.

Алисина подсистема: матрица плотности пропорциональна единичной матрице, имеющей равные собственные значения, дающие в сумме 1. Поэтому все исходы измерения равновероятны. $\rho^2 \neq \rho$ и $Tr \rho^2 < 1$.

Волновая функция: не разлагается на множители: $\Psi(a, b)$.

Средние значения:

$$\langle \sigma_z \rangle, \langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle = 0.$$

$$\langle \tau_z \rangle, \langle \tau_x \rangle, \langle \tau_y \rangle = 0.$$

$$\langle \tau_z \sigma_z \rangle, \langle \tau_x \sigma_x \rangle, \langle \tau_y \sigma_y \rangle = -1.$$

Корреляция: $\langle \sigma_z \tau_z \rangle - \langle \sigma_z \rangle \langle \tau_z \rangle = -1$.

УПРАЖНЕНИЕ 7.11

Вычислите Алисину матрицу плотности для σ_z в «почти синглетном» состоянии (см. лист 3).

Шпаргалка по векторам состояния. Лист 3

Название: «почти синглетное» состояние (частичная запутанность).

Востребовано для: неопределенности, общей нерешительности, трудности выбора «вверх» или «вниз»

Описание: есть некоторая информация о составной системе и некоторая — о каждой подсистеме.

Вектор состояния: $\sqrt{0,6}|ud\rangle - \sqrt{0,4}|du\rangle$.

Нормировка: $\Psi_{uu}^* \Psi_{uu} + \Psi_{ud}^* \Psi_{ud} + \Psi_{du}^* \Psi_{du} + \Psi_{dd}^* \Psi_{dd} = 1$.

Матрица плотности: Полная составная система: $\rho^2 = \rho$ и $Tr \rho^2 = 1$.

Алисина подсистема: $\rho^2 \neq \rho$ и $Tr \rho^2 < 1$.

Волновая функция: не разлагается на множители — $\Psi(a, b)$.

Средние значения:

$$\langle \sigma_z \rangle = 0,2; \langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle = 0.$$

$$\langle \tau_z \rangle = -0,2; \langle \tau_x \rangle, \langle \tau_u \rangle = 0.$$

$$\langle \tau_z \sigma_z \rangle = -1; \langle \tau_x \sigma_x \rangle = -2\sqrt{0,24}.$$

Корреляция: $\langle \tau_z \sigma_z \rangle - \langle \sigma_z \rangle \langle \tau_z \rangle = -0,96$ в данном примере. Для частично запутанных состояний в общем случае коэффициент корреляции лежит между -1 и $+1$, но не равен 0 .

УПРАЖНЕНИЕ 7.12

Проверьте численные значения на каждом листе шпаргалки.

Лекция 8. Частицы и волны

Арт и Ленни уже изрядно приняли запутанности.
Теперь они готовы к чему-нибудь полегче.

Ленни: Эй, Гильберт, нет ли у тебя чего-нибудь одномерного?

Гильберт: Дайте-ка посмотрю. На одномерность большой спрос под вечер. Иногда кончается.

Арт: Я бы взял что-нибудь классическое, если это все, что у вас есть.

Гильберт: Не здесь, приятель. А то у нас лицензию отберут.

Арт: Верно подмечено.

Для человека с улицы квантовая механика — это о том, что свет является частицами, а электроны — волнами. Но до сих пор я практически не упоминал о частицах, а единственным упоминанием волн была волновая функция, которая пока не имеет ничего общего с волна-

ми. Так когда же мы займемся «настоящей» квантовой механикой?

Ответ, конечно, состоит в том, что настоящая квантовая механика не столько о частицах и волнах, сколько о классических логических принципах, которые управляют поведением. Корпускулярно-волновой дуализм — это простое развитие тех идей, которые вы уже освоили, и мы убедимся в этом на данной лекции. Но прежде чем погрузиться в физику, я хочу разобрать кое-что из математики — немного старой, которая уже появлялась в предыдущих лекциях, немного новой.

8.1. Математическая интерлюдия: работа с непрерывными функциями

8.1.1. Обзор волновой функции

В этой лекции мы будем использовать язык волновых функций, поэтому давайте перед погружением сделаем небольшой обзор материала. Мы обсуждали в лекции 5 волновые функции абстрактных объектов, не объясняя, какое они имеют отношение к волнам или функциям. Прежде чем восполнить этот пробел, я напомню то, что мы обсуждали ранее.

Начнем с того, что выберем наблюдаемую L с собственными значениями λ и собственными векторами $|\lambda\rangle$. Пусть $|\Psi\rangle$ будет вектором состояния. Поскольку собственные векторы эрмитова оператора образуют

полный ортонормированный базис, вектор $|\Psi\rangle$ можно разложить по этому базису:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\lambda} \psi(\lambda) |\lambda\rangle. \quad (8.1)$$

Как вы помните из разделов 5.1.2 и 5.1.3, величины

$$\Psi(\lambda)$$

называются волновой функцией системы. Но заметьте: конкретная форма $\Psi(\lambda)$ зависит от конкретной наблюдаемой L , которую мы первоначально выбрали. Если выбрать другую наблюдаемую, волновая функция (наряду с базисными векторами и собственными значениями) окажется иной, *несмотря на то что мы по-прежнему говорим о том же самом состоянии*. Таким образом, мы должны сделать оговорку о том, что $\Psi(\lambda)$ является волновой функцией, связанной с $|\Psi\rangle$. Если быть точными, мы должны сказать, что $\Psi(\lambda)$ является волновой функцией в L -базисе. Если использовать свойства ортонормированности этого базиса векторов

$$\langle \lambda_i | \lambda_j \rangle = \delta_{ij},$$

то волновая функция в этом L -базисе может быть также задана с помощью внутренних произведений (или проекций) вектора состояния $|\Psi\rangle$ на собственные векторы $|\lambda\rangle$:

$$\Psi(\lambda) = \langle \lambda | \Psi \rangle.$$

О волновой функции можно думать двумя способами. Прежде всего, это набор компонент вектора состояния в конкретном базисе. Эти компоненты можно выписать в форме вектора столбца:

$$\begin{pmatrix} \psi(\lambda_1) \\ \psi(\lambda_2) \\ \psi(\lambda_3) \\ \psi(\lambda_4) \\ \psi(\lambda_5) \end{pmatrix}.$$

Другой способ думать о волновой функции — это рассматривать ее как функцию λ . Если вы задали любое допустимое значение λ , то функция $\Psi(\lambda)$ дает комплексное число. Можно, таким образом, сказать, что

$$\Psi(\lambda) —$$

это комплекснозначная функция дискретной переменной λ . При таком рассмотрении линейные операторы становятся операциями, которые применяются к функциям и дают новые функции.

И еще одно, последнее напоминание: вероятность того, что эксперимент даст результат λ , равна

$$P(\lambda) = \Psi^*(\lambda)\Psi(\lambda).$$

8.1.2. Функции и векторы

До сих пор системы, которые мы изучали, имели конечномерные векторы состояния. Например, простой спин описывается двумерным пространством состо-

яний. По этой причине наблюдаемые имели только конечное число возможных наблюдаемых значений. Но существуют более сложные наблюдаемые, которые могут иметь бесконечное число значений. Примером служит частица. Координаты частицы являются наблюдаемыми, но в отличие от спина координаты имеют бесконечное число возможных значений. Например, частица, движущаяся вдоль оси x , может находиться у любой вещественной отметки x . Другими словами, x является непрерывной бесконечной переменной. Когда наблюдаемые системы непрерывны, волновая функция становится полноценной функцией непрерывной переменной. Для применения квантовой механики к системам такого рода мы должны расширить представление о векторах так, чтобы включить в него функции.

Функции являются функциями, а векторы — векторами; они кажутся совершенно разными сущностями, так в каком же смысле функции являются векторами? Если вы думаете о векторах как о стрелках в трехмерном пространстве, то они, конечно, совсем не то же самое, что функции. Но если вы взглянете на векторы шире, как на математические объекты, удовлетворяющие некоторым постулатам, функции в действительности образуют векторное пространство. Такое векторное пространство часто называют гильбертовым пространством в честь математика Давида Гильберта.

Рассмотрим набор комплексных функций $\Psi(x)$ одной вещественной переменной x . Под комплексной

функцией я имею в виду, что каждому x она сопоставляет комплексное число $\Psi(x)$. С другой стороны, независимая переменная x является обычной вещественной переменной. Она может принимать любые вещественные значения от $-\infty$ до $+\infty$.

Теперь сформулируем точно, что мы имеем в виду, говоря, что «функции являются векторами». Это не поверхность аналогия или метафора. При некоторых ограничениях (к которым мы еще вернемся) такие функции, как $\Psi(x)$, удовлетворяют математическим аксиомам, которые определяют векторное пространство. Мы вскорь упоминали эту идею в разделе 1.9.2, а теперь используем ее в полную силу. Оглядываясь назад, на аксиомы комплексного векторного пространства (в разделе 1.9.1), мы видим, что комплексные функции удовлетворяют им всем.

1. Сумма любых двух функций является функцией.
2. Сложение функций коммутативно.
3. Сложение функций ассоциативно.
4. Существует единственная *нулевая функция* такая, что при ее сложении с любой функцией получается та же самая функция.
5. Для любой данной функции $\Psi(x)$ существует единственная функция $-\Psi(x)$, такая что $\Psi(x) + (-\Psi(x)) = 0$.
6. Умножение функции на любое комплексное число дает функцию и является линейным.

7. Соблюдается дистрибутивное свойство, означающее что

$$z[\Psi(x) + \varphi(x)] = z\Psi(x) + z\varphi(x), \\ [z + w]\Psi(x) = z\Psi(x) + w\Psi(x),$$

где z и w — комплексные числа.

Все это подразумевает, что мы можем идентифицировать функцию $\Psi(x)$ с кет-вектором $|\Psi\rangle$ в абстрактном векторном пространстве. Неудивительно, что мы также можем определить бра-векторы. Бра-вектор $\langle \Psi |$, соответствующий кету $|\Psi\rangle$, отождествляется с комплексно сопряженной функцией $\Psi^*(x)$.

Для эффективного использования этой идеи нам необходимо обобщить некоторые предметы из нашего набора математических инструментов. В предыдущих лекциях метки, которые идентифицировали волновые функции, были членами некоего конечного дискретного множества, например собственными значениями определенной наблюдаемой. Но теперь независимая переменная *непрерывна*. Среди прочего это означает, что мы не можем суммировать по ней, пользуясь обычными суммами. Я думаю, вы знаете, что надо делать. Вот ориентированные на функции заменители для трех наших векторных понятий, с двумя из которых вы уже знакомы.

- Суммы заменяются интегралами.
- Вероятности заменяются плотностями вероятности.
- Дельта-символ Кронекера заменяется дельта-функцией Дирака.

Присмотримся к этим инструментам внимательнее.

Суммы заменяются интегралами. Если мы по-настоящему хотели бы сохранить строгость, то начали бы с замены оси x дискретным набором точек, разделенных очень малыми интервалами ε , а затем перешли бы к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$. Понадобилось бы несколько страниц на то, чтобы обосновать каждый шаг. Но мы можем избежать этих хлопот с помощью нескольких интуитивных определений, таких как замена сумм интегралами. Схематически этот подход можно записать так:

$$\sum_i \rightarrow \int dx.$$

Например, если надо вычислить площадь под кривой, ось x делится на крошечные отрезки, затем складываются площади большого числа прямоугольников, в точности как это делается в элементарном математическом анализе. Когда мы даем отрезкам сжиматься до нулевого размера, сумма становится интегралом.

Рассмотрим бра $\langle \Psi |$ и кет $|\Psi \rangle$ и определим их внутреннее произведение. Очевидный способ сделать это состоит в замене суммирования в уравнении (1.2) на интегрирование. Мы определим внутреннее произведение так:

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \varphi(x) dx. \quad (8.2)$$

Вероятности заменяются плотностями вероятности.

Далее, мы отождествим

$$P(x) = \Psi^*(x) \Psi(x)$$

с плотностью вероятности для переменной x . Почему именно с плотностью вероятности, а не просто с вероятностью? Если x является непрерывной переменной, то вероятность, что она примет любое точно заданное значение, обычно равна нулю. Поэтому правильнее ставить вопрос так: какова вероятность того, что x лежит между двумя значениями $x = a$ и $x = b$? Плотность вероятности определяется так, что эта вероятность дается интегралом:

$$P(a, b) = \int_a^b P(x) dx = \int_a^b \psi^*(x) \psi(x) dx.$$

Поскольку полная вероятность должна быть 1, мы можем определить нормировку вектора как

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = 1. \quad (8.3)$$

Дельта-символ Кронекера заменяется дельта-функцией Дирака. До сих пор все было очень знакомо. Дельта функция Дирака — это что-то новенькое. Дельта-функция является аналогом дельта-символа Кронекера δ_{ij} , который по определению равен 0, если $i \neq j$, и 1, если $i = j$. Но его можно определить и по-другому. Рассмотрим любой вектор F_i в конечномерном пространстве. Легко заметить, что дельта-символ Кронекера удовлетворяет условию

$$\sum_j \delta_{ij} F_j = F_i.$$

Это связано с тем, что в данной сумме ненулевыми являются только члены с $j = i$. В ходе суммирования символ Кронекера отфильтровывает все компоненты F кро-

ме F_i . Очевидным обобщением этого будет определить новую функцию, которая обладает таким же фильтрующим свойством, когда используется под интегралом. Другими словами, нам нужна новая сущность

$$\delta(x - x'),$$

обладающая тем свойством, что для любой функции $F(x)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') F(x') dx' = F(x). \quad (8.4)$$

Уравнение (8.4) определяет новую сущность, называемую *дельта-функцией Дирака*, которая оказалась важнейшим инструментом в квантовой механике. Но несмотря на ее название, это в действительности не функция в обычном смысле. Она равна нулю везде, где $x \neq x'$, но когда $x = x'$ она обращается в бесконечность. Фактически она бесконечна ровно настолько, чтобы площадь под $\delta(x)$ была равна 1. Грубо говоря, эта функция отлична от нуля на бесконечно малом интервале ε , но на этом интервале имеет значение $1/\varepsilon$. Таким образом, площадь под ней равна 1, и, что важнее, она удовлетворяет уравнению (8.4). Функция

$$\frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-(nx)^2}$$

достаточно хорошо аппроксимирует дельта-функцию при очень больших значениях n . На рис. 8.1 показана эта оптимизация при увеличивающихся значениях n . Несмотря на то что мы остановились на $n = 10$, то есть очень небольшом значении, обратите внимание, что график уже стал очень узким и резким пиком.

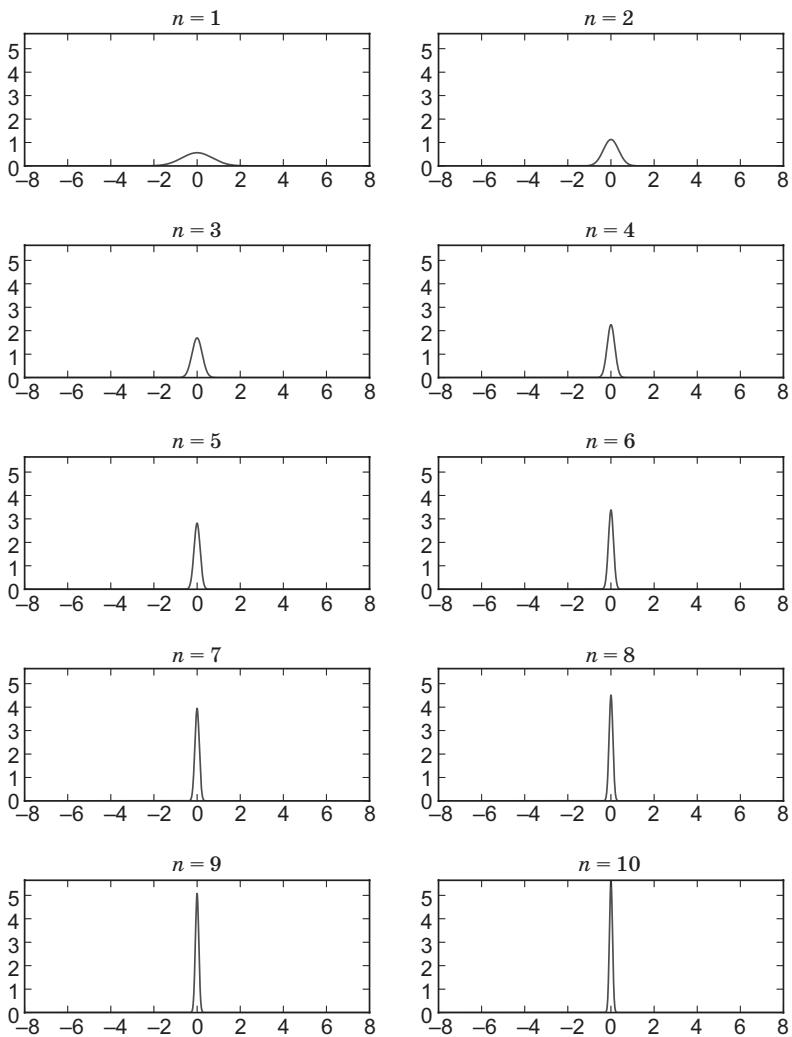


Рис. 8.1. Аппроксимации дельта-функции Дирака. Эти аппроксимации основываются на формуле $(n/\sqrt{\pi})e^{-(nx)^2}$ и нарисованы для последовательно возрастающих значений n

8.1.3. Интегрирование по частям

Прежде чем обсуждать линейные операторы, мы сделаем небольшой крюк, чтобы напомнить прием, называемый *интегрированием по частям*. Он очень прост и совершенно необходим для наших целей. Мы будем пользоваться им снова и снова. Допустим, у нас есть две функции F и G . Рассмотрим дифференциал их произведения FG . Мы можем записать

$$d(FG) = FdG + GdF$$

или

$$d(FG) - GdF = FdG.$$

Взяв определенный интеграл, получаем

$$\int_a^b d(FG) - \int_a^b GdF = \int_a^b FdG$$

или

$$FG \Big|_a^b - \int_a^b GdF = \int_a^b FdG.$$

Это стандартная формула, которую вы можете помнить из математического анализа. Но в квантовой механике пределы обычно распространяются на всю ось, и наша волновая функция для корректной нормировки должна стремиться к нулю на бесконечности. Поэтому первый член в данном выражении всегда будет равен нулю. Имея это в виду, можно использовать упрощенную версию интегрирования по частям:

$$\int_{-\infty}^{\infty} F \frac{dG}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dF}{dx} G dx.$$

Эта формула верна при условии, что F и G стремятся к нулю на бесконечности, так что граничный член обращается в ноль. Вы сильно облегчите себе жизнь, если просто запомните эту схему: перенос производной с одного множителя в подынтегральном выражении на другой стоит вам знака минус.

8.1.4. Линейные операторы

Бра и кеты — это лишь половина квантовой механики; другая половина — эта концепция линейных операторов и в особенности эрмитовых операторов. Отсюда возникает два вопроса:

- Что понимать под линейным оператором в пространстве функций?
- Каково условие эрмитовости для такого линейного оператора?

Понятие линейного оператора достаточно простое: это машина, которая действует на функцию и дает другую функцию. Когда она действует на сумму двух функций, то дает сумму двух отдельных результатов. Когда действует на функцию с комплексным множителем, она дает результат с тем же множителем. Другими словами, она (сюрприз!) линейна.

Рассмотрим некоторые примеры. Одна из простых операций, которую можно выполнить над функцией $\Psi(x)$, — это умножение ее на x . В результате мы полу-

чаем новую функцию $x\Psi(x)$, и легко убедиться, что эта операция линейна. Представим «умножение на x » как оператор \mathbf{X} . Тогда по определению

$$\mathbf{X} \Psi(x) = x\Psi(x). \quad (8.5)$$

Вот другой пример. Определим \mathbf{D} как оператор дифференцирования:

$$\mathbf{D} \psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (8.6)$$

УПРАЖНЕНИЕ 8.1

Докажите, что \mathbf{X} и \mathbf{D} — линейные операторы.

Конечно, это лишь крошечное подмножество всех линейных операторов, которые можно сконструировать, но мы скоро увидим, что \mathbf{X} и \mathbf{D} играют самую что ни на есть центральную роль в квантовой механике частиц.

Теперь рассмотрим свойство эрмитовости. Удобный способ выявить эрмитовость оператора — это рассмотреть его матричные элементы путем помещения его в сэндвич между бра и кетом. Поместить оператор \mathbf{L} в сэндвич можно двумя способами:

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Phi \rangle$$

или

$$\langle \Phi | \mathbf{L} | \Psi \rangle.$$

В общем случае не существует простой связи между этими двумя сэндвичами. Но в случае эрмитова оператора (для которого по определению $\mathbf{L}^\dagger = \mathbf{L}$) существует простое соотношение — эти два сэндвича являются комплексными сопряженными друг друга:

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Phi \rangle = \langle \Phi | \mathbf{L} | \Psi \rangle^*.$$

Посмотрим, являются ли операторы \mathbf{X} и \mathbf{D} эрмитовыми. Напомню, что

$$\mathbf{X} \Psi(x) = x\Psi(x),$$

и, используя формулу (8.2) для внутреннего произведения, можно записать

$$\langle \Psi | \mathbf{X} | \Phi \rangle = \int \psi^*(x) x \varphi(x) dx.$$

и

$$\langle \Phi | \mathbf{X} | \Psi \rangle = \int \varphi^*(x) x \psi(x) dx.$$

Поскольку x — вещественное число, нетрудно понять, что эти два интеграла являются комплексными сопряжениями друг для друга, а значит, оператор \mathbf{X} — эрмитов.

А что можно сказать об операторе \mathbf{D} ? В этом случае два сэндвича будут иметь вид

$$\langle \Psi | \mathbf{D} | \Phi \rangle = \int \psi^*(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} dx \quad (8.7)$$

и

$$\langle \Phi | \mathbf{D} | \Psi \rangle = \int \varphi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx. \quad (8.8)$$

Для определения, является ли \mathbf{D} эрмитовым, нам необходимо сравнить эти два интеграла и проверить, являются ли они комплексными сопряжениями друг друга. В данной форме сделать это довольно трудно. Хитрость состоит в том, чтобы взять второй интеграл по частям. Как уже говорилось, интегрирование по частям позволяет переносить производную с одного множителя в подынтегральном выражении на другой при условии, что одновременно меняется знак. Таким образом, интеграл в уравнении (8.8) можно переписать в виде

$$\langle \Phi | \mathbf{D} | \Psi \rangle = - \int \psi(x) \frac{d\varphi^*(x)}{dx} dx. \quad (8.9)$$

Теперь нужно просто сравнить выражения в уравнениях (8.7) и (8.9), что оказывается совсем не сложно. Из-за знака «минус» ясно, что они определенно *не* являются комплексными сопряжениями друг друга. Вместо этого их связь выражается формулой

$$\langle \Psi | \mathbf{D} | \Phi \rangle = \langle \Phi | \mathbf{D} | \Psi \rangle^*,$$

которая диаметрально противоположна тому, что нам надо. В отличие от оператора $\mathbf{X}\mathbf{D}$ не является эрмитовым. Вместо этого он удовлетворяет соотношению

$$\mathbf{D}^\dagger = -\mathbf{D}.$$

Оператор, обладающий таким свойством, называют *антиэрмитовым*.

Хотя антиэрмитовы и эрмитовы операторы противоположны друг другу, перейти от одного к другому очень легко. Все что нужно — это умножить на мнимое число

i или $-i$. Таким образом, мы можем использовать \mathbf{D} для конструирования оператора, который является эрмитовым, а именно

$$-i\hbar\mathbf{D}.$$

Если посмотреть, как действует этот новый эрмитов оператор на волновые функции, то мы обнаружим, что

$$-i\hbar\mathbf{D}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (8.10)$$

Запомните эту формулу. Скоро она станет играть ведущую роль в определении очень важного свойства частиц — их импульса.

8.2. Состояние частицы

В классической механике «состояние системы» означает все, что нужно знать, чтобы предсказать будущее системы, если даны действующие на нее силы. Это, конечно, означает положение всех частиц, составляющих систему, а также импульсы этих частиц. В классическом подходе мгновенные координаты и импульсы — это совершенно независимые переменные. Например, для частицы с массой m , движущейся в одном измерении вдоль оси x , мгновенное состояние системы описывается парой (x, p) . Координата x — это положение частицы, а $p = m\dot{x}$ — ее импульс. Взятые вместе, эти две переменные задают фазовое пространство системы. Если мы знаем силу, действующую на частицу, как

функцию ее положения, уравнения Гамильтона позволяют вычислить ее положение и импульс в любой последующий момент. Они определяют течения в фазовом пространстве.

С учетом этого можно предположить, что квантовое состояние частицы будет натянуто на базисные состояния, обозначенные как координата и импульс:

$$|x, p\rangle.$$

Волновая функция тогда оказалась бы функцией обеих переменных:

$$\Psi(x, p) = \langle x, p | \Psi \rangle.$$

Но это не так. Мы уже видели, что вещи, которые в классической физике можно знать одновременно, в квантовой физике не всегда могут быть определены вместе. Примером могут служить разные компоненты спина, скажем σ_z и σ_x . Обе эти компоненты нельзя знать одновременно; поэтому невозможно и состояние, в котором заданы обе эти компоненты. То же самое верно и в отношении x и p : задание обоих значений — это перебор. Говорим ли мы о спинах (σ_z , σ_x) или о координатах и импульсах (x , p), их одновременная неизмеримость является надежно установленным экспериментальным фактом.

Что в таком случае мы можем знать о частице на оси x , если не x и p ? Ответ: x или p ; математически операторы координаты и импульса не коммутируют

между собой. Но я подчеркиваю, что это нельзя было сказать заранее; это сухой остаток многих десятилетий экспериментальных наблюдений.

Если координата частицы является наблюдаемой, то должен существовать связанный с ней эрмитов оператор. Очевидным кандидатом является оператор \mathbf{X} . Первый шаг к пониманию фундаментальный связи между интуитивным представлением о положении и математическим оператором \mathbf{X} — это определение собственных векторов и собственных чисел \mathbf{X} . Собственные числа — это возможные значения координаты, которые могут наблюдаться, а собственные векторы представляют состояния с определенным положением.

8.2.1. Собственные значения и собственные векторы координаты

Естественный следующий вопрос: каковы возможные исходы измерения \mathbf{X} и каковы состояния, в которых оно дает определенное (предсказуемое) значение? Другими словами, каковы его собственные значения и собственные векторы? Уравнение для собственных значений \mathbf{X} выглядит так:

$$\mathbf{X}|\Psi\rangle = x_0|\Psi\rangle,$$

где собственное значение обозначено x_0 . На языке волновых функций это уравнение превращается в

$$x\Psi(x) = x_0\Psi(x). \quad (8.11)$$

Это последнее уравнение выглядит странно. Как может x , умноженное на функцию, быть пропорционально той же функции? На первый взгляд это кажется невозможным. Но разберемся внимательно. Уравнение (8.11) можно переписать в виде

$$(x - x_0)\Psi(x) = 0.$$

Конечно, если произведение равно нулю, то по крайней мере один из множителей должен быть нулем. Но другие множители могут отличаться от нуля. Таким образом, если $x \neq x_0$, то $\Psi(x) = 0$. Это очень сильное условие. Оно говорит, что для данного собственного значения x_0 функция $\Psi(x)$ может быть ненулевой только в одной точке, именно в

$$x = x_0.$$

Для обычной непрерывной функции это смертельное условие: ни одна разумная функции не может быть равна нулю везде за исключением одной точки и быть ненулевой в этой точке. Но как раз таковы свойства дираковской дельта-функции

$$\delta(x - x_0).$$

Очевидно в таком случае, что каждое вещественное число x_0 является собственным значением \mathbf{X} , и соответствующие собственные векторы — это функции (их часто называют *собственными функциями*), беско-

нечно сконцентрированные на $x = x_0$. Теперь все ясно: волновая функция

$$\Psi(x) = \delta(x - x_0)$$

представляет состояния, в которых частица находится в точке x_0 на оси x .

Конечно, это весьма глубокомысленно, что волновая функция представляет частицу, о которой известно, что она находится в точке x_0 , нулем везде, за исключением x_0 . Как бы еще это могло быть? И все же приятно видеть, что математика здесь подтверждает интуицию.

Рассмотрим внутреннее произведение состояния $|\Psi\rangle$ на собственное значение координаты $|x_0\rangle$:

$$\langle x_0 | \Psi \rangle.$$

Пользуясь уравнением (8.2), получаем

$$\langle x_0 | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) \psi(x) dx.$$

По определению дельта-функции, данному в формуле (8.4), можно определить значение этого интеграла:

$$\langle x_0 | \Psi \rangle = \Psi(x_0). \quad (8.12)$$

Поскольку оно истинно для любого x_0 , мы можем отбросить индекс и записать уравнение в общем виде

$$\langle x | \Psi \rangle = \Psi(x). \quad (8.13)$$

Другими словами, волновая функция $\Psi(x)$ частицы, движущейся вдоль направления x , — это проекция вектора состояния $|\Psi\rangle$ на собственные векторы координаты. Мы также говорим о $\Psi(x)$ как о *волновой функции в координатном представлении*.

8.2.2. Импульс и его собственные векторы

Положение — интуитивно ясная вещь; импульс — не настолько, особенно в квантовой механике. Лишь позднее мы увидим связь между оператором, который отождествляется с импульсом, и знакомым классическим представлением о массе, умноженной на скорость. Но, поверьте мне, мы установим эту связь.

Пока будем полагаться на абстрактную математику. Оператор импульса в квантовой механике обозначается \mathbf{P} , и он определяется через оператор $-i\mathbf{D}$:

$$-i\mathbf{D} = -i \frac{d}{dx}.$$

Как мы уже видели ранее в уравнении (8.10), нам необходим множитель $-i$, чтобы сделать этот оператор эрмитовым.

Можно было бы просто определить \mathbf{P} как $-i\mathbf{D}$, но если мы так сделаем, то столкнемся с проблемой позднее, когда станем увязывать эти идеи с классической физикой. Причина должна быть ясна — это несоответствие размерностей. В классической физике единица импульса — это масса, умноженная на скорость, то есть масса, умноженная на длину и деленная на время

(ML/T) . С другой стороны, оператор \mathbf{D} имеет размерность обратной длины $1/L$. Избавиться от этого несогласования позволяет постоянная Планка \hbar , которая имеет размерность ML^2/T . Таким образом, правильное соотношение между \mathbf{P} и \mathbf{D} —

$$\mathbf{P} = -i\hbar\mathbf{D} \quad (8.14)$$

или, через его действие на волновые функции,

$$\mathbf{P}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (8.15)$$

В квантовой физике часто используют единицы, в которых \hbar в точности равна 1, и это позволяет упростить уравнения. Но мы не будем этого делать, несмотря на всю привлекательность такого приема.

Определим собственные векторы и собственные значения \mathbf{P} . Уравнения для собственных значений в абстрактной векторной форме

$$\mathbf{P}|\Psi\rangle = p|\Psi\rangle, \quad (8.16)$$

где буквой p обозначено собственное значение \mathbf{P} . Уравнение (8.16) можно также выразить через волновые функции. Воспользуемся тождеством

$$\mathbf{P} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

и запишем уравнение для собственных значений в виде

$$-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = p\psi(x)$$

или

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{ip}{\hbar} \psi(x).$$

С уравнением такого типа мы уже имели дело прежде. Его решение имеет вид экспоненциальной функции:

$$\psi_p(x) = A e^{\frac{ipx}{\hbar}}.$$

Индекс p просто напоминает, что $\Psi_p(x)$ — это собственный вектор оператора P с определенным собственным значением p . Это функция x , но она помечена собственным значением P .

Константа A перед экспонентой не определяется из уравнения для собственных значений. Тут нет ничего нового; уравнения для собственных значений никогда не говорят нам, как нормируется волновая функция в целом. Как правило, мы определяем эту константу, требуя, чтобы волновая функция была нормирована на единичную вероятность. Пример тому можно найти, вернувшись назад в раздел 2.3, где мы определяли собственный вектор x -компоненты спина:

$$|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle.$$

Множитель $1/\sqrt{2}$ здесь обеспечивает равенство совокупной вероятности 1.

Нормировка собственных векторов P — более тонкая операция, но ее результат прост. Определить множитель A — лишь не намного сложнее, чем в случае спина. Чтобы сэкономить время, я скажу вам ответ и потом

предоставлю возможность самостоятельно его доказать.
Правильный ответ: $A = 1/\sqrt{2\pi}$. Итак,

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}. \quad (8.17)$$

Из уравнений (8.13) и (8.17) следует кое-что интересное. Внутреннее произведение собственного вектора координаты $|x\rangle$ и собственного вектора импульса $|p\rangle$ имеет очень простую симметричную форму:

$$\begin{aligned} \langle x|p\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}, \\ \langle p|x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Второе уравнение — это просто комплексно сопряженное первое. В этом результате легко убедиться, если помнить, что $|x\rangle$ представляет собой дельта-функцию. Прежде чем двигаться дальше, я хотел бы отметить два важных момента.

1. Уравнение (8.17) представляет собственную функцию импульса в координатном базисе. Другими словами, хотя она и представляет собственное состояние импульса, она является функцией x , а не явной функцией p .
2. Я использую букву Ψ для обозначения собственных состояний как координаты, так и импульса. Математики могут не одобрить использование одного и того же обозначения для двух разных функций, но физики делают так постоянно. $\Psi(x)$ — это просто

общий символ для любой функции, которую нам довелось обсуждать.

На этой ключевой точке мы начинаем постепенно понимать, почему волновая функция называется волновой функцией. Обратите внимание, что собственные функции (волновые функции, представляющие собственные векторы) оператора импульса имеют формулу волн — синусоид и косинусоид, если быть точными. Фактически мы сейчас видим один из самых фундаментальных аспектов корпускулярно-волнового дуализма квантовой механики. Длина волны функции

$$e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

дается выражением

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p},$$

поскольку значение функции не меняется, если добавить $\frac{2\pi\hbar}{p}$ к переменной x :

$$e^{\frac{ip(x + \frac{2\pi\hbar}{p})}{\hbar}} = e^{\frac{ipx}{\hbar}} e^{2\pi i} = e^{\frac{ipx}{\hbar}}.$$

Сделаем небольшую паузу для обсуждения важности этой связи между импульсом и длиной волны. Это не просто важно: во многих отношениях данная взаимосвязь определила физику XX века. На протяжении последних ста лет физики в основном были заняты открытием законов микромира. Это означало понимание того, как объекты строятся из более мелких объектов.

Примеры хорошо известны: молекулы состоят из атомов; атомы — из электронов и ядер; ядра — из протонов и нейтронов. Последние субъядерные частицы состоят из夸ков и глюонов. И эта игра продолжается, по мере того как ученые ищут все меньшие и все глубже спрятанные сущности.

Все эти объекты слишком малы, чтобы увидеть их в лучшие оптические микроскопы, не говоря уже о не-вооруженном глазе. Причина не просто в том, что наши глаза недостаточно чувствительны. Важнее тот факт, что глаза и оптические микроскопы чувствительны к видимому спектру, охватывающему длины волн, которые в несколько тысяч раз длиннее, чем размеры атома. Как правило, нельзя разглядеть объекты, намного меньшие длины волны, с помощью которой на них смотрят. По этой причине история физики двадцатого столетия была во многом погоней за все более и более короткими волнами — световыми или любого другого типа. В лекции 10 мы выясним, что свет определенной длины волны состоит из фотонов, импульс которых связан с длиной волны именно этим соотношением:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Отсюда следует, что чем меньше размеры изучаемых объектов, тем больше импульс фотонов (или других объектов), которые для этого нужны. Большой импульс неизбежно означает большую энергию. Именно по этой причине для открытия микроскопических свойств материи требуются все более мощные ускорители частиц.

8.3. Преобразование Фурье и импульсный базис

Волновая функция $\Psi(x)$ играет важную роль в определении вероятности обнаружить частицу в положении x :

$$P(x) = \Psi^*(x)\Psi(x).$$

Как мы увидим, ни один эксперимент не может определить одновременно положение и импульс частицы. Но если ничего не знать о положении, то импульс можно измерить точно. Эта ситуация совершенно аналогична той, что имела место в x и z случае с компонентами спина. Каждое из значений можно измерить, но не оба вместе.

Какова вероятность того, что частица имеет импульс p , если мы решим его измерить? Ответ является прямым обобщением принципов, зафиксированных в лекции 3. Вероятность того, что измерение импульса даст нам величину p , равна

$$P(p) = |\langle \mathbf{P} | \Psi \rangle|^2. \quad (8.19)$$

Выражение $\langle \mathbf{P} | \Psi \rangle$ называется волновой функцией $|\Psi\rangle$ в *импульсном представлении*. Естественно, это функция от p , и она обозначается новым символом:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle \mathbf{P} | \Psi \rangle. \quad (8.20)$$

Теперь ясно, что существует два способа представления вектора состояния. Один — в координатном базисе, а другой — в импульсном. Обе волновые функции —

координатная волновая функция $\Psi(x)$ и импульсная волновая функция $\tilde{\psi}(p)$ — представляют один и тот же вектор состояния $|\Psi\rangle$. Отсюда следует, что должно существовать преобразование между ними такое, что если известна $\Psi(x)$, преобразование дает $\tilde{\psi}(p)$, и наоборот. Фактически эти два представления являются Фурье-преобразованиями друг друга.

8.3.1. Разложение единицы

Теперь мы готовы увидеть силу дираковских бра-кет-обозначений в упрощении сложных вещей. Прежде всего вспомним важную идею из предыдущих лекций. Допустим, мы определили ортонормированный базис состояний с помощью собственных векторов некой эрмитовой наблюдаемой. Обозначим эти базисные векторы $|i\rangle$. В лекции 7 я рассказывал об одном очень полезном приеме, и теперь мы увидим, насколько он в действительности полезен. Он называется *разложением единицы*. Прием, представленный в уравнении (7.11), состоит в записи тождественного (единичного) оператора \mathbf{I} (оператор, который действует на любой вектор, давая тот же вектор) в форме

$$\mathbf{I} = \sum_i |i\rangle\langle i|.$$

Поскольку импульс и координата объявляются эрмитовыми, каждый из наборов векторов $|x\rangle$ и $|p\rangle$ является базисом. Заменяя суммирование интегрированием, мы обнаруживаем два способа разложения единицы:

$$\mathbf{I} = \int dx |x\rangle\langle x| \quad (8.21)$$

и

$$\mathbf{I} = \int dp |p\rangle\langle p|. \quad (8.22)$$

Допустим, что нам известна волновая функция абстрактного вектора $|\Psi\rangle$ в координатном представлении. По определению она равна

$$\Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle. \quad (8.23)$$

Теперь предположим, что мы хотим узнать волновую функцию $\tilde{\psi}(p)$ в импульсном представлении. Вот подробная пошаговая инструкция:

- Сначала используем определение импульсного представления волновой функции:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle \mathbf{P} |\Psi\rangle.$$

- Теперь вставим между бра- и кет-векторами единичный оператор в форме, даваемой уравнением (8.21):

$$\tilde{\psi}(p) = \int dx \langle p|x\rangle\langle x|\Psi\rangle.$$

- Выражение $\langle x|\Psi\rangle$ — это просто волновая функция $\Psi(x)$, а $\langle p|x\rangle$ дается вторым из уравнений (8.18):

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}.$$

- Сводя все воедино, получаем

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x). \quad (8.24)$$

Это уравнение четко показывает, как преобразовать волновую функцию, заданную в координатном представлении, в соответствующую волновую функцию в импульсном представлении. Для чего это нужно? Допустим, известна координатная волновая функция некоторой частицы; однако цель вашего эксперимента состоит в измерении импульса, и вы хотите знать вероятность наблюдения импульса p . Процедура состоит в том, чтобы сначала найти $\tilde{\psi}(p)$ по формуле (8.24), а затем вычислить вероятность

$$P(p) = \tilde{\psi}^*(p)\tilde{\psi}(p).$$

Столь же просто выполнить переход в обратном направлении. Пусть $\tilde{\psi}(p)$ известна и мы хотим найти $\Psi(x)$. На этот раз мы воспользуемся для разложения единицы уравнением (8.22). Вот последовательность шагов (заметьте, что она выглядит подозрительно похожей на предыдущую).

- Сначала используем определение импульсного представления волновой функции:

$$\Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle.$$

- Теперь вставим между бра- и кет-векторами единичный оператор в форме, даваемой уравнением (8.22):

$$\psi(x) = \int dp \langle x|p\rangle\langle p|\Psi\rangle.$$

- Выражение $\langle p|\Psi\rangle$ — это просто волновая функция $\tilde{\psi}(p)$, а $\langle x|p\rangle$ дается уравнением (8.18). Но на этот раз мы берем первое из двух уравнений:

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}.$$

- Сводя все воедино, получаем:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{\frac{ipx}{\hbar}} \tilde{\psi}(p).$$

Бросим еще один взгляд на эти два уравнения для перехода между координатой и импульсом. Обратите внимание, насколько они симметричны. Единственная асимметрия состоит в том, что одно уравнение содержит

$e^{\frac{ipx}{\hbar}}$, а другое — $e^{\frac{-ipx}{\hbar}}$:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x), \\ \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{\frac{ipx}{\hbar}} \tilde{\psi}(p). \end{aligned} \tag{8.25}$$

Связь между координатным и импульсным представлениями, выраженная уравнениями (8.25), состоит в том, что они являются взаимными *преобразованиями Фурье* друг для друга. Фактически это ключевые уравнения в области Фурье-анализа. Я хочу, чтобы вы обратили внимание, как легко вывести эти уравнения, используя элегантные обозначения Дирака.

8.4. Коммутаторы и скобки Пуассона

Ранее в лекции 4 мы сформулировали два важных принципа, относящихся к коммутаторам. Первый из них касался связи между классической механикой и квантовой механикой; второй относился к неопределенности. Сейчас я закончу эту очень длинную лекцию, продемонстрировав, что означают эти принципы в применении к \mathbf{X} и \mathbf{P} .

Начнем со связи между коммутаторами и классической физикой. Как вы можете помнить, мы обнаружили, что коммутаторы очень похожи на скобки Пуассона, и это сходство в явном виде выражено уравнением (4.21). Если подставить в него обозначения операторов \mathbf{L} и \mathbf{M} , которые использовались в этой лекции, мы получим

$$[\mathbf{L}, \mathbf{M}] \Leftrightarrow i\hbar\{\mathbf{L}, \mathbf{M}\}, \quad (8.26)$$

что напомнит нам о сильном сходстве между квантовыми уравнениями движения и их классическими эквивалентами. Это наводит на мысль о том, что можно узнать нечто интересное, вычислив коммутатор наблюдаемых \mathbf{X} и \mathbf{P} . К счастью, это нетрудно сделать.

Прежде всего посмотрим, что делает произведение \mathbf{XP} , когда оно действует как оператор на произвольную волновую функцию $\Psi(x)$. Вспомнив уравнения (8.5) и (8.15), можно записать

$$\mathbf{X}\psi(x) = x\psi(x),$$

$$\mathbf{P}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}.$$

Вместе эти уравнения говорят нам, как произведение \mathbf{XP} действует на $\Psi(x)$:

$$\mathbf{XP}\psi(x) = -i\hbar x \frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (8.27)$$

Теперь попробуем повторить то же самое с \mathbf{X} и \mathbf{P} в обратном порядке:

$$\mathbf{PX}\psi(x) = -i\hbar \frac{d(x\psi(x))}{dx}.$$

Чтобы вычислить последнее выражение, воспользуемся стандартным правилом дифференцирования произведения $x\Psi(x)$. С его помощью нетрудно убедиться, что

$$\mathbf{PX}\psi(x) = -i\hbar x \frac{d\psi(x)}{dx} - i\hbar\psi(x). \quad (8.28)$$

Теперь вычтем уравнение (8.28) из (8.27), чтобы увидеть, как коммутатор действует на волновую функцию:

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}]\Psi(x) = \mathbf{XP}\Psi(x) - \mathbf{PX}\Psi(x)$$

или

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}]\Psi(x) = i\hbar\Psi(x).$$

Другими словами, когда коммутатор $[\mathbf{X}, \mathbf{P}]$ действует на *любую* волновую функцию $\Psi(x)$, он умножает $\Psi(x)$ на число $i\hbar$. Это можно выразить, записав

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar. \quad (8.29)$$

Это само по себе очень важный результат. Тот факт, что **X** и **P** не коммутируют, играет ключевую роль в понимании того, почему они не могут быть одновременно измерены. Но все становится еще интереснее, когда мы сравниваем это уравнение с эквивалентностью, выраженной в формуле (8.26), которая связывает коммутаторы с классическими скобками Пуассона. Фактически уравнение (8.29) указывает на то, что соответствующая классическая скобка Пуассона — это

$$\{x, p\} = 1,$$

что в точности соответствует классическому отношению между координатами и их сопряженными импульсами (см. *том I*, лекция 10, уравнение 8). В конечном счете именно эта связь объясняет, как квантовое понятие импульса связано с классическим.

Вспомнив общий принцип неопределенности из лекции 5, можно в применении к данному частному случаю записать

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar$$

и

$$\Delta \mathbf{X} \Delta \mathbf{P} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Мы займемся этим в следующем разделе.

Теперь обратимся к другому принципу, относящемуся к коммутаторам. В лекции 4 мы обнаружили,

что две наблюдаемые \mathbf{L} и \mathbf{M} не могут быть определены одновременно, если они не коммутируют. Если они не коммутируют, нельзя измерить \mathbf{L} , не мешая измерению \mathbf{M} . Невозможно одновременно найти собственные векторы двух не коммутирующих наблюдаемых. Это приводит к общему принципу неопределенности.

8.5. Принцип неопределенности Гейзенберга

Теперь, леди и джентльмены, то, чего вы так долго ждали. Встречайте долгожданный *принцип неопределенности Гейзенберга!*

Принцип неопределенности Гейзенberга — это один из самых знаменитых результатов квантовой механики: он не только утверждает, что положение и импульс частицы невозможно знать одновременно, но также накладывает точное количественное ограничение на их взаимные неопределенности. На этом месте я предлагаю вам вернуться к главе 5, где я объяснял общий принцип неопределенности. Всю работу мы уже выполнили там и теперь пожинаем ее плоды.

Как мы видели, общий принцип неопределенности накладывает количественные пределы на одновременные неопределенности двух наблюдаемых \mathbf{A} и \mathbf{B} . Эта идея была выражена неравенством (5.13):

$$\Delta \mathbf{A} \Delta \mathbf{B} \geq \frac{1}{2} \langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle.$$

Теперь применим этот принцип непосредственно к операторам координаты и импульса \mathbf{X} и \mathbf{P} . В данном случае коммутатор — это лишь число, и его среднее значение — то же самое число. Заменив \mathbf{A} и \mathbf{B} на \mathbf{X} и \mathbf{P} , получаем

$$\Delta \mathbf{X} \Delta \mathbf{P} \geq \frac{1}{2} \langle \Psi | [\mathbf{X}, \mathbf{P}] | \Psi \rangle,$$

а поставив $i\hbar$ вместо $[\mathbf{X}, \mathbf{P}]$, имеем

$$\Delta \mathbf{X} \Delta \mathbf{P} \geq \frac{1}{2} |i\hbar \langle \Psi | \Psi \rangle|.$$

Но $\langle \Psi | \Psi \rangle$ равно 1, так что окончательным результатом будет

$$\Delta \mathbf{X} \Delta \mathbf{P} \geq \frac{1}{2} \hbar.$$

Ни один эксперимент никогда не сможет преодолеть это ограничение. Можно приложить все силы к тому, чтобы научиться воспроизводимым образом одновременно определять импульс и положение частицы, но как бы аккуратны вы ни были, неопределенность координаты, умноженная на неопределенность импульса, никогда не будет меньше $\frac{1}{2} \hbar$.

Как мы видели в разделе 8.2.1, волновая функция собственного состояния \mathbf{X} очень сильно сконцентрирована вокруг точки x_0 ; в этом собственном состоянии вероятность тоже прекрасно локализована. С другой стороны, вероятность $P(x)$ для импульсного собственного состояния равномерно распределена вдоль всей оси x .

Чтобы убедиться в этом, возьмем волновую функцию, представленную в формуле (8.17), и умножим на ее собственное комплексное сопряженное:

$$\psi_p^*(x)\psi_p(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\frac{-ipx}{\hbar}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}\right) = \frac{1}{2\pi}.$$

Результат совершенно однороден, без всяких пиков где-либо на оси x . Очевидно, состояние с определенным импульсом совершенно неопределенno в отношении своего положения.

На рис. 8.2 показан смысл неопределенности для координатной переменной x . На верхней половине рисунка видно, что неопределенность Δx является мерой того, насколько широк разброс функции относительно ее среднего значения $\langle x \rangle$. Буквой d обозначено отклонение одной из точек от $\langle x \rangle$; оно может иметь положительное или отрицательное значение. Неопределенность Δx — это результат процесса усреднения по всем возможным d и характеризует функцию в целом. Для того чтобы положительные значения d не компенсировали отрицательные, каждое значение d в процессе этого усреднения возводится в квадрат.

Нижняя половина рис. 8.2 показывает, как можно упростить вычисление, сдвинув начало координат до его совпадения с $\langle x \rangle$. Численное значение Δx не меняется при таком сдвиге.

Квантовая механика



Рис. 8.2. Основные понятия неопределенности.
 Вверху: $\langle x \rangle$ находится справа от начала координат.
 Отклонение d может быть положительным или
 отрицательным. Общая неопределенность Δx (> 0)
 характеризуется средним значением d^2 .
 Внизу: начало координат сдвинуто вправо,
 $\langle x \rangle = 0$, Δx имеет то же значение

Лекция 9. Динамика частиц

Арт и Ленни ждали в «Гильбертс Плэйс» какой-нибудь движухи. Но все векторы состояния замерли, словно замороженные.

Ленни: Скучно, Арт. Почему здесь ничего не происходит? Эй, Гильберт, чего тут так тихо?

Гильберт: О, не беспокойтесь. Все закрутится, как только появится Гамильтониан.

Арт: Гамильтониан? Похоже, он настоящий оператор.

9.1. Простой пример

Первые два тома «Теоретического минимума» в основном сосредоточены на двух вопросах. Первый: что такое система и как описывать мгновенные состояния системы? Как мы видели, классический и квантовый ответы на этот вопрос очень сильно различаются. Классическое

фазовое пространство — пространство координат и импульсов — заменяется в квантовой теории линейным векторным пространством состояний.

Второй большой вопрос: как состояния изменяются во времени? Как в классической, так и в квантовой механике ответ на этот вопрос: *в соответствии с минус первым законом*. Другими словами, состояние изменяется так, что информация и различия никогда не исчезают. В классической механике этот принцип приводит к уравнениям Гамильтона и теореме Лиувилля. Ранее в лекции 4 я объяснял, как в квантовой механике этот закон приводит к принципу унитарности, который, в свою очередь, ведет к уравнению Шрёдингера в общем виде (зависящему от времени).

Лекция 8 целиком была посвящена первому вопросу: как описывать состояние частицы? Теперь, в этой лекции, мы перейдем ко второму вопросу, который можно перефразировать так: *как частицы движутся в квантовой механике?*

В лекции 4 я изложил фундаментальные правила, определяющие, как квантовые состояния меняются во времени. Существенным ингредиентом является гамильтониан H , который как в классической, так и в квантовой механике представляет собой полную энергию системы. В квантовой механике гамильтониан определяет эволюцию системы во времени через зависящее от времени уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \mathbf{H}|\Psi\rangle. \quad (9.1)$$

Эта лекция целиком посвящена *оригинальному уравнению Шрёдингера* — тому самому, которое Шрёдингер вывел для описания квантовой механики частицы. Это оригинальное уравнение Шрёдингера есть частный случай уравнения (9.1).

Движение обычной (нерелятивистской) частицы в классической механике управляет гамильтонианом, равным сумме кинетической энергии и потенциальной энергии. Вскоре мы получим квантовую версию этого гамильтониана, но сначала рассмотрим гамильтониан, который устроен еще проще.

Мы начнем с простейшего гамильтониана, который я только могу придумать. В данном случае оператор гамильтониана \mathbf{H} — это неизменная во времени константа, умноженная на оператор импульса \mathbf{P} :

$$\mathbf{H} = c\mathbf{P}. \quad (9.2)$$

Этот пример редко рассматривают, хотя, как выясняется, он весьма поучителен. Константа c — это фиксированное число. Является ли $c\mathbf{P}$ полезным на практике гамильтонианом? Является, и вскоре мы увидим, какого типа частицы он описывает. Сейчас просто обратите внимание, что уравнение (9.2) отличается от того, что можно было бы ожидать для нерелятивистской частицы. Иначе говоря, это не $\mathbf{P}^2/2m$. С этого простого примера хорошо начинать, просто чтобы посмотреть, как работает математический аппарат.

Как выразить пример через волновые функции $\Psi(x)$ в координатном базисе? Начнем с того, что подставим

наши операторы в зависящее от времени уравнение Шрёдингера (9.1):

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -ci\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}.$$

Обратите внимание, что мы теперь записываем Ψ как функцию двух переменных x и t . Сократив уравнение на $i\hbar$, получаем

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -c \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}, \quad (9.3)$$

что является очень простым уравнением. Фактически любая функция $(x - ct)$ является его решением. Под «функцией $(x - ct)$ » я имею в виду функцию, которая зависит не от x и t по отдельности, а только от комбинации $(x - ct)$. Чтобы увидеть, как это работает, просто возьмем произвольную функцию $\Psi(x - ct)$ и рассмотрим ее производные. Если взять частную производную по x , получится

$$\frac{\partial \psi(x - ct)}{\partial x},$$

поскольку производная $(x - ct)$ по x равна 1. Но если взять частную производную по t , то получится

$$-c \frac{\partial \psi(x - ct)}{\partial t}.$$

Ясно, что эта комбинация производных удовлетворяет уравнению (9.3); поэтому любая функция такого вида служит решением уравнения Шрёдингера.

Теперь рассмотрим, как ведет себя функция $\Psi(x - ct)$. На что она похожа? Как она меняется во времени? Допустим, мы начинаем с мгновенного снимка в $t = 0$. Этот мгновенный снимок можно обозначить как $\Psi(x)$, поскольку он говорит нам, как выглядит Ψ в каждой точке в *заданный момент времени* $t = 0$. Конечно, нам не годится любая функция от $(x - ct)$. Мы хотим, чтобы полная вероятность

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx$$

была равна 1. Другими словами, мы хотим, чтобы $\Psi(x)$ быстро стремилась к нулю на бесконечности и этот интеграл не расходилсяся. На рис. 9.1 схематически показана функция $\Psi(x)$. При таких характеристиках есть смысл называть $\Psi(x)$ *волновым пакетом*.

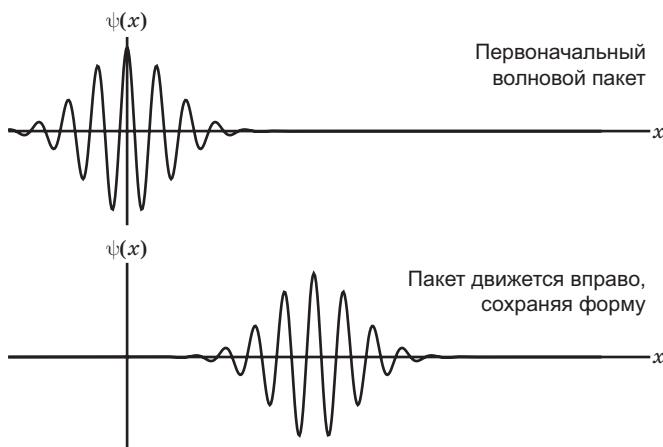


Рис. 9.1. Фиксированной формы волновой пакет, движущийся с фиксированной скоростью с

Теперь, когда мы описали мгновенный снимок $\Psi(x)$ в момент $t = 0$, рассмотрим, что случится, если позволить времени идти вперед? С ростом t волновой пакет в точности сохраняет свою форму. Все детали комплекснозначной функции $\Psi(x)$ с постоянной скоростью сдвигутся вправо¹.

У меня была причина обозначить нашу константу буквой c — эта буква часто используется для обозначения скорости света. Является ли эта частица фотоном? На самом деле нет. Но наше описание этой гипотетической частицы очень близко к корректному описанию нейтрино, движущегося со скоростью света. (Настоящие нейтрино, вероятно, движутся со скоростью, которая на неизмеримую величину меньше скорости света.) Этот гамильтониан был бы очень хорошим описанием одномерного нейтрино за исключением единственной проблемы: частица, описываемая нашей волновой функцией, может двигаться только вправо. Чтобы обойти это описание, нам нужно добавить другую возможность — возможность движения частицы влево²!

¹ Это включает как вещественную, так и мнимую части $\Psi(x)$.

² Наши движущиеся вправо частицы напоминают мне классическую историю Доктора Сьюза про Заксов, и я не могу справиться с искушением назвать их «заксонами, идущими вправо». Не знаю, как повернулась бы история Теодора Гейзеля, если бы он больше знал про нейтрино. — *Примеч. авт.* (Теодор Сьюз Гейзель (Доктор Сьюз), 1904–1991 — знаменитый американский детский писатель и мультипликатор. В его шуточном рассказе «Закс» посреди пустыни встречаются Закс-идущий-на-север и Закс-идущий-на-юг. Отказываясь уступить дорогу, они навечно остаются стоять друг напротив друга. — *Примеч. пер.*)

Наш идущий вправо заксон¹ имеет еще одну странную особенность — его энергия может быть либо положительной, либо отрицательной. Это связано с тем, что оператор \mathbf{P} в качестве вектора может принимать положительные и отрицательные значения. В общем случае энергия частицы с отрицательным импульсом отрицательна, а энергия частицы с положительным импульсом положительна. Я не буду подробнее рассказывать об этом, за исключением того, что проблема отрицательной энергии такого рода частиц была решена Дираком, который использовал ее при создании теоретической базы для описания античастиц. Для наших целей можно игнорировать эту проблему и просто позволить энергии частицы быть как положительной, так и отрицательной.

Поскольку волновая функция частицы движется строго в направлении оси x , то же происходит и с распределением вероятности. Как результат, среднее значение x движется в точности так же, то есть перемещается вправо со скоростью c . В этом суть квантовомеханического описания данной системы. Однако существует другая важная вещь, которую надо иметь в виду. Когда мы сказали, что скорость c является *неизменной* константой, мы не шутили. Наша частица может существовать только в состоянии, когда она движется с этой конкретной скоростью. Ее невозможно замедлить или ускорить.

¹ Да, я это произнес.

Как это соотносится с классическим описанием такой частицы? Начав с того же гамильтониана, классический физик просто записал бы уравнения Гамильтона. При $H = cP$ уравнения Гамильтона имеют вид

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x}$$

и

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{p}.$$

После взятия частных производных получается

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x} = c$$

и

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{p} = 0.$$

Таким образом, в классическом описании нашей частицы импульс сохраняется, а положение меняется с фиксированной скоростью c . В квантовомеханическом описании распределение вероятности в целом и среднее значение движутся со скоростью c . Другими словами, среднее значение координаты ведет себя в соответствии с классическими уравнениями движения.

9.2. Нерелятивистские свободные частицы

Наши безмассовые частицы могут двигаться со скоростью света, и я добавлю: они движутся только с этой

скоростью. Все известные частицы, отличные от фотонов и гравитонов, обладают массой и могут двигаться с любой скоростью, меньшей c . Когда они движутся со скоростью намного меньше c , их называют нерелятивистскими, а их движение подчиняется обычной ньютоновской механике, по крайней мере в классике. Самые первые приложения квантовой механики относились к движению нерелятивистских частиц.

Я показал ранее (в лекциях 4 и 8), что скобки Пуассона играют ту же математическую роль в классической механике, что и коммутаторы в квантовой механике. Уравнения движения классической и квантовой механики, записанные с использованием этих конструкций, выглядят внешне почти идентично. В частности, гамильтониан задействуется в скобках Пуассона таким же образом, как в коммутаторах. Так что, если надо записать квантомеханические уравнения системы, классическая физика которой вам уже известна, весьма разумно попробовать использовать классический гамильтониан, переведенный в операторную форму.

Для нерелятивистской свободной частицы естественно попробовать гамильтониан $p^2/2m$. Говоря, что частица свободна, мы в действительности имеем в виду то, что на нее не действуют силы и, следовательно, можно игнорировать ее потенциальную энергию. Все, о чем нам надо беспокоиться, — это кинетическая энергия, которая определяется как

$$T = \frac{1}{2}mv^2.$$

Как вы помните, импульс классической частицы

$$p = mv.$$

Ее гамильтониан — это просто кинетическая энергия, которую можно выразить через импульс p . Поэтому гамильтониан классической нерелятивистской свободной частицы имеет вид

$$H = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}.$$

В отличие от закона, идущего вправо, из предыдущего примера, энергия этой частицы не зависит от направления ее движения. Это связано с тем, что энергия пропорциональна p^2 , а не самому p . Так что мы начнем с частицы, энергия которой равна $p^2/2m$, и выведем уравнение Шрёдингера (то самое, первоначальное, которое открыл Шрёдингер) для свободной частицы.

Наш план состоит в том, чтобы следовать процедуре, которую мы использовали в предыдущем примере, применив гамильтониан для записи зависящего от времени уравнения Шрёдингера. Как обычно, в левой части уравнения стоит

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Правую часть мы выведем, переписав классический гамильтониан — кинетическую энергию — в виде оператора. Классическая кинетическая энергия равна

$$p^2/2m.$$

В квантовой версии заменяем p на \mathbf{P} :

$$\mathbf{H} = \mathbf{P}^2 / 2m.$$

Каков смысл этого уравнения? Мы видели, что оператор \mathbf{P} определен как

$$\mathbf{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

Квадрат \mathbf{P} — это просто оператор, который получается, если дважды последовательно применить \mathbf{P} . То есть это

$$\mathbf{P}^2 = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right),$$

или

$$\mathbf{P}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

а гамильтониан приобретает вид

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Наконец, если приравнять левую и правую части зависящего от времени уравнения Шрёдингера, мы получим

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (9.4)$$

Мы получили традиционное уравнение Шрёдингера для обычной нерелятивистской свободной частицы. Это особого рода волновое уравнение, но, в отличие от предыдущего примера, волны разной длины (и с разными импульсами) движутся с разными скоростями. Ввиду этого волновая функция *не* сохраняет свою форму. В отличие от волновой функции заксона, она имеет

склонность к расплыванию и распаду. Это схематически показано на рис. 9.2.

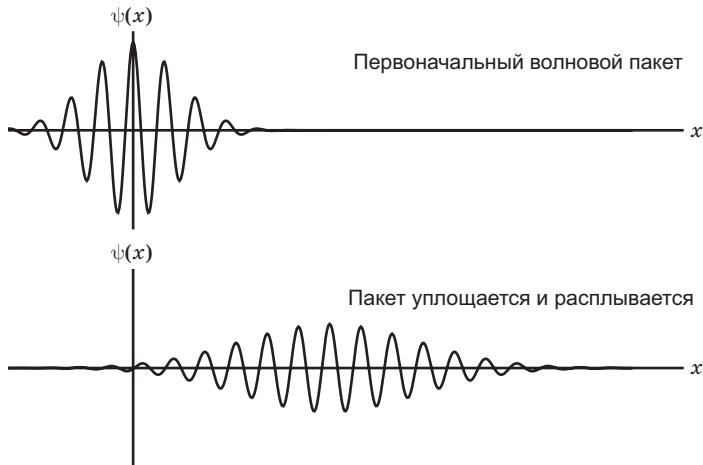


Рис. 9.2. Типичный волновой пакет для нерелятивистской свободной частицы.
Вверху: исходный волновой пакет компактен и хорошо локализован. Внизу: со временем волновой пакет движется вправо и расплывается

9.3. Зависящее от времени уравнение Шрёдингера¹

Мы собираемся решить зависящее от времени уравнение Шрёдингера для нерелятивистских свободных частиц, но

¹ Также широко используется термин нестационарное уравнение Шрёдингера. — Примеч. науч. ред.

сначала нам надо решить независящую от времени версию. Независящее от времени уравнение — это, по сути, уравнение для собственных векторов гамильтониана

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle,$$

выраженное явным образом через волновую функцию $\Psi(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x). \quad (9.5)$$

Найти полный набор собственных векторов, которые удовлетворяют этому уравнению, совсем нетрудно. Фактически это будут собственные векторы импульса. Попробуем функцию

$$\psi(x) = e^{\frac{ipx}{\hbar}} \quad (9.6)$$

в качестве возможного решения. Взяв производные, мы обнаруживаем, что эта функция действительно является решением уравнения (9.5), если положить

$$E = p^2/2m. \quad (9.7)$$

Это не должно удивлять — в конце концов, E представляет собственное значение энергии в уравнении (9.5).

УПРАЖНЕНИЕ 9.1

Выполните уравнение (9.7), подставив уравнение (9.6) в (9.5).

Как мы видели в разделе 4.13, любое решение стационарного (независящего от времени) уравнения Шрёдингера позволяет нам построить зависящее от времени решение. Все, что нам нужно сделать, это умножить зависящее от времени решение — в данном случае $e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ — на $e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}}$. Итак, полный набор решений можно записать в следующем виде

$$\psi(x, t) = \exp \frac{i \left(px - \frac{p^2 t}{2m} \right)}{\hbar}.$$

Любое решение является суммой или интегралом следующих решений:

$$\psi(x, t) = \int \tilde{\Psi}(p) \left| \exp \frac{i \left(px - \frac{p^2 t}{2m} \right)}{\hbar} \right\rangle dp.$$

Можно начать с любой волновой функции в момент $t = 0$, найти функцию $\tilde{\Psi}(p)$ с помощью Фурье-преобразования и позволить ей эволюционировать. Ее форма будет меняться, поскольку волны с разными значениями p движутся с разными скоростями. Но, как вы скоро увидите, волновой пакет в целом движется со скоростью $\langle p/m \rangle$, в точности как двигалась бы классическая частица.

Это простое общее решение имеет важное следствие. Среди прочих вещей, оно говорит, что импульсное представление волновой функции меняется со временем очень простым образом:

$$\tilde{\psi}(p,t) = \tilde{\psi}(p) \exp \frac{i \left(px - \frac{p^2 t}{2m} \right)}{\hbar}.$$

Другими словами, со временем меняется только фаза, тогда как абсолютная величина остается постоянной. Но особенно интересно то, что вероятность $P(p)$ не меняется со временем. Это, конечно, соответствует сохранению импульса и выполняется, только если нет сил, действующих на частицу.

9.4. Скорость и импульс

До сих пор я не объяснил связь между оператором \mathbf{P} и классическим понятием импульса, а именно массой, умноженной на скорость, или

$$v = p/m. \quad (9.8)$$

Что мы имеем в виду под скоростью квантовомеханической частицы? Простейший ответ состоит в том, что это среднее значение производной по времени от среднего значения положения $\langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle$:

$$v = \frac{d \langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle}{dt}$$

или, более конкретно, на языке волновых функций,

$$v = \frac{d}{dt} \int \psi^*(x, t) x \psi(x, t).$$

Почему $\langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle$ меняется со временем? Потому что Ψ зависит от времени, и в действительности мы даже знаем как. Зависимость Ψ от времени определяется зависящим от времени уравнением Шрёдингера. Мы могли бы использовать этот факт для определения того, как $\langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle$ меняется со временем. Я проделал это — методом грубой силы, — и это заняло несколько страниц. К счастью, абстрактные методы, которые мы изучили в предыдущих лекциях, позволяют сделать это проще; фактически мы уже сделали большую часть работы в лекции 4. Прежде чем продолжать чтение, я рекомендую вернуться к лекции 4, особенно к разделу 4.9 — от его начала до появления уравнения (4.17). Выпишем уравнение (4.17) повторно:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{L} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{H}, \mathbf{L}] \rangle.$$

В словесной форме: производная по времени от среднего значения любой наблюдаемой \mathbf{L} равна среднему значению коммутатора гамильтониана и \mathbf{L} с коэффициентом i/\hbar . Применив этот принцип к скорости v , находим, что

$$v = \frac{i}{2m\hbar} \langle [\mathbf{P}^2, \mathbf{X}] \rangle. \quad (9.9)$$

Теперь нужно вычислить коммутатор \mathbf{P}^2 и \mathbf{X} . Пара простых шагов показывает, что

$$[\mathbf{P}^2, \mathbf{X}] = \mathbf{P}[\mathbf{P}, \mathbf{X}] + [\mathbf{P}, \mathbf{X}]\mathbf{P}. \quad (9.10)$$

В правильности этого равенства можно убедиться, раскрыв каждый коммутатор и выполнив очевидные сокращения.

УПРАЖНЕНИЕ 9.2

Докажите уравнение (9.10), раскрыв выражения с обеих сторон и сравнив результаты.

На последнем шаге мы используем стандартное коммутационное соотношение

$$[\mathbf{P}, \mathbf{X}] = -i\hbar.$$

Подставляя это в уравнение (9.10), затем результат в (9.9), находим

$$v = \frac{\langle \mathbf{P} \rangle}{m}$$

или, в более знакомом виде,

$$\langle \mathbf{P} \rangle = mv. \quad (9.11)$$

Мы доказали в точности то, что собирались: импульс равен массе, умноженной на скорость, или, более точно, среднее значение импульса равно массе, умноженной на скорость.

Чтобы лучше понять смысл этого, допустим, что волновая функция имеет форму пакета или чрезвычайно компактного сгустка. Среднее значение x будет находиться примерно в центре этого сгустка. Уравнение (9.11) говорит нам, что центр этого волнового пакета движется согласно классическому закону $p = mv$.

9.5. Квантование

Прежде чем переходить к рассмотрению сил в квантовой механике, я хочу приостановиться и обсудить то, что мы сделали. Мы начали с хорошо известной и надежной классической системы — свободной частицы — и *проквантовали* ее. Эту процедуру можно систематизировать следующим образом.

1. Начать с классической системы. Это означает набор координат x и импульсов p . В нашем примере была только одна координата и один импульс, но эту процедуру легко обобщить. Координаты и импульсы появляются парами: x_i и p_i . Классическая система также имеет гамильтониан, который является функцией координат x_i и импульсов p_i .
 2. Заменить классическое фазовое пространство линейным векторным пространством. В координатном представлении пространство состояний представляется волновой функцией $\Psi(x)$, которая зависит от координат — в общем случае от всех.
 3. Заменить x_i и p_i операторами \mathbf{X}_i и \mathbf{P}_i . Каждый \mathbf{X}_i действует на волновую функцию, умножая ее на x_i . Каждый \mathbf{P}_i действует согласно правилу
- $$\mathbf{P}_i \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}.$$
4. После выполнения этих замен гамильтониан становится оператором, который можно использовать как

в зависящем от времени, так и в стационарном уравнении Шрёдингера. Зависящее от времени уравнение говорит нам, как волновая функция меняется во времени. Независящая от времени форма позволяет найти собственные векторы и собственные значения гамильтониана.

Эта процедура квантования является средством, с помощью которого классические уравнения системы преобразуются в квантовые уравнения. Она будет использоваться раз за разом во всех областях — от движения частиц до квантовой электродинамики; есть даже попытки (не слишком успешные) проквантовать эйнштейновскую теорию гравитации. Как мы увидели на одном простом случае, эта процедура гарантирует, что движение средних значений тесно связано с классическим движением.

Все это поднимает проблему «курицы и яйца»: что первично — классическая теория или квантовая? Должна ли логическая стартовая точка физики быть классической или квантовомеханической? Я думаю, ответ очевиден. Квантовая механика является реальным описанием природы. Классическая механика, несмотря на всю свою красоту и элегантность, — не более чем приближение. Грубо говоря, она соответствует истине, когда волновые функции сохраняют свою форму как пакеты. Иногда нам везет, и о квантовой теории системы можно догадаться — это именно догадка, — оттолкнувшись от знакомой классической системы и про-

квантовав ее. Иногда это работает. Квантовое движение электронов, выведенное из классической механики частиц, — один из примеров. Квантовая электродинамика, выведенная из уравнения Максвелла, — другой. Но иногда не существует классической теории, которую можно было бы использовать в качестве отправной точки. Спин частицы не имеет классического аналога. И квантование общей теории относительности в целом окончилось неудачей. Квантовая теория, вероятно, является намного более фундаментальной, чем классическая теория, которую в целом надо рассматривать как аппроксимацию.

После того как это сказано, я продолжу квантовать движение частиц, но на этот раз с учетом действия сил.

9.6. Силы

Мир был бы скучным местом, если бы все частицы были свободными. Силы — это то, что делает частицы интересными объектами, способными собираться в атомы, молекулы, шоколадные батончики и черные дыры. Сила, действующая на любую данную частицу, — это совокупность всех сил, с которыми на нее действуют все остальные частицы во Вселенной. На практике мы обычно предполагаем, что знаем, как действуют все остальные частицы, и заменяем их воздействие на изучаемую частицу функцией потенциальной энергии. Это верно как для классической, так и для квантовой механики.

Функция потенциальной энергии обозначается $V(x)$. В классической механике она связана с силой, действующей на частицу, уравнением

$$F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x}.$$

Если движение одномерное, то частную производную можно заменить обычной производной, но я оставлю все как есть. Если затем объединить это уравнение со вторым законом Ньютона, $F = ma$, получится

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}.$$

В квантовой механике поступают иначе: записывают гамильтониан и решают уравнение Шрёдингера. Как включить потенциальную энергию в эту программу, совершенно очевидно. Потенциальная энергия $V(x)$ становится оператором \mathbf{V} , который добавляется к гамильтониану.

Что представляет собой оператор \mathbf{V} ? Ответ проще всего выразить, если думать на языке волновых функций, а не в терминах абстрактных бра и кетов. Когда оператор \mathbf{V} действует на любую волновую функцию $\Psi(x)$, он умножает волновую функцию на функцию $V(x)$.

$$\mathbf{V}|\Psi\rangle \rightarrow V(x)\Psi(x).$$

Точно так же как и в классической механике, при включении сил импульс частицы не сохраняется. Фактически ньютоновские законы движения можно выразить в форме

$$\frac{dp}{dt} = F$$

или

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x}. \quad (9.12)$$

Правила квантования требуют добавить $\mathbf{V}(x)$ к гамильтониану¹

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \mathbf{V}(x) \quad (9.13)$$

и очевидным образом модифицировать уравнения Шрёдингера:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi, \\ E\psi &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi. \end{aligned} \quad (9.14)$$

Какой это дает эффект? Дополнительный член, естественно, влияет на то, как Ψ меняется со временем. Это, конечно, должно быть так, если среднее положение волнового пакета следует по классической траектории. Для проверки наших рассуждений посмотрим, так ли это. Прежде всего, выполняется ли уравнение (9.11)? Оно должно соблюдаться, поскольку связь между импульсом и скоростью не зависит от наличия сил.

Поскольку к \mathbf{H} было добавлено новое слагаемое, должен появиться новый член и в коммутаторе \mathbf{X} и \mathbf{H} . Потенциально это может изменить выражение для скo-

¹ Формально это верно и для свободной частицы. Однако в этом случае мы приравниваем $V(x)$ к 0.

ности в уравнении (9.9), но легко убедиться, что этого не происходит. Новое слагаемое включает коммутатор \mathbf{X} и $\mathbf{V}(x)$. Но умножение на x и умножение на функцию от x — это коммутирующие операции. Другими словами,

$$[\mathbf{X}, \mathbf{V}(x)] = 0.$$

Таким образом, в квантовой механике связь между скоростью и импульсом не зависит от сил, как и в классической механике.

Есть более интересный вопрос: можем ли мы понять квантовую версию закона Ньютона? Как говорилось выше, закон можно записать в виде

$$\frac{dp}{dt} = F.$$

Вычислим производную по времени от среднего значения \mathbf{P} . Хитрость вновь в том, что \mathbf{P} коммутирует с гамильтонианом:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = \frac{i}{2m\hbar} [\langle \mathbf{P}^2, \mathbf{P} \rangle] + \frac{i}{\hbar} [\langle \mathbf{V}, \mathbf{P} \rangle]. \quad (9.15)$$

Первое слагаемое равно нулю, поскольку оператор коммутирует с любой функцией от самого себя. Для вычисления второго слагаемого используем уравнение, которое мы еще не доказали:

$$[\mathbf{V}(x), \mathbf{P}] = i\hbar \frac{dV(x)}{dx}. \quad (9.16)$$

Подставляя уравнение (9.16) в (9.15), получаем

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = - \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle.$$

Теперь докажем уравнения (9.16). Позволив коммутатору действовать на волновую функцию, можно записать

$$[\mathbf{V}(x), \mathbf{P}] \psi(x) = V(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) - \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) V(x) \psi(x). \quad (9.17)$$

Это уравнение легко сводится к (9.16). Итак, мы показали, что

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = - \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle. \quad (9.18)$$

И это квантовый аналог ньютоновского уравнения для изменения импульса со временем.

УПРАЖНЕНИЕ 9.3

Покажите, что правая часть уравнения (9.17) упрощается и переходит в правую часть уравнения (9.16). *Подсказка:* сначала раскройте второй член, взяв производную произведения. Затем посмотрите, что можно сократить.

9.7. Прямолинейное движение и классический предел

Вы могли подумать, будто мы доказали, что среднее значение \mathbf{X} в точности следует по классической траектории. Но в действительности мы доказали совсем другое. Разница возникает потому, что среднее значение функции от x совсем не то же самое, что функция от среднего значения x . Если бы уравнение (9.18) имело вид

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{P} \rangle = -\frac{dV(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle} \quad [\text{Это неверно!}]$$

(подчеркиваю, *это не так*), то в самом деле мы могли бы сказать, что среднее положение и импульс удовлетворяют классическим уравнениям. Но в действительности классические уравнения — это лишь приближения, которые хороши тогда, когда можно заменить среднее значение dV/dx функцией от среднего значения x . Когда разумно это делать? Ответ: когда $V(x)$ медленно меняется по сравнению с размерами волнового пакета. Если V резко меняется в пределах волнового пакета, то классическое приближение перестает работать. Фактически в этой ситуации стройный аккуратный волновой пакет будет превращаться в сильно расплывшуюся волну, совсем непохожую на ту, что была вначале. Функция вероятности тоже будет размываться. И тогда у вас не будет выбора, кроме как решать уравнения Шрёдингера.

Рассмотрим этот момент внимательнее. Математически мы не делали предположений относительно формы нашего волнового пакета. Но неявно мы считали их аккуратными по форме функциями с единственным максимумом и гладкими склонами, идущими к нулю в положительном и отрицательном направлениях. Такое математическое допущение, хотя мы нигде не вводили его явным образом, сильно влияет на то, будет ли частица вести себя так, как заставляет нас ожидать классическая механика.

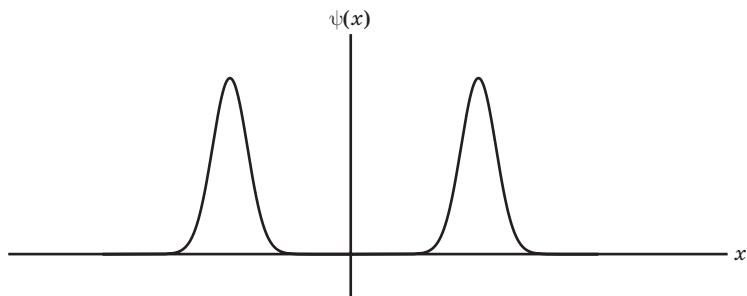


Рис. 9.3. Двухмодовая (двугорбая) функция, центрированная на $x = 0$. Обратите внимание, что $\langle x \rangle = 0$, но $\Delta x > 0$

Чтобы проиллюстрировать этот тезис, рассмотрим немного «странный» волновой пакет. На рис. 9.3 показан двухмодовый волновой пакет (имеющий два максимума), центрированный в начале координат на оси x . Теперь рассмотрим некую функцию x , скажем $F(x)$, где F представляет силу. Среднее значение $F(x)$ — это не то же самое, что F от среднего значения x . Другими словами,

$$\langle F(x) \rangle \neq F(\langle x \rangle).$$

В правой части находится функция от центра волнового пакета. Это не то же самое, что левая часть, которая соответствует нашим результатам из предыдущего раздела: $\langle F(x) \rangle$ имеет тот же вид, что и правая часть уравнения (9.18)¹.

¹ Напоминаю, что $-\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle$ представляет в этом уравнении силу.

Позвольте мне привести пример, в котором эти два выражения могут сильно различаться. Допустим, F равно квадрату x :

$$F = x^2.$$

И допустим, что волновой пакет выглядит как на рис. 9.3. Каково среднее значение x ? Оно равно нулю, и то же самое можно сказать про $F(\langle x \rangle)$, поскольку $F(0) = 0^2 = 0$. С другой стороны, каково среднее значение x^2 ? Оно больше нуля. Так что если волновой пакет не является аккуратным одиночным горбом, который в основном характеризуется своим центром, то вовсе не обязательно изменение импульса во времени будет равно величине силы в точке, соответствующей среднему значению x . Так бывает, только если волновая функция сконцентрирована на очень небольшом участке и среднее значение $F(x)$ не отличается от $F(\langle x \rangle)$. Так что мы немного смухлевали, говоря, что наше квантовое уравнение движения выглядит как классическое. Это зависит от волнового пакета, который должен быть когерентным и хорошо локализованным.

При прочих равных, когда масса частицы велика, ее волновая функция очень сильно сконцентрирована. Если у функции потенциальной энергии $V(x)$ нет очень четких пиков, то замена $\langle F(x) \rangle$ на $F(\langle x \rangle)$ будет хорошей аппроксимацией. Но когда $V(x)$ имеет пики, волновой пакет начинает распадаться. Допустим, например, у нас есть аккуратный волновой пакет, движущийся вправо, и он сталкивается с точечной структурой,

подобной атому, потенциальная функция которого напоминает изображенную на рис. 9.4. Волновой пакет рассеется и разрушится. Если, с другой стороны, он натолкнется на очень пологий потенциал, то пройдет по нему более или менее в соответствии с классическими уравнениями движения. Мы не ожидаем, что квантовая механика будет воспроизводить классическую при любых возможных условиях. Мы ожидаем, что она будет воспроизводить классическую механику в тех условиях, в которых она должна это делать, — когда частицы тяжелые, а потенциалы гладкие, и ничто не вызывает распада или рассеяния волновой функции¹.

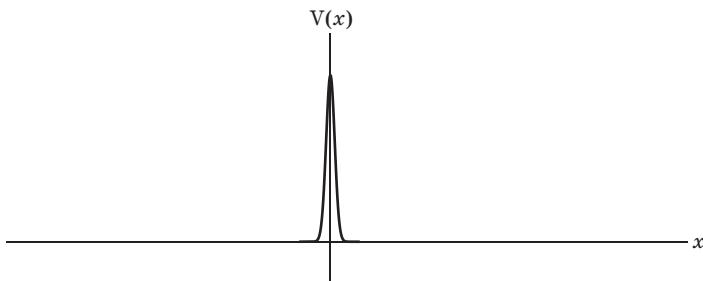


Рис. 9.4. Заостренная потенциальная функция.
Функции, задающие потенциал с острым пиком, будут вызывать рассеяние волновых функций. Чем меньше их особенности в сравнении с волновым пакетом, чем сильнее пакет будет рассеиваться и тем менее «классическим» он будет становиться

¹ Не так элегантно выражено, но столь же банально истинно, как у Гаррисона Кейллора. — Примеч. авт. (Гаррисон Кейллор (Garrison Keillor) — американский юморист, известный своими длинными и очевидными афоризмами. — Примеч. пер.)

В каких физических ситуациях возникают «плохие потенциалы», которые разрушают волновую функцию? Допустим, потенциал имеет особенности определенного, характерного для них размера. Представьте себе усугубленную версию рис. 9.4 со множеством высоких, плотно упакованных пиков. Обозначим величину этих особенностей δx , и эта величина δx значительно меньше неопределенности положения подлетающей частицы:

$$\delta x < \Delta x.$$

Если острые пики $V(x)$ имеют масштаб много меньше размера пришедшего волнового пакета, то пакет распадается на множество маленьких фрагментов, каждый из них будет рассеян в своем направлении. Грубо говоря, когда особенности потенциала меньше длины волны входящей частицы, волновая функция разрушается.

Допустим, вы берете шар для боулинга и спрашивайте: «Чему равно Δx ?» Используя принцип неопределенности, можно сориентироваться в этом вопросе. Обычно $\Delta p \times \Delta x$ больше \hbar . Но во многих случаях разумно считать, что это величина порядка \hbar :

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar.$$

Далее, значение p настолько сконцентрировано, насколько это возможно, но для обычного макроскопического объекта соотношение неопределенности находится практически на пределе — левая часть почти равна \hbar . Причины этого очень сложны, и я не буду их касаться.

Просто примем, что это так, и посмотрим, какие будут следствия. Чему равно Δp ? Это $m\Delta v$, что дает

$$m\Delta v \Delta x \sim \hbar.$$

Сделав простое преобразование, получаем

$$\Delta v \Delta x \sim \frac{\hbar}{m}$$

или

$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{m\Delta v}.$$

Теперь, если я положу шар для боулинга на землю, я буду точно знать, что неопределенность его скорости не очень велика. По мере того как шар будет становиться все тяжелее и тяжелее, можно ожидать, что неопределенность его скорости будет становиться все меньше и меньше. Но в любом случае в правой части масса находится в знаменателе, независимо от Δv , и когда масса m становится меньше, величина Δx будет увеличиваться. И в частности, она будет становиться больше особенностей потенциала.

В квантовомеханическом пределе, когда m очень мала, а Δx становится большой, волновая функция попадает под влияние зазубренного потенциала, который воспринимается ею как гораздо более грубый и насыщенный особенностями, чем сама волновая функция. Именно в такой ситуации волновая функция разрушается. Противоположная ситуация возникает, когда m становится очень большой, а Δx — маленькой. У большого шара для боулинга волновой пакет может быть очень сильно

сконцентрированным. Когда он движется по зубцам потенциала, для его *крошечной* волновой функции встречающиеся особенности потенциала выглядят (сравнительно) очень широкими. Движение по таким широким гладким особенностям не вызывает распада волновой функции на части. Большие массы и гладкие потенциалы характерны для классического предела. Частица с малой массой, движущаяся в потенциале с резкими скачками, ведет себя как квантовомеханическая система.

Что можно сказать об электронах? Достаточно ли они массивны, чтобы вести себя классически? Ответ зависит от соотношения потенциала и массы. Например, если у вас две пластины конденсатора разнесены на сантиметр с гладким электрическим полем между ними, электрон будет двигаться через зазор как аккуратная, когерентная, почти классическая частица. С другой стороны, потенциал, связанный с ядром атома, всегда имеет резко выраженные особенности. Если электронный волновой пакет попадает в такой потенциал, он будет рассеян по окрестностям.

Прежде чем закрыть эту тему, я хотел бы упомянуть о волновых пакетах с *минимальной неопределенностью*. Это волновые пакеты, у которых $\Delta x \Delta p$ равно $\hbar/2$ (а не больше этой величины). Другими словами, в таких случаях произведение $\Delta x \Delta p$ настолько мало, насколько это допускает квантовая механика. Такие волновые пакеты имеют форму гауссовой кривой и поэтому часто называются *гауссовыми* волновыми пакетами. Со временем они расплываются и становятся более плоскими.

Подобные волновые пакеты — не самые обычные, но они существуют. Шар для боулинга в состоянии покоя является хорошей аппроксимацией. В лекции 10 мы увидим, что нулевое состояние гармонического осциллятора является гауссовым волновым пакетом.

9.8. Интегралы по путям

Классическая гамильтонова механика строится на расчете пошаговых приращений, изменяющих состояние системы. Но есть другой способ формулировки механики — принцип наименьшего действия, — который концентрируется на историях в целом. Для частицы это означает рассмотрение всей ее траектории от некоторого начального момента до некоторого конечного. Оба эти подхода эквивалентны, но различаются акцентами. Гамильтонова механика полностью концентрируется на отдельном мгновении и говорит, как изменится система между этим мгновением и следующим. Принцип наименьшего действия предлагает отступить на шаг назад и дает общий вид. Можно представлять себе, что природа пробует все возможные траектории и выбирает из них одну, которая минимизирует действие между парой зафиксированных точек — начальной и конечной¹.

¹ Строго говоря, этот принцип должен называться принципом стационарности действия. Реальные траектории — это стационарные точки для действия, и они не всегда являются минимумами. Но для наших целей это тонкое замечание несущественно.

В квантовой механике тоже есть гамильтоново описание, которое работает с накапливающимися изменениями. Оно называется зависящим от времени уравнением Шрёдингера и является чрезвычайно общим. Насколько нам известно, его можно использовать для описания всех физических систем. Тем не менее справедливо спросить, как это сделал Ричард Фейнман около семидесяти лет назад, существует ли такой подход к квантовой механике, который работал бы с целыми историями? Другими словами, существует ли формулировка, аналогичная принципу наименьшего действия? Я не буду в этой лекции во всех деталях объяснять фейнмановское описание интеграла по путям, но, чтобы возбудить ваше любопытство, дам некий намек на то, как это работает.

Прежде всего позвольте мне очень кратко напомнить классический принцип наименьшего действия, о котором я рассказывал в *томе I*. Пусть классическая частица начинает движение в точке x_1 в момент t_1 и прибывает в точку x_2 в момент t_2 (рис. 9.5). Вопрос: по какой траектории она движется между t_1 и t_2 ?

Согласно принципу наименьшего действия реализуется траектория, для которой действие минимально. *Действие* — это, конечно, специальный термин, и он означает интеграл от лагранжиана между конечными точками траектории. Для простой системы лагранжиан — это кинетическая энергия минус потенциальная энергия. Так, для частицы, которая движется в одном измерении, действие равно

$$A = \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}) dt \quad (9.19)$$

или

$$A = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \right) dt .$$

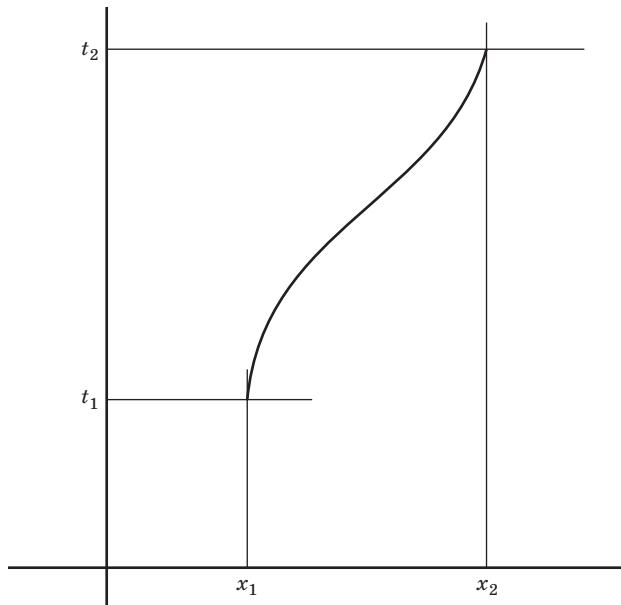


Рис. 9.5. Классическая траектория. Здесь показан путь, по которому частица может двигаться из точки 1 (x_1, t_1) в точку 2 (x_2, t_2).

Для простоты ось \dot{x} , соответствующая скорости частицы в направлении x , не показана

Идея состоит в том, чтобы проверить все возможные траектории, соединяющие две конечные точки, и вы-

числить действие A для каждой из них. Победит та из них, для которой действие окажется наименьшим^{1,2}.

Теперь вернемся к квантовой механике. Из-за принципа неопределенности идея четко заданной траектории между двумя точками в квантовой механике не имеет смысла. Однако мы можем поставить вопрос: если частица начинает движение в (x_1, t_1) , то с какой вероятностью она обнаружится в (x_2, t_2) , если в этой точке выполнить наблюдение?

Как всегда в квантовой механике, вероятность равна квадрату абсолютного значения комплексной амплитуды. В «глобальной версии» квантовой механики ставится вопрос:

При заданной начальной точке частицы (x_1, t_1) какую амплитуду она будет демонстрировать в (x_2, t_2) ?

Обозначим эту амплитуду $C(x_1, t_1; x_2, t_2)$, или, простоты ради, $C_{1,2}$. Начальное состояние частицы $|\Psi(t_1)\rangle = |x_1\rangle$. На интервале времени между t_1 и t_2 состояние эволюционирует к³

$$|\Psi(t_2)\rangle = e^{-iH(t_2-t_1)}|x_1\rangle. \quad (9.20)$$

¹ Это, конечно, лишь общий смысл данного принципа. На практике уравнения Эйлера — Лагранжа, описанные в *томе I*, сокращают эту работу.

² Для упрощения наших диаграмм мы не показываем ось \dot{x} , хотя лагранжиан явным образом зависит от \dot{x} .

³ Здесь мы используем единицы, в которых $\hbar = 1$.

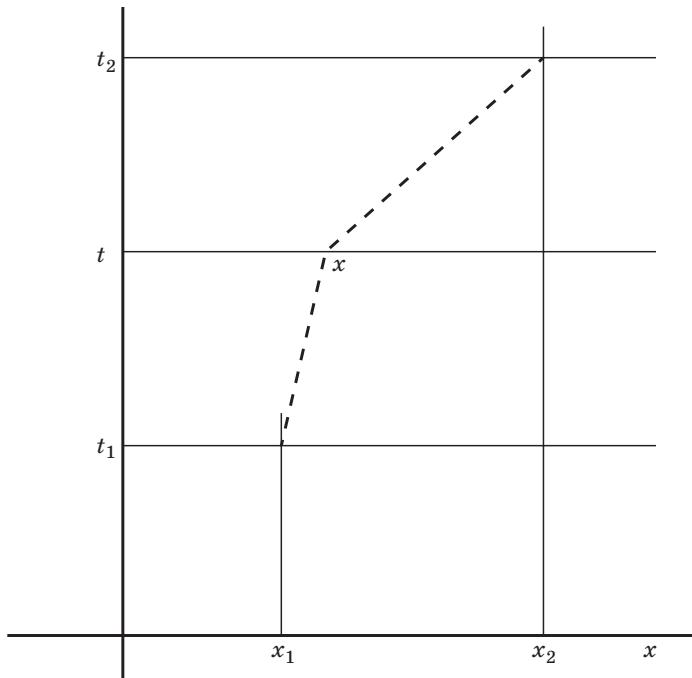


Рис. 9.6. Первый шаг к квантованию траектории. Разобьем траекторию частицы на две равные части (равные по оси времени). У частицы остаются неизменными начальная и конечная точки, но ее траектория проходит через разные промежуточные точки x

Амплитуда обнаружения частицы в $|x_2\rangle$ — это просто внутреннее произведение $|\Psi(t_2)\rangle$ и $|x_2\rangle$. Его значение

$$C_{1,2} = \langle x_2 | e^{-iH(t_2-t_1)} | x_1 \rangle. \quad (9.21)$$

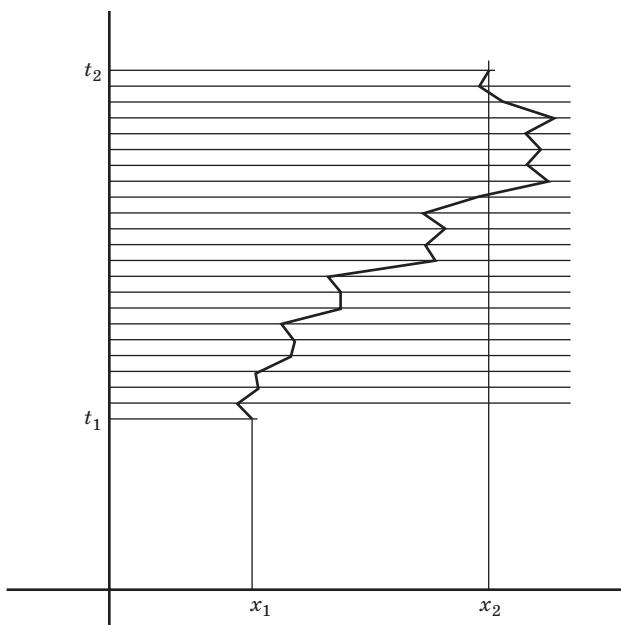


Рис. 9.7. Дальнейшие шаги конструирования интеграла по пути. Сохраняя неизменными начальную и конечную точки, разбиваем путь на большее число равных сегментов

Другими словами, амплитуда перемещения из x_1 в x_2 в течение интервала времени $t_2 - t_1$ получается путем помешания $e^{-iH(t_2-t_1)}$ в сэндвич между начальной и конечной позициями. Чтобы упростить формулу, я обозначу $t_2 - t_1$ через t . Тогда амплитуда будет

$$C_{1,2} = \langle x_2 | e^{-iHt} | x_1 \rangle. \quad (9.22)$$

Теперь разобьем интервал времени t на два меньших интервала размером $t/2$ (см. рис. 9.6). Оператор e^{-iHt} можно записать как произведение двух операторов:

$$e^{-iHt} = e^{-iHt/2} e^{-iHt/2}. \quad (9.23)$$

Вставив тождественный оператор в форме

$$I = \int dx |x\rangle\langle x|, \quad (9.24)$$

можно переписать уравнения для амплитуды в виде

$$C_{1,2} = \int dx \langle x_2 | e^{-iHt/2} | x \rangle \langle x | e^{-iHt/2} | x_1 \rangle. \quad (9.25)$$

Эта форма уравнения выглядит более сложной, но и имеет очень интересную интерпретацию. Позвольте мне на ней задержаться. Амплитуда перемещения из x_1 в x_2 за время t — это интеграл по всем промежуточным положениям x . Подынтегральное выражение — это амплитуда перемещения из x_1 в x за время $t/2$, умноженное на амплитуду перемещения из x в x_2 за время $t/2$.

На рис. 9.6 эта идея представлена графически. В классике, двигаясь от x_1 до x_2 , частица должна пройти через промежуточную точку x . Но в квантовой механике амплитуда перемещения из x_1 в x_2 является интегралом по всем возможным промежуточным точкам.

Можно развить эту идею и разделить временной интервал на огромное число крошечных интервалов, как показано на рис. 9.7. Я не стану записывать сложные формулы, но идея должна быть ясна. Для каждого крошечного интервала, скажем ε , мы добавим множитель

$$e^{-i\varepsilon H}.$$

Затем между каждой парой множителей вставим единичный оператор, так что амплитуда $C_{1,2}$ станет

кратным интегралом по всем промежуточным точкам. Подынтегральное выражение будет представлять собой произведение выражений вида

$$\langle x_i | e^{-i\varepsilon H} | x_{i+1} \rangle.$$

Если определить $U(\varepsilon)$ как

$$U(\varepsilon) = e^{-i\varepsilon H},$$

то произведение в целом можно записать в виде

$$\langle x^2 | U^N | x_1 \rangle$$

или

$$\langle x^2 | UUUU\dots | x_1 \rangle.$$

В этом уравнении U появляется в качестве множителя N раз, где N — это число шагов размером ε . Затем можно вставить между U единичные операторы.

Такое выражение можно назвать амплитудой для данного пути. Но частица не движется вдоль конкретного пути. В действительности в пределе большого числа бесконечно малых интервалов амплитуда является интегралом по всем возможным путям между конечными точками. Красивый факт, открытый Фейнманом, состоит в том, что амплитуда для каждого пути находится в простой связи со знакомым выражением из классической механики — действием вдоль этого пути. Точное выражение для каждого пути:

$$e^{iA/\hbar},$$

где A — действие вдоль отдельного пути.

Фейнмановскую формулировку можно свести к единственному уравнению:

$$C_{1,2} = \int_{\text{пути}} e^{iA/\hbar}. \quad (9.26)$$

Формулировка через интегралы по путям — это не просто элегантный математический трюк; она обладает реальной силой. На самом деле из нее можно вывести оба уравнения Шрёдингера и все коммутационные соотношения квантовой механики. Но в полной мере она раскрывает себя в квантовой теории поля, где является основным средством формулировки законов физики элементарных частиц.

Лекция 10. Гармонический осциллятор

Арт: Думаю, я начинаю врубаться, Ленни. Картина в целом постепенно обретает четкость. Минус Один, Генерал Неопределенность, запутанные парочки, Гамильтониан и даже вырожденные элементы. Что дальше?

Ленни: Осцилляции, Арт. Вибрации. Ты же скрипач — сыграй-ка нам последнюю мелодию этим вечером. Что-нибудь волнующее.

Из всех ингредиентов, пошедших на создание квантового описания мира, два можно считать особенно важными. Один из них — это, конечно, спин, или кубит. В классической логике все можно построить на вопросах типа «да или нет». Подобным же образом в квантовой механике любой логический вопрос в сухом остатке превращается в вопрос о кубитах. В первых лекциях мы потратили много времени на знакомство с куби-

тами. В этой лекции мы узнаем о втором важнейшем ингредиенте квантовой механики — гармоническом осцилляторе.

Гармонический осциллятор — это не конкретный объект, вроде атома водорода или кварка. В действительности это математическая модель, которая помогает понять огромное число явлений. Понятие гармонического осциллятора существует также и в классической физике, но поистине первостепенное значение оно приобретает именно в квантовой теории.

Один из вариантов гармонического осциллятора — это частица, движущаяся под действием линейной возвращающей силы; хрестоматийным примером служит груз на конце пружины. Идеализированная пружина удовлетворяет закону Гука: сила, действующая на смещенную массу, пропорциональна расстоянию, на которую эта масса смешена. Мы называем эту силу *возвращающей*, поскольку она тянет массу назад к положению равновесия.

Другой пример — шарик, катящийся взад и вперед на дне чаши без потери энергии на трение. Подобные системы характеризуются тем, что функция потенциальной энергии в них имеет вид параболы:

$$V(x) = \frac{k}{2}x^2. \quad (10.1)$$

Константу k называют *коэффициентом жесткости*. Если вспомнить, что сила, действующая на объект,

равна градиенту V со знаком минус, то окажется, что эта сила

$$F = -kx. \quad (10.2)$$

Знак минус говорит о том, что сила действует в направлении, противоположном смещению, и тянет массу обратно к исходному положению.

Почему гармонические осцилляторы так распространены в физике? Потому что почти любая гладкая функция выглядит как парабола достаточно близко от своего минимума. На самом деле многие типы систем характеризуются функцией энергии, которую можно приблизенно описать квадратичной функцией от некоторой переменной, характеризующей отклонение от равновесия. Будучи возмущены, такие системы начинают колебаться вокруг положения равновесия. Вот еще некоторые примеры.

- Атом, находящийся в кристаллической решетке. Если он немного смещен от своего положения равновесия, его тянет назад примерно линейная возвращающая сила. Это движение трехмерное и в действительности состоит из трех независимых осцилляций.
- Электрический ток в цепи с низким сопротивлением часто осциллирует с характерной частотой. Математика для таких цепей совпадает с математикой для масс, прикрепленных к пружине.

- Волны. Если возмутить поверхность пруда, по ней пойдут волны. Наблюдая за конкретным местом на поверхности, можно заметить, что поверхность колеблется, когда по ней проходят волны. Это движение можно описать как простой гармонический осциллятор. То же самое относится и к звуковым волнам.
- Электромагнитные волны. Как и любые другие волны, свет и радиоволны колеблются, проходя мимо вас. Та же математика, которая описывает колеблющуюся частицу, применима и к электромагнитным волнам.

Этот список можно продолжать и продолжать, но математика всегда одна и та же. Просто для того, чтобы иметь в виду конкретный пример, будем представлять себе осциллятор грузом, висящим на пружине. Нет нужды говорить, что нам вряд ли потребуется квантовая механика для описания обычного груза на пружине, так что будем представлять себе крошечную версию такой системы и попробуем ее проквантовать.

10.1. Классическое описание

Будем использовать y для обозначения высоты подвешенного груза. Выберем начало отсчета так, чтобы в точке $y = 0$ груз находился в состоянии равновесия, то есть мог бы висеть в покое. Для изучения этой системы как классической можно использовать метод

Лагранжа, который мы изучали в *тome I*. Кинетическая и потенциальная энергии равны $\frac{1}{2}m\dot{y}^2$ и $\frac{1}{2}ky^2$ соответственно.

Как вы помните, лагранжиан — это кинетическая энергия *минус* потенциальная энергия:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{y}^2 - \frac{1}{2}ky^2.$$

Для начала приведем этот лагранжиан к некоторой стандартной форме, заменив y другой переменной, которую будем обозначать x . Эта координата — не что-то новое. Она по-прежнему представляет собой смещение массы. Переходя от y к x , мы просто выбираем более удобные единицы. Определим новую переменную так:

$$x = \sqrt{m}y.$$

С использованием x лагранжиан приобретает вид

$$L = \frac{1}{2}\dot{x}^2 - \frac{1}{2}\omega^2x^2. \quad (10.3)$$

Постоянная ω определяется как $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ и оказывается равной частоте осциллятора.

Выполнив эту замену переменных, мы единообразно описали все возможные осцилляторы. При записи в этой форме осцилляторы отличаются друг от друга только своей частотой ω .

Теперь применим уравнения Лагранжа для вывода уравнений движения. Такая одномерная система описывается единственным уравнением Лагранжа, а именно:

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{d}{dt} \frac{dL}{dx}. \quad (10.4)$$

Применяя эти операции к уравнению (10.3), получаем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \dot{x}. \quad (10.5)$$

Это называется каноническим импульсом, сопряженным с x . Дифференцирование по времени дает

$$\frac{d}{dt} \frac{dL}{dx} = \ddot{x}, \quad (10.6)$$

и тем самым мы получаем правую часть уравнения (10.4). Обратившись к его левой части, находим, что

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -\omega^2 x. \quad (10.7)$$

Приравнивая выражения для левой и правой частей (уравнения (10.7) и (10.6)) уравнения Лагранжа, получаем

$$-\omega^2 x = \ddot{x}. \quad (10.8)$$

Это уравнение является, конечно, эквивалентным $F = ma$. Откуда в нем знак минус? Потому что сила является возвращающей — ее направление противоположно направлению смещения. Вы уже знаете, что решения такого рода уравнений содержат синусы и косинусы. В общем виде решение имеет вид

$$x = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t), \quad (10.9)$$

которое показывает, что ω действительно является частотой осциллятора. Дважды продифференцировав это уравнение, мы получим множитель ω^2 .

УПРАЖНЕНИЕ 10.1

Найдите вторую производную по времени от x в уравнении (10.9) и покажите тем самым, что оно служит решением уравнения (10.8).

10.2. Квантовомеханическое описание

Теперь вернемся к нашей микроскопической версии груза на пружине. Пусть он будет, скажем, не больше одной молекулы. На первый взгляд это кажется абсурдом. Как можно создать такую маленькую пружину? Но на самом деле в природе есть все виды микроскопических пружин. Многие молекулы состоят из двух атомов, например тяжелого атома и легкого. Есть силы,держивающие молекулу в равновесии, когда эти атомы разделены определенным расстоянием. При смещении легкого атома он будет притягиваться обратно к равновесному положению. Такая молекула — это миниатюрная версия груза на пружине, настолько маленькая, что для ее понимания необходимо использовать квантовую механику.

Располагая уже выведенным классическим лагранжианом, попробуем построить квантовомеханическое описание нашей системы. Прежде всего нам нужно пространство состояний. Как мы видели, состояние частицы, движущейся вдоль прямой, представляется вол-

новой функцией $\Psi(x)$. Имеется множество возможных состояний системы, и каждое из них представляется своей волновой функцией. Функция $\Psi(x)$ определяется таким образом, что $\Psi^*(x)\Psi(x)$ является плотностью вероятности (вероятностью в расчете на единичный интервал) обнаружить частицу в положении x :

$$\Psi^*(x)\Psi(x) = P(x).$$

В этом уравнении $P(x)$ обозначает плотность вероятности. Итак, у нас есть нечто вроде кинематики — описание, в каких состояниях система может находиться.

Может ли $\Psi(x)$ быть совершенно произвольной функцией? Помимо требования непрерывности и дифференцируемости, на нее накладывается лишь одно условие — полная вероятность обнаружения частицы в каком-либо положении должна быть 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1. \quad (10.10)$$

Это не выглядит большим ограничением. Какой бы ни оказалась правая часть уравнения, всегда можно умножить $\Psi(x)$ на некоторую константу и добиться, чтобы интеграл был равен 1, если только он не равен нулю или бесконечности. Поскольку величина $\Psi^*(x)\Psi(x)$ положительна, мы можем не беспокоиться о нуле, а вот бесконечность — это совсем другое дело; существует множество функций, которые привели бы к расходимости интеграла в уравнении (10.10). Поэтому условия, накладываемые на разумную волновую функцию, включают требования, чтобы Ψ стремилась

к нулю достаточно быстро, для обеспечения сходимости интеграла. Назовем функции, которые удовлетворяют этому условию, *нормируемыми*.

Есть два вопроса, которые можно поставить в отношении гармонического осциллятора.

- Как вектор состояния меняется со временем? Для ответа на этот вопрос нам надо знать гамильтониан.
- Каковы возможные энергии осциллятора? Они также определяются по гамильтониану.

Итак, чтобы все узнать, нам нужен гамильтониан. К счастью, его можно вывести из лагранжиана, и я сейчас коротко напомню, как это делается. Но сначала вспомните, что канонический импульс, сопряженный с x , определяется как $\partial L / \partial \dot{x}$.¹ Объединяя это с уравнением (10.5), получаем

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \dot{x}.$$

Используя это четкое определение из классической механики, находим, что гамильтониан гармонического осциллятора равен

$$H = p\dot{x} - L,$$

где p — канонический импульс, сопряженный с x , а L обозначает лагранжиан². Мы могли бы работать напрямую с данным определением, но вместо этого

¹ Это объясняется в *томе I*.

² Здесь нет необходимости использовать знак суммирования, поскольку имеется лишь одна степень свободы.

воспользуемся сокращающим приемом. Поскольку лагранжиан — это кинетическая энергия *минус* потенциальная энергия, а гамильтониан — это кинетическая энергия *плюс* потенциальная энергия, иначе говоря, полная энергия. Гамильтониан осциллятора можно записать в виде

$$H = \frac{1}{2} \dot{x}^2 + \frac{1}{2} \omega^2 x^2.$$

Пока все хорошо, но мы еще не закончили. Мы выразили кинетическую энергию через скорость; в квантовой механике, однако, мы никогда не представляем наши наблюдаемые как *операторы* и у нас нет оператора скорости. Чтобы с этим справиться, надо пользоваться координатой и каноническим *импульсом*, которые имеют стандартную операторную форму. Выразить гамильтониан через канонический импульс нетрудно, поскольку

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \dot{x},$$

что позволяет записать

$$H = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} \omega^2 x^2. \quad (10.11)$$

Это классический гамильтониан. Теперь мы можем превратить его в квантовомеханическое уравнение, реинтерпретировав x и p как операторы, определенные своим воздействием на $\Psi(x)$. Как мы уже делали прежде, используем жирные заглавные буквы **X** и **P**, чтобы отличать квантовые операторы от их классиче-

ских партнеров x и p . Из предыдущих лекций мы точно знаем, как работают эти операторы. \mathbf{X} просто умножает волновую функцию на координатную переменную:

$$\mathbf{X}|\Psi(x)\rangle \Rightarrow x\Psi(x).$$

\mathbf{P} принимает ту же форму, что и в других одномерных задачах:

$$\mathbf{P}|\psi(x)\rangle \Rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x).$$

Теперь мы можем вывести действие гамильтониана на волновую функцию, позволив \mathbf{P} действовать на нее дважды. Это та же процедура, которой мы следовали в лекции 9. Иначе говоря,

$$\mathbf{H}|\psi(x)\rangle \Rightarrow \frac{1}{2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left(-i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right) \right) + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \psi(x)$$

или

$$\mathbf{H}|\psi(x)\rangle \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \psi(x). \quad (10.12)$$

Мы используем частные производные, поскольку в общем случае Ψ зависит и от другой переменной — *времени*. Время не является оператором и имеет не такой статус, как x , но вектор состояния изменяется во времени, и мы, таким образом, обращаемся со временем как с параметром. Частные производные указывают, что мы описываем систему «в фиксированный момент времени».

10.3. Уравнение Шрёдингера

Уравнение (10.12) показывает, как гамильтониан воздействует на Ψ . Теперь позволим ему сделать свою работу. Как было сказано в предыдущем разделе, одна из его задач состоит в том, чтобы сообщать, как меняется вектор состояния со временем. Поэтому выпишем зависящее от времени уравнение Шрёдингера:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{H} \psi.$$

Подставляя \mathbf{H} из (10.12), получаем

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2\hbar} \omega^2 x^2 \psi. \quad (10.13)$$

Это уравнение говорит, что если вы знаете функцию Ψ (как вещественную, так и мнимую части) в некоторый момент времени, то можете предсказать, как она будет меняться в будущем. Заметим, что это уравнение комплексное — в нем есть множитель i . Это означает, что даже если Ψ является вещественно-значной в начальный момент времени $t = 0$, у нее очень быстро появится мнимая часть. Любое решение Ψ должно, таким образом, быть комплексной функцией x от t .

Это уравнение можно решить в числах. Например, выполнив расчет на компьютере. Начнем с известного значения функции $\Psi(x)$ и будем понемногу обновлять ее, вычисляя производную. Зная производную, можно вычислить изменение $\Psi(x)$ за небольшой шаг по времени. Затем это приращение можно прибавить к $\Psi(x)$

и продолжать так раз за разом. Оказывается, что с $\Psi(x)$ происходят интересные вещи — она осуществляет движение определенного характера. На самом деле при некоторых условиях она будет формировать волновой пакет, движение которого очень похоже на движение гармонического осциллятора.

10.4. Энергетические уровни

Еще одна задача, для которой может быть полезен гамильтониан, — это вычисление энергетических уровней осциллятора путем нахождения энергетических собственных векторов и собственных значений. Как мы узнали в лекции 4, если известны эти собственные векторы и собственные значения, то можно определить зависимость от времени, не решая дифференциальные уравнения. Это связано с тем, что уже известна зависимость от времени каждого энергетического собственного вектора. Тут вам, возможно, стоит освежить в памяти рецепт шрёдингеровского кета, который был дан в разделе 4.13.

Сейчас сконцентрируемся на нахождении самих энергетических собственных векторов с использованием зависящего от времени уравнения Шрёдингера:

$$\mathbf{H}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle.$$

Индекс E указывает на то, что Ψ_E — это собственный вектор для конкретного собственного значения E . Это

уравнение определяет две вещи: волновые функции $\Psi_E(x)$ и энергетические уровни E . Снизим уровень абстрактности, подставив \mathbf{H} из уравнения (10.12):

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2 \psi_E(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \psi_E(x) = E \psi_E(x). \quad (10.14)$$

Для решения этого уравнения мы должны:

- найти допустимые значения E , при которых существует математическое решение;
- найти собственные векторы и возможные собственные значения энергии.

Сделать это немного труднее, чем вы могли подумать. Оказывается, решения этого уравнения есть для всех значений E , включая комплексные, но большинство этих решений физически абсурдны. Если просто начать с любой точки и решать уравнение Шрёдингера методом малых приращений, то почти всегда окажется, что $\Psi(x)$ растет и «раздувается» при больших значениях x . Другими словами, мы можем найти решение этого уравнения, но лишь очень редко мы обнаружим нормируемое решение.

Фактически для большинства значений E , включая все комплексные значения, решение уравнения (10.14) экспоненциально растет, когда x стремится к $+\infty$, $-\infty$ или к ним обеим. Такого рода решения не имеют физического смысла; это говорит о том, что с колоссальной вероятностью координата осциллятора бесконечно возрастет. Очевидно, что надо наложить

некое условие, которое избавит от таких решений.
Потребуем следующего:

Физическое решение уравнения Шрёдингера должно быть нормируемым.

Это очень сильное ограничение. Фактически почти для всех значений E нормируемых решений не существует. Однако для некоторых, особых значений E такие решения существуют, и мы их найдем.

10.5. Основное состояние

Каков наименьший возможный энергетический уровень гармонического осциллятора? В классической физике энергия никогда не может принимать отрицательные значения, поскольку гамильтониан содержит член x^2 и член p^2 ; для минимизации энергии мы просто задаем p и x равными нулю. Но для квантовой механики это был бы перебор. Принцип неопределенности говорит, что *невозможно* одновременно приравнять к нулю x и p . Лучшее, чего можно достичь — это найти некое компромиссное состояние, в котором x и p не слишком сильно разбросаны. Из-за этого компромисса наименьшее значение энергии *не будет* нулевым. Ни p^2 , ни x^2 не будут равны нулю. Поскольку операторы \mathbf{X}^2 и \mathbf{P}^2 могут иметь только положительные собственные значения, у гармонического осциллятора нет отрицательных энергетических уровней, а фактически у него нет и нулевого уровня.

Если все энергетические уровни системы должны быть положительными, то должен быть наименьший допустимый уровень и соответствующая ему волновая функция. Этот наименьший энергетический уровень называется основным состоянием и обозначается $\Psi_0(x)$. Не забывайте, что индекс 0 не означает, что его энергия равна нулю; он означает, что это наименее возможный уровень.

Есть полезная математическая теорема, помогающая найти основное состояние. Мы не будем ее здесь доказывать, но она очень просто формулируется:

Волновая функция основного состояния для любого потенциала не имеет нулей, и это единственное энергетическое собственное состояние, не имеющее узлов¹.

Таким образом, все, что нам надо сделать, чтобы найти основное состояние гармонического осциллятора, — это найти решение без узлов для некоторого значения E . Не важно, как мы его найдем, — можно использовать любые математические трюки, выдвигать догадки или просто спросить у профессора. Воспользуемся последним способом (роль профессора сыграю я).

Вот функция, которая нам годится:

$$\psi(x) = e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}. \quad (10.15)$$

¹ Узлами волновой функции называются точки (в одномерном случае), линии или поверхности, где ее значение обращается в нуль. — *Примеч. пер.*

Эта функция условно показана на рис. 10.1. Как вы видите, она концентрируется вблизи начала координат, где и следует ожидать концентрации для низшего энергетического состояния. С удалением от начала координат она очень быстро стремится к нулю, так что интеграл плотности вероятности конечен. И, что важно, у нее нет узлов. Так что она вполне может оказаться нашим основным состоянием.

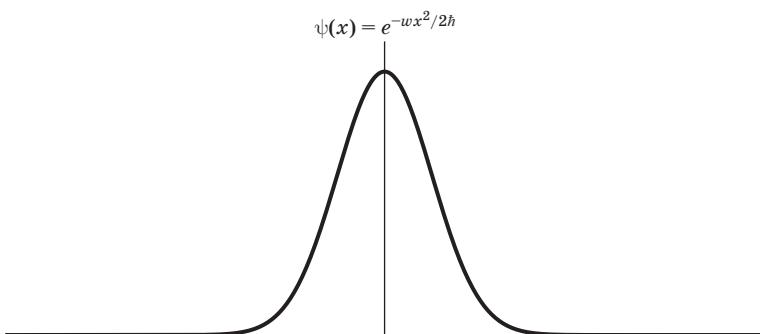


Рис. 10.1. Основное состояние гармонического осциллятора

Посмотрим, что гамильтониан делает с этой функцией. Первый член гамильтониана (в левой части уравнения (10.14)) предписывает применить к $\Psi(x)$ оператор

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Вычислим этот член, беря производные по одной. На первом шаге получаем

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -\frac{\omega}{2\hbar}(2x)e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2},$$

что упрощается до

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -\frac{\omega}{\hbar} x e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Когда берется вторая производная, то под ней будут два множителя, к которым надо применить правило дифференцирования произведения:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{\omega}{\hbar} e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} + \frac{\omega^2}{\hbar^2} x^2 e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Подставим результат в уравнение (10.14) и одновременно заменим ψ в правой части нашей догадкой $e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$:

$$\frac{\hbar}{2} \omega e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} - \frac{1}{2} \omega^2 x^2 e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} = E e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

После сокращения членов, пропорциональных $x^2 e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$, обнаруживается тот замечательный факт, что решение уравнения Шрёдингера сводится к решению

$$\frac{\hbar}{2} \omega e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} = E e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Как видите, единственный способ решить это уравнение — положить E равным $\frac{\omega\hbar}{2}$. Другими словами, мы получили не только волновую функцию, но также и энергию основного состояния. Обозначив эту энергию E_0 , можно записать

$$E_0 = \frac{\omega\hbar}{2}. \quad (10.16)$$

Ну а волновая функция в основном состоянии — это просто функция Гаусса, которую нам указал профессор:

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Он вообще толковый спец, этот профессор.

10.6. Операторы рождения и аннигиляции

На протяжении этих лекций мы увидели два способа думать о квантовой механике. Они восходят к Гейзенбергу и Шрёдингеру. Гейзенберг любил алгебру, матрицы и (если бы он знал этот термин) линейные операторы. Шрёдингер, напротив, мыслил в терминах волновых функций и волновых уравнений, самым знаменитым примером которых стало уравнение Шрёдингера. Конечно, оба эти способа мышления не противоречат друг другу; функции образуют векторное пространство, а производные являются операторами.

До сих пор, изучая гармонический осциллятор, мы концентрировались на функциях и дифференциальных уравнениях. Но во многих случаях, и в особенности для гармонического осциллятора, намного более мощным инструментом является операторный метод. Он сокращает всё исследование волновых функций и волновых уравнений до очень небольшого числа алгебраических приемов, которые почти всегда задействуют коммутационные соотношения. Фактически всякий раз, когда встречается пара операторов, мой вам совет — про-

верьте их коммутатор. Если этот коммутатор оказался новым оператором, которого вы прежде не видели, найдите его коммутатор с исходной парой. Вот тут-то и начинается самое интересное.

Очевидно, что этот совет может привести к бесконечной цепочке скучных выкладок. Но иногда везет, и вы обнаруживаете множество операторов, замкнутое относительно действия коммутатора. Если такое происходит — не упускайте свой шанс; как вы уже видели, операторный метод поразительно силен.

Теперь применим этот подход к гармоническому осциллятору. Начнем с гамильтониана, выраженного через операторы \mathbf{P} и \mathbf{X} :

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2}{2}. \quad (10.17)$$

Чтобы найти остальные энергетические уровни, воспользуемся кое-какими трюками. Идея состоит в том, чтобы использовать свойства \mathbf{X} и \mathbf{P} (в частности, коммутационное соотношение $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar$) для построения двух новых операторов, называемых операторами *рождения* и *аннигиляции*. Когда оператор рождения действует на энергетический собственный вектор (или собственную функцию), он порождает новый собственный вектор, соответствующий следующему по величине энергетическому уровню. Оператор аннигиляции делает прямо противоположное: он порождает собственный вектор, энергия которого на один уровень ниже собственного вектора, к которому он применяется. Так что, грубо говоря, они создают и аннигилируют энергию. Их также

называют операторами *повышения и понижения*. Но помните: операторы действуют на векторы состояния, а не на систему. Чтобы увидеть, как работают эти операторы, перепишем гамильтониан в форме

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2). \quad (10.18)$$

Это классический и одновременно квантовомеханический гамильтониан: он останется корректным, если использовать строчные буквы p и x . Однако мы используем \mathbf{P} и \mathbf{X} , поскольку намерены сконцентрироваться на квантовомеханическом гамильтониане.

Начнем с выкладок, которые корректны в классической физике, но потребуют некоторых модификаций в квантовой механике. В скобках выше записана сумма квадратов. Согласно формуле

$$a^2 + b^2 = (a + ib)(a - ib)$$

можно переписать выражение для гамильтониана так:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{P} + i\omega \mathbf{X})(\mathbf{P} - i\omega \mathbf{X}), \quad (10.19)$$

и это почти корректно. Почему *почти*? Потому что в квантовой механике \mathbf{P} и \mathbf{X} не коммутируют, и нам надо внимательно следить за порядком операций. Раскроем скобки в нашем выражении и посмотрим, в чем могут быть отличия от исходного гамильтониана в уравнении (10.18). Тщательно следя за порядком множителей, можно преобразовать это выражение следующим образом:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}(\mathbf{P} + i\omega \mathbf{X})(\mathbf{P} - i\omega \mathbf{X}) &= \frac{1}{2}(\mathbf{P}^2 + i\omega \mathbf{XP} - i\omega \mathbf{PX} - i^2\omega^2 \mathbf{X}^2) = \\
&= \frac{1}{2}(\mathbf{P}^2 + i\omega(\mathbf{XP} - \mathbf{PX}) - i^2\omega^2 \mathbf{X}^2) = \\
&= \frac{1}{2}(\mathbf{P}^2 + i\omega(\mathbf{XP} - \mathbf{PX}) + \omega^2 \mathbf{X}^2) = \\
&= \frac{1}{2}(\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2) + \frac{1}{2}i\omega(\mathbf{XP} - \mathbf{PX}).
\end{aligned}$$

Рассмотрим правую пару скобок в последней строке. Мы встречали такое выражение раньше — это коммутатор \mathbf{X} и \mathbf{P} . В действительности нам уже известно его значение:

$$(\mathbf{XP} - \mathbf{PX}) = [\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar.$$

Таким образом, наш разложенный на множители гамильтониан приобретает вид

$$\frac{1}{2}(\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2) + \frac{1}{2}i\omega i\hbar$$

или

$$\frac{1}{2}(\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2) - \frac{1}{2}\omega\hbar.$$

Другими словами, разложение на множители, с которого мы начали в уравнении (10.19), в действительности меньше гамильтониана на $\frac{\omega\hbar}{2}$. Для записи настоящего гамильтониана нужно добавить поправку $\frac{\omega\hbar}{2}$:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{P} + i\omega \mathbf{X})(\mathbf{P} - i\omega \mathbf{X}) + \frac{\omega\hbar}{2}.$$

Переписывание гамильтониана то в одном, то в другом виде может казаться бесполезным занятием, но,

проверьте мне, это не так. Прежде всего, последний член является всего лишь аддитивной константой, которая добавляет величину $\frac{\omega\hbar}{2}$ к любому собственному значению энергии. Мы пока можем ее игнорировать. Позднее, когда мы справимся с остальной задачей, ее можно будет снова добавить. Суть же задачи заключена в выражении $(\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X})$. Оказывается, что эти два множителя, $(\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})$ и $(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X})$, обладают некоторыми замечательными свойствами. На самом деле это операторы повышения и понижения (или операторы создания и аннигиляции), о которых я упоминал выше. Пока это для нас просто названия, но в дальнейшем мы увидим, что это удачно выбранные термины. Естественно было бы определить оператор понижения как

$$\mathbf{a}^- = (\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X}),$$

а оператор повышения как

$$\mathbf{a}^+ = (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X}).$$

Но история иногда выбирает не самый очевидный путь. Исторически в определениях операторов повышения и понижения присутствует дополнительный множитель. Вот их официальные определения:

$$\mathbf{a}^- = \frac{i}{\sqrt{2\omega\hbar}}(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X}), \quad (10.20)$$

$$\mathbf{a}^+ = \frac{-i}{\sqrt{2\omega\hbar}}(\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X}). \quad (10.21)$$

Если использовать эти определения, гамильтониан приобретает очень простой вид:

$$\mathbf{H} = \omega\hbar(\mathbf{a}^+\mathbf{a}^- + 1/2). \quad (10.22)$$

У \mathbf{a}^+ и \mathbf{a}^- есть только два свойства, которые нам надо знать. Первое из них состоит в том, что они являются эрмитовыми сопряжениями друг для друга. Это вытекает из их определений. Но самый смак — это другое свойство: коммутатор \mathbf{a}^+ и \mathbf{a}^- равен

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+] = 1.$$

Это легко доказать. Сначала, используя определения, запишем

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+] = \frac{1}{2\omega\hbar}[(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X}), (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})].$$

Затем используем коммутационное соотношение $[\mathbf{X}, \mathbf{X}] = 0$, $[\mathbf{P}, \mathbf{P}] = 0$ и $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar$. Применяя их к записанному выше уравнению, без труда находим, что $[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+] = 1$.

Гамильтониан (10.22) можно еще более упростить, определив новый оператор

$$\mathbf{N} = \mathbf{a}^+\mathbf{a}^-,$$

называемый *оператором числа частиц*. И вновь это лишь название, но как мы увидим, очень хорошее название. С использованием оператора числа частиц гамильтониан приобретает форму

$$\mathbf{H} = \omega\hbar(\mathbf{N} + 1/2). \quad (10.23)$$

Все, что мы до сих пор сделали, это ввели обозначения a^+ , a^- и N , благодаря которым гамильтониан стал выглядеть обманчиво простым; неочевидно, однако, чтобы мы приблизились сколько-нибудь к определению энергетических собственных значений. Чтобы продвинуться дальше, вспомним мой совет: всякий раз, когда видите два оператора, прокоммутируйте их. В данном случае мы уже знаем один коммутатор:

$$[a^-, a^+] = 1. \quad (10.24)$$

Теперь найдем коммутаторы операторов повышения и понижения с оператором числа частиц N . Сделаем это методом грубой силы. Вот последовательность шагов:

$$[a^-, N] = a^-N - Na^- = a^-a^+a^- - a^+a^-a^-.$$

Теперь скомбинируем это следующим образом:

$$[a^-, N] = (a^-a^+ - a^+a^-)a^-.$$

Это кажется сложным, пока мы не заметим, что выражение в скобках равно просто $[a^-, a^+]$, о котором мы знаем, что оно равно 1. Упростив запись с учетом этого факта, получаем

$$[a^-, N] = a^-.$$

То же самое можно проделать с a^+ и N . Результат будет почти таким же, за исключением знака. Вот весь список наших коммутаторов одним компактным пакетом:

$$\begin{aligned} [\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+] &= 1, \\ [\mathbf{a}^-, \mathbf{N}] &= \mathbf{a}^-, \\ [\mathbf{a}^+, \mathbf{N}] &= -\mathbf{a}^+. \end{aligned} \tag{10.25}$$

Это можно было бы назвать коммутаторной алгеброй: набор операторов, *замкнутый* относительно коммутации. Коммутаторные алгебры обладают замечательными свойствами, которые делают их одним из любимых инструментов физиков-теоретиков. Сейчас мы увидим силу этой коммутаторной алгебры на хрестоматийном примере гармонического осциллятора, применив ее для нахождения собственных значений и собственных векторов \mathbf{N} . А как только мы их узнаем, сразу сможем определить собственные значения \mathbf{N} по формуле (10.23). Хитрость заключается в том, чтобы использовать своего рода метод индукции: мы начнем с допущения, что уже знаем одно из собственных значений и собственный вектор \mathbf{N} . Обозначим это собственное значение n , а собственный вектор $|n\rangle$. По определению,

$$\mathbf{N}|n\rangle = n|n\rangle.$$

Теперь рассмотрим новый вектор, получающийся в результате действия \mathbf{a}^+ на $|n\rangle$. Докажем, что результат является другим собственным вектором \mathbf{N} с другим собственным значением. И вновь сделаем это прямым применением соответствующих соотношений. Для начала запишем выражение $\mathbf{N}(\mathbf{a}^+|n\rangle)$ в немного более усложненной форме:

$$\mathbf{N}(\mathbf{a}^+|n\rangle) = [\mathbf{a}^+\mathbf{N} - (\mathbf{a}^+\mathbf{N} - \mathbf{N}\mathbf{a}^+)]|n\rangle.$$

Выражение в квадратных скобках в правой части — это то же самое, что $\mathbf{N}\mathbf{a}^+$ с прибавлением и вычитанием члена $\mathbf{a}^+\mathbf{N}$. Но обратите внимание, что выражение в круглых скобках — это последний из коммутаторов в списке (10.25). Если подставить его, то получится

$$\mathbf{N}(\mathbf{a}^+|n\rangle) = \mathbf{a}^+(\mathbf{N} + 1)|n\rangle.$$

Последний шаг состоит в использовании того факта, что $|n\rangle$ является собственным вектором \mathbf{N} с собственным значением n . Это означает, что можно заменить $(\mathbf{N} + 1)$ на $(n + 1)$:

$$\mathbf{N}(\mathbf{a}^+|n\rangle) = (n + 1)(\mathbf{a}^+|n\rangle). \quad (10.26)$$

Как всегда, включая автопилот, надо внимательно следить за возможными интересными результатами. Уравнение (10.26) весьма любопытное. Оно утверждает, что вектор $\mathbf{a}^+|n\rangle$ является собственным вектором \mathbf{N} с собственным значением $(n + 1)$. Другими словами, зная собственный вектор $|n\rangle$, мы нашли другой собственный вектор, собственное значение которого больше на 1. Все это можно выразить одним уравнением

$$\mathbf{a}^+|n\rangle = |n + 1\rangle. \quad (10.27)$$

Очевидно, что это можно делать снова и снова, находя собственные векторы $|n + 2\rangle$, $|n + 3\rangle$ и так далее. Обратите

внимание, что мы обнаружили: если есть собственное значение n , то над ним должна существовать бесконечная последовательность собственных значений, разделенных целочисленными интервалами. Поэтому название «оператор *повышения*» выглядит очень удачным.

А что можно сказать об операторе понижения? Вряд ли вы удивитесь, узнав, что $\mathbf{a}^-|n\rangle$ дает собственный вектор, собственное значение которого на единицу ниже:

$$\mathbf{a}^-|n\rangle = |n - 1\rangle. \quad (10.28)$$

Это предполагает, что должна существовать бесконечная последовательность собственных значений ниже n , но это неверно. Мы уже знаем, что основное состояние имеет положительную энергию, и поскольку $H = \omega\hbar(N + 1/2)$, исходящая последовательность должна заканчиваться. Но закончиться она может только одним способом — на таком собственном векторе $|0\rangle$, действуя на который, \mathbf{a}^- дает нуль. (Не следует путать $|0\rangle$ и нулевой вектор¹.) В виде формулы это можно выразить так:

$$\mathbf{a}^-|0\rangle = 0. \quad (10.29)$$

Будучи низшим энергетическим состоянием, $|0\rangle$ является основным состоянием, и его энергия равна

¹ 0-вектор — это вектор, все компоненты которого равны 0. В то время как вектор $|0\rangle$ — это вектор состояния с ненулевыми компонентами.

$E_0 = \omega\hbar/2$. Это собственный вектор \mathbf{N} с собственным значением, равным 0. Мы часто говорим, что основное состояние *аннигилируется* оператором a^- .

Как вы видите, абстрактная конструкция из a^+ , a^- и \mathbf{N} принесла плоды. Она позволила найти весь спектр энергетических уровней гармонического осциллятора, не решая сложных уравнений. Этот спектр состоит из следующих значений энергии:

$$E_n = \omega\hbar(n + 1/2) = \omega\hbar(1/2, 3/2, 5/2, \dots). \quad (10.30)$$

Квантование энергетических уровней гармонического осциллятора было одним из первых результатов квантовой механики и, пожалуй, самым важным. Атом водорода — это прекрасный пример применения квантовой механики, но, в конце концов, это лишь атом водорода. С другой стороны, гармонический осциллятор проявляется везде — отibrений кристаллов до электрических цепей и электромагнитных волн. Этот список можно продолжать и продолжать. Даже макроскопические осцилляторы, вроде ребенка на качелях, имеют квантованные энергетические уровни, однако присутствие постоянной Планка в уравнении (10.30) означает, что интервалы между уровнями настолько малы, что совершенно не обнаружимы.

Бесконечный спектр положительных энергетических уровней гармонического осциллятора иногда сравнивают с башней, а иногда — с лестницей. Схематически он проиллюстрирован на рис. 10.2.

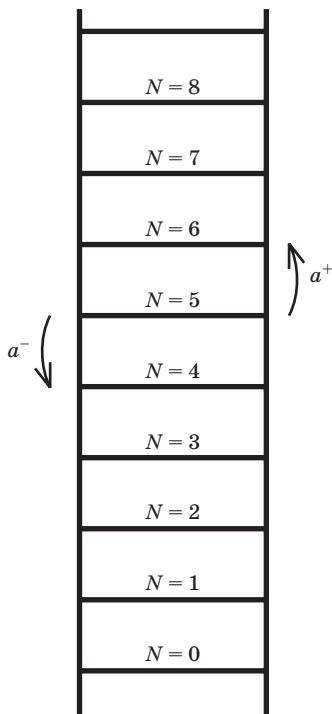


Рис. 10.2. Лестница энергетических уровней гармонического осциллятора. Энергетические уровни разделены равными интервалами. Операторы a^+ и a^- соответственно поднимают и опускают энергетические уровни. N имеет нижний предел, равный нулю (основное состояние), но не имеет верхнего предела

10.7. Назад к волновым функциям

Проделанное упражнение в полной мере показало удивительную мощь операторной алгебры. Операторный

метод действительно замечателен. Но он также и слишком абстрактен. Полезен ли он для нахождения волновых функций, которые намного конкретнее и которые проще визуализировать? Безусловно.

Начнем с основного состояния. Как мы только что видели в уравнении (10.29), основное состояние уникально тем, что оно аннигилируется оператором a^- . Давайте теперь выразим уравнение (10.29) через операторы координаты и импульса, а также волновую функцию основного состояния $\Psi_0(x)$:

$$\frac{i}{\sqrt{2m\hbar}}(\mathbf{P} - i\omega \mathbf{X})\psi_0(x) = 0,$$

или, если разделить на постоянный множитель,

$$(\mathbf{P} - i\omega \mathbf{X})\Psi_0(x) = 0.$$

Если теперь заменить \mathbf{P} на $-i\hbar \frac{d}{dx}$, получится дифференциальное уравнение первого порядка, которое намного проще уравнения Шрёдингера, имеющего второй порядок:

$$\frac{d\Psi_0}{dx} = -\frac{\omega x}{\hbar}\Psi_0(x).$$

Это простое дифференциальное уравнение, которое легко решить. Или вы можете просто проверить, что волновая функция основного состояния

$$e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

из уравнения (10.15) является его решением. Вычисление волновых функций возбужденных (неосновных)

состояний еще проще — нам вообще не понадобится решать никаких уравнений. Просто поднимемся вверх по лестнице на $n = +1$. Сделать это можно, применив оператор \mathbf{a}^+ к основному состоянию. Напомню, что волновая функция для этого нового состояния обозначается $\Psi_1(x)$.

Чтобы не таскать константу $i/\sqrt{2\omega\hbar}$ по всем выкладкам, мы просто отбросим ее в нашем определении \mathbf{a}^+ . Это влияет только на числовой коэффициент. Получится уравнение

$$\Psi_1(x) = (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})\Psi_0(x)$$

или

$$\psi_1(x) = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + i\omega x \right) e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Вынося за скобки i , получаем

$$\psi_1(x) = i \left(-\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \omega x \right) e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Самая «трудная» часть работы — это взятие несложной производной от $e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$. Вот результат:

$$\psi_1(x) = 2i\omega x e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

или

$$\psi_1(x) = 2i\omega x \psi_0(x).$$

Единственное важное различие между Ψ_0 и Ψ_1 состоит в наличии множителя x в Ψ_1 . Как результат, волновая функция первого возбужденного состояния имеет

ноль, или узел, в точке $x = 0$. Та же схема повторяется, когда мы поднимаемся выше по лестнице: у каждого следующего возбужденного состояния появляется дополнительный узел. Посмотрим, как работает эта схема при вычислении второго возбужденного состояния, соответствующего $n = 2$. Все, что нам надо сделать, это применить a^+ еще раз:

$$\psi_2(x) = i \left(-\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \omega x \right) \left(x e^{-\frac{\omega x^2}{2\hbar}} \right).$$

Видно, что слагаемое ωx приведет к появлению члена ωx^2 . Операция $-\frac{\partial}{\partial x}$ между тем вызовет появление двух членов, в силу правила дифференцирования произведения. Один из них будет связан с дифференцированием экспоненты (и породит еще один член ωx). Другой появится при взятии производной от x . Ясно, что в итоге у нас появится квадратичный полином. Если взять все эти производные, то получится следующая результирующая волновая функция

$$\psi_2(x) = (-\hbar + 2\omega x^2) e^{-\frac{\omega x^2}{2\hbar}}.$$

И так продолжается на всем пути по лестнице. Тут можно заметить и еще одну повторяющуюся схему: каждая собственная функция является полиномом от x , умноженным на $e^{-\frac{\omega x^2}{2\hbar}}$. Поскольку экспонента сходится к нулю быстрее любого полиномиального роста, всякая собственная функция асимптотически стремится к нулю, когда x уходит в плюс или минус

бесконечность. Также поскольку степень очередного полинома на единицу выше степени предыдущего, каждая следующая собственная функция имеет больше нулей, чем предшествующая¹. Этим также объясняется, почему в последовательности собственных функций чередуются симметричные и асимметричные. А именно собственные функции с полиномами четных степеней симметричны, а с полиномами нечетных степеней — асимметричны. Сами полиномы в этой последовательности хорошо известны. Их называют *полиномами Эрмита*. Собственная функция основного состояния $e^{-\frac{\omega}{2}x^2}$, которая появляется и во всех собственных функциях, соответствующих более высоким уровням энергии, симметрична относительно x .

На рис. 10.3 показаны собственные функции для нескольких различных уровней энергии. Каждая следующая собственная функция колеблется быстрее, чем предыдущая. Это соответствует увеличению импульса. Чем быстрее колеблется волновая функция, тем больше импульс системы. На высоких энергетических уровнях волновая функция все более расплывается. С физической точки зрения это означает, что масса дальше отходит от положения равновесия и движется быстрее.

¹ Оказывается, эти нули приходятся на вещественные значения x , но это неочевидно из наших выкладок. С физической точки зрения эти нули кажутся несколько странными, поскольку они отмечают места, где движущаяся масса никогда не может быть обнаружена, хотя она постоянно шмыгает через них туда и обратно.

Лекция 10. Гармонический осциллятор

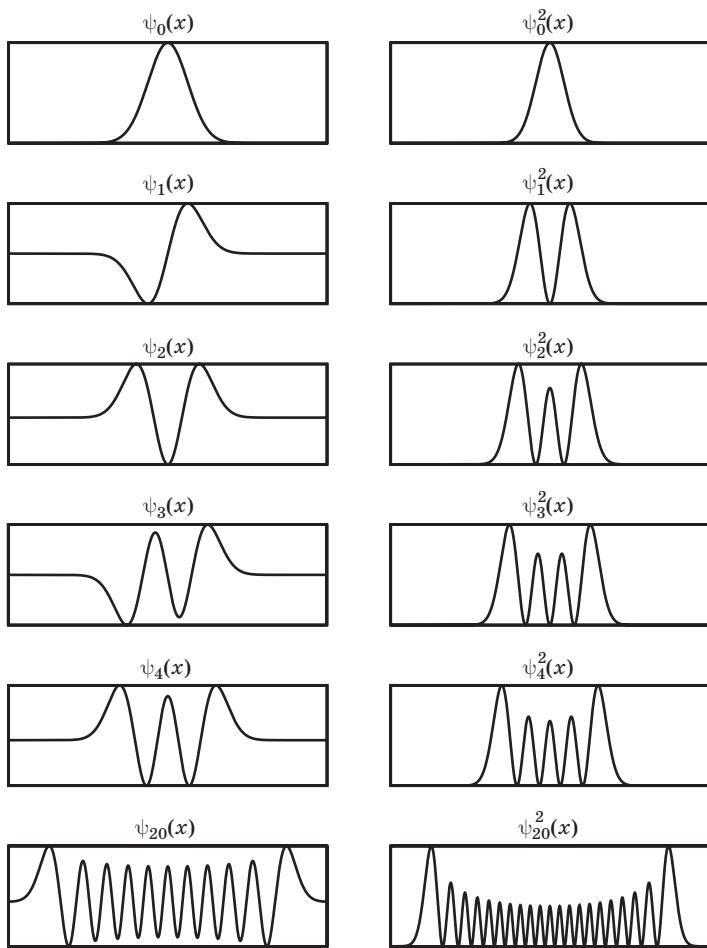


Рис. 10.3. Собственные функции гармонического осциллятора. Слева показаны амплитуды, справа — вероятности. Волновые функции более высокого уровня колеблются быстрее и распространяются шире

Эти собственные функции несут нам еще один важный урок. Хотя они приближаются к нулю асимпто-

тически (и очень быстро), они никогда не достигают нуля. Это значит, что есть небольшой, но конечный шанс обнаружить частицу «вне чаши», которая задает функцию потенциальной энергии. Данное явление называется *квантовым туннелированием* и совершенно незнакомо классической физике.

10.8. Важность квантования

В ходе этих лекций мы забрались на высокую гору, но она не последняя. С нынешней наблюдательной точки уже просматривается величественный ландшафт квантовой теории поля. Это материал для другой книги. Или даже для трех. Но все равно, даже отсюда видна часть этой территории.

Рассмотрим, например, электромагнитное излучение в полости, изображенной на рис. 10.4. В данном контексте полость — это область пространства, ограниченная парой идеально отражающих зеркал, между которыми излучение может бесконечно ходить туда и обратно. Можете представлять себе полость как металлическую трубку, вдоль которой излучение движется в обоих направлениях.

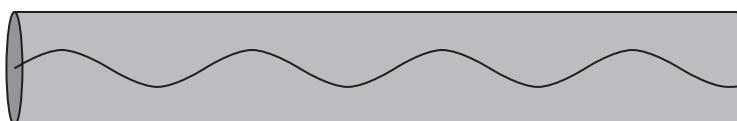


Рис. 10.4. Электромагнитное излучение в полости

Имеется множество длин волн, подходящих для данной полости. Рассмотрим волны длиной λ . Как и все волны, они колеблются, во многом подобно грузу на конце пружины. Но тут важно не запутаться: осцилляторы это не массы на пружинах. В действительности осциллируют электрическое и магнитное поля. Для каждой длины волны имеется математический гармонический осциллятор, описывающий амплитуду, или силу поля. То есть множество гармонических осцилляторов колеблется одновременно. К счастью, однако, все они колеблются независимо, так что можно сконцентрировать внимание на волнах одной определенной длины и игнорировать все остальные.

Есть только одно число, связанное с гармоническим осциллятором, а именно его частота. Возможно, вы уже знаете, как вычислить частоту волны с длиной λ :

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}.$$

В классической физике, конечно, частота — это просто частота. Но в квантовой механике частота определяет квантовую энергию осциллятора. Другими словами, энергия, содержащаяся в волнах длиной λ , равна

$$(n + 1/2)\hbar\omega.$$

Член $(1/2)\hbar\omega$ несуществен для наших целей. Он называется энергией основного состояния и его можно игнорировать. Тогда энергия волн длиной λ будет иметь вид

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda} n,$$

где n может быть любым числом от нуля и больше. Другими словами, энергия электромагнитной волны квантуется на неделимые порции величиной

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda}.$$

Для классической физики это выглядит крайне странно. Независимо от того, что вы делаете, энергия всегда приходит неделимыми порциями.

Возможно, вы уже знаете, что эти порции называются фотонами. На самом деле *фотон* — это просто другое название для квантованной порции энергии в квантовом гармоническом осцилляторе. Но те же самые факты можно описать и другим способом. Будучи неделимыми, фотоны могут рассматриваться как элементарные частицы. О волне, возбужденной до своего n -го квантового состояния, можно думать как о совокупности n фотонов.

Какова энергия одного фотона? Тут все ясно. Она просто равна энергии, которая нужна, чтобы добавить еще одну порцию, а именно

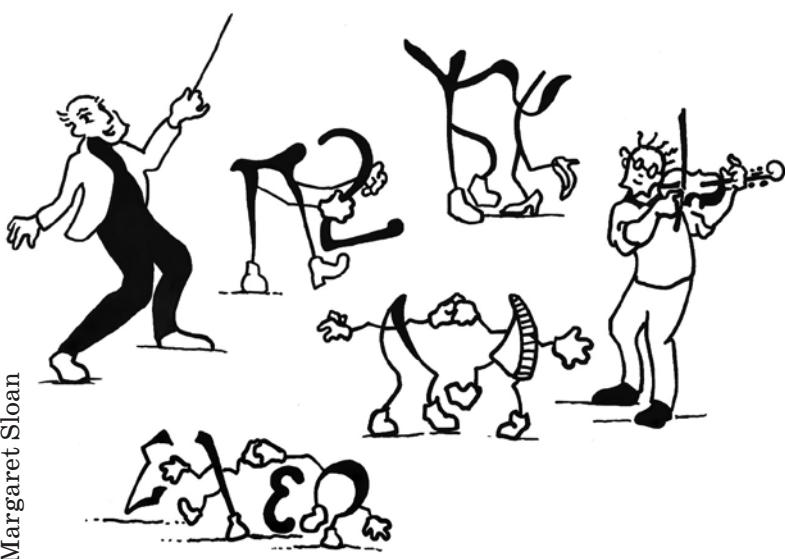
$$E(\lambda) = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}.$$

И тут мы видим идею, которая доминирует в физике более столетия: чем меньше длина волны фотона, тем выше его энергия. С чего бы физикам интересоваться созданием коротковолновых фотонов, если это означает повышение затрат энергии? Ответ теперь очевиден. Как говорилось в лекции 1, чтобы разглядеть объект

Лекция 10. Гармонический осциллятор

данного размера, нужно использовать волны того же или меньшего размера. Чтобы увидеть человеческую фигуру, вполне достаточно длины волны в несколько дюймов. Чтобы увидеть пылинку, понадобится видимый свет с гораздо более короткой волной. Чтобы разглядеть часть протона, длина волны должна быть короче 10^{-15} метра, и соответствующие фотоны будут очень энергичными. В итоге все возвращается к гармоническому осциллятору.

Этим замечанием, друзья, мы завершаем этот том «Теоретического минимума». Я надеюсь увидеть вас снова на лекциях по специальной теории относительности.



Приложение

Матрицы Паули

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Действие спиновых операторов

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{aligned} \sigma_z |u\rangle &= |u\rangle \\ \sigma_x |u\rangle &= |d\rangle \\ \sigma_y |u\rangle &= i|d\rangle \end{aligned}$$

$$|d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{aligned} \sigma_z |d\rangle &= -|d\rangle \\ \sigma_x |d\rangle &= |u\rangle \\ \sigma_y |d\rangle &= -i|u\rangle \end{aligned}$$

Приложение

$$|r\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \Leftrightarrow \sigma_z |r\rangle = |l\rangle$$

$$\sigma_x |r\rangle = |r\rangle$$

$$\sigma_y |r\rangle = -i |l\rangle$$

$$|l\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \Leftrightarrow \sigma_z |l\rangle = |r\rangle$$

$$\sigma_x |l\rangle = -|l\rangle$$

$$\sigma_y |l\rangle = i |r\rangle$$

$$|i\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \Leftrightarrow \sigma_z |i\rangle = |o\rangle$$

$$\sigma_x |i\rangle = i |o\rangle$$

$$\sigma_y |i\rangle = |i\rangle$$

$$|o\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \Leftrightarrow \sigma_z |o\rangle = |i\rangle$$

$$\sigma_x |o\rangle = -i |i\rangle$$

$$\sigma_y |o\rangle = -|o\rangle$$

Изменение базиса

$$|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

$$|o\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

Компоненты спина в направлении \hat{n}

В векторных обозначениях

$$\sigma_n = \vec{\sigma} \cdot \hat{n}$$

В компонентной форме

$$\sigma_n = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z$$

В развернутой форме

$$\sigma_n = n_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + n_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + n_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

В форме одной матрицы

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} n_z & (n_x - i n_y) \\ (n_x + i n_y) & -n_z \end{pmatrix}$$

Таблица умножения спиновых операторов

Замечание об обозначениях: в таблице 3 ниже буква i используется в двух разных смыслах. Внутри кета, как, например, в $|io\rangle$, это часть метки состояния — io означает «вперед-назад» (*«in-out»*). Но когда буква i появляется вне кета, как, например, в записи $i|oo\rangle$, она обозначает комплексное число — мнимую единицу.

Таблица 1. Базис «вверх-вниз»

		Двухспиновые собственные векторы			
		$ uu\rangle$	$ ud\rangle$	$ du\rangle$	$ dd\rangle$
σ_z	$ uu\rangle$	$ ud\rangle$	$- du\rangle$	$- dd\rangle$	
σ_x	$ du\rangle$	$ dd\rangle$	$ uu\rangle$	$ ud\rangle$	
σ_y	$i du\rangle$	$i dd\rangle$	$-i uu\rangle$	$-i ud\rangle$	
τ_z	$ uu\rangle$	$- ud\rangle$	$ du\rangle$	$- dd\rangle$	
τ_x	$ ud\rangle$	$ uu\rangle$	$ dd\rangle$	$ du\rangle$	
τ_y	$i ud\rangle$	$-i uu\rangle$	$i dd\rangle$	$-i du\rangle$	

Таблица 2. Базис «вправо-влево»

		Двухспиновые собственные векторы			
		$ rr\rangle$	$ rl\rangle$	$ lr\rangle$	$ ll\rangle$
σ_z		$ lr\rangle$	$ ll\rangle$	$ rr\rangle$	$ rl\rangle$
σ_x		$ rr\rangle$	$ rl\rangle$	$- lr\rangle$	$- ll\rangle$
σ_y		$-i lr\rangle$	$-i ll\rangle$	$i rr\rangle$	$i rl\rangle$
τ_z		$ rl\rangle$	$ rr\rangle$	$ ll\rangle$	$ lr\rangle$
τ_x		$ rr\rangle$	$ rl\rangle$	$ lr\rangle$	$- ll\rangle$
τ_y		$-i rl\rangle$	$i rr\rangle$	$-i ll\rangle$	$i lr\rangle$

Приложение

Таблица 3. Базис «вперед-назад»

		Двухспиновые собственные векторы			
		$ ii\rangle$	$ io\rangle$	$ oi\rangle$	$ oo\rangle$
σ_z		$ oi\rangle$	$ oo\rangle$	$ ii\rangle$	$ io\rangle$
σ_x		$i oi\rangle$	$i oo\rangle$	$- ii\rangle$	$- io\rangle$
σ_y		$ ii\rangle$	$ io\rangle$	$- oi\rangle$	$- oo\rangle$
τ_z		$ io\rangle$	$ ii\rangle$	$ oo\rangle$	$ oi\rangle$
τ_x		$i io\rangle$	$-i ii\rangle$	$i oo\rangle$	$-i oi\rangle$
τ_y		$ ii\rangle$	$- io\rangle$	$ oi\rangle$	$- oo\rangle$

Л. Сасскинд, А. Фридман
Квантовая механика.
Теоретический минимум

Перевел с английского А. Сергеев

Научный консультант Дмитрий Горбунов,
кандидат физико-математических наук

Заведующий редакцией	<i>П. Щеголев</i>
Ведущий редактор	<i>Ю. Сергиенко</i>
Художник обложки	<i>Л. Адуевская</i>
Корректоры	<i>В. Ганчурина, В. Листова</i>
Верстка	<i>А. Шляго</i>

ООО «Питер Пресс», 192102, Санкт-Петербург, ул. Андреевская (д. Волкова),
д. 3, литер А, пом. 7Н.
Налоговая льгота — общероссийский классификатор продукции ОК 034-2014,
58.11.12 — Книги печатные профессиональные, технические и научные.
Подписано в печать 15.10.14. Формат 60x90/16. Усл. п. л. 25,000. Тираж 5000. Заказ
в ООО «ИПК Парето-Принт». 170546, Тверская область, Промышленная зона Боровлево-1,
комплекс №3А, www.pareto-print.



П. Феррейра
**ИДЕАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ.
БИТВА ЗА ОБЩУЮ ТЕОРИЮ
ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ**

Каждый человек в мире слышал что-то о знаменитой теории относительности, но мало кто понимает ее сущность. А ведь теория Альберта Эйнштейна совершила переворот не только в физике, но и во всей современной науке, полностью изменила наш взгляд на мир! Революционная идея Эйнштейна об объединении времени и пространства вот уже более ста лет остается источником восторгов и разочарований, сюрпризов и гениальных озарений для самых пытливых умов. История пути к пониманию этой всеобъемлющей теории сама по себе необыкновенна, и поэтому ее следует рассказать миру. Британский астрофизик Педро Феррейра решил повторить успех Стивена Хокинга и написал научно-популярную книгу, в которой доходчиво объясняет людям, далеким от сложных материй, что такое теория относительности и почему споры вокруг нее не утихают до сих пор.



Э. Уилсон
ХОЗЯЕВА ЗЕМЛИ.
СОЦИАЛЬНОЕ ЗАВОЕВАНИЕ
ПЛАНЕТЫ ЧЕЛОВЕЧЕСТВОМ

Новая книга известного биолога и социолога Эдварда Уилсона, ведущего ученого Гарвардского университета и лауреата Пулитцеровской премии, которого часто называют наследником великого Дарвина, суммирует предыдущие работы и исследования автора. Откуда мы пришли? Кто мы? Куда мы идем? Эдвард Уилсон создал удивительно сильную, ясную и страстную работу, которая отвечает на эти три фундаментальных вопроса религии, философии и науки, одновременно кардинальным образом переосмысливая теорию эволюции и ставя в качестве главной движущей эволюционной силы семью и групповой отбор. Уилсон доказывает, что история не имеет никакого смысла без предыстории, а предыстория не имеет смысла без биологии. Демонстрируя, что источники морали, религии и творчества носят принципиально биологический характер, Уилсон дает нам наиболее ясное и понятное объяснение о происхождении человека и причинах, приведших к нашему господству в биосфере Земли.



Л. Сасскинд, Дж. Грабовски
ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ МИНИМУМ.
ВСЕ, ЧТО НУЖНО ЗНАТЬ
О СОВРЕМЕННОЙ ФИЗИКЕ

«Теоретический минимум» — книга для тех, кто пропускал уроки физики в школе и институте, но уже жалеет об этом. Хотите разобраться в основах естественных наук и научиться думать и рассуждать так, как это делают современные физики? В оригинальной и нестандартной форме известные американские ученые Леонард Сасскинд и Джордж Грабовски предлагают вводный курс по математике и физике для пытливых умов. В отличие от прочих научно-популярных книг, пытающихся доступно объяснить законы физики, ловко уклоняясь от уравнений и формул, авторы учат читателя классическим основам естественных наук. Книга предлагает собственную оригинальную методику обучения, дополненную видеолекциями, публикуемыми на сайте theoreticalminimum.com. Книга включена в библиотеку фонда «Династия».



С. Габсер
**МАЛЕНЬКАЯ КНИГА
О БОЛЬШОЙ ТЕОРИИ СТРУН**

Теорию струн часто называют «теорией всего», потому что ее цель — описать все фундаментальные силы взаимодействия во Вселенной, включив в себя гравитацию, квантовую механику и теорию относительности. Эта революционная концепция представляет новое понимание пространства и времени, она стремится объяснить связь таких феноменов, как черные дыры и кварк-глюонная плазма, дополнительные измерения и квантовые флуктуации. Несмотря на сложность рассматриваемой темы, профессор Принстонского университета Стивен Габсер предлагает емкое, доступное и занимательное введение в эту одну из наиболее обсуждаемых сегодня областей физики. С минимумом математики, используя интересные аналогии, автор объясняет суть суперсимметрии, дуальности, искривления пространства-времени так, что это будет понятно любому читателю с багажом знаний средней школы. Пока положения теории струн окончательно не доказаны, однако и те тайны, которые нам уже приоткрылись, позволяют восхититься стройной гармонией мироздания и обсуждать практическое применение будущих открытий в физике высоких энергий.