

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**Н. П. Стадная, Е. А. Киселёв,
С. В. Борзунов**

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Учебно-методическое пособие

Воронеж
Издательский дом ВГУ
2020

УДК 530.1

ББК 22.3

С76

Р е ц е н з е н т ы:

доктор физико-математических наук, профессор кафедры
теоретической гидрометеорологии ВУНЦ ВВС
«ВВА им. профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина»

М. Е. Семёнов;

кандидат физико-математических наук, доцент, ведущий
научный сотрудник целевой поисковой лаборатории
перспективных технологий радиосвязи фонда
перспективных исследований *П. А. Мелешенко*

Стадная Н. П.

С76

Основы квантовой теории : учебно-методическое
пособие / Н. П. Стадная, Е. А. Киселёв, С. В. Борзу-
нов ; Воронежский государственный университет. —
Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2020. — 158 с.

ISBN 978-5-9273-3047-8

В учебно-методическом пособии приведены необ-
ходимые теоретические сведения по основам кванто-
вой теории, даны решения типовых задач, приведены
задачи для самостоятельного решения.

Для студентов бакалавриата, обучающихся по
направлениям подготовки 09.03.02 «Информацион-
ные системы и технологии», 09.03.04 «Программная
инженерия», 10.03.01 «Информационная безопас-
ность».

УДК 530.1

ББК 22.3

© Стадная Н. П., Киселёв Е. А.,
Борзунов С. В., 2020

© Воронежский государственный
университет, 2020

© Оформление. Издательский дом
ВГУ, 2020

ISBN 978-5-9273-3047-8

Оглавление

1	Вводные замечания	5
1.1	Квантовые системы. Характеристика	5
1.2	Атомная система единиц	8
2	Основные положения квантовой теории	12
2.1	Состояние квантовой системы. Измерения. Характеристика	12
2.2	Математическое описание состояний квантовой системы и наблюдаемых	19
2.2.1	Аналогия для дальнейшего понимания	19
2.2.2	Базис векторов состояний	22
2.2.3	Произвольное состояние квантовой системы	26
2.2.4	Векторы состояния и операторы в координатном представлении	28
2.2.5	Представление оператора в базисе другого оператора	46
2.2.6	Оператор в собственном представлении	49
3	Стационарное уравнение Шрёдингера	52
3.1	Свободная частица	53
3.2	Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме	56
3.2.1	Потенциальная яма	56
3.2.2	Бесконечно глубокая потенциальная яма или яма с бесконечно высокими стенками	58

3.3	Атом водорода	67
3.3.1	Общие сведения	67
3.3.2	Квантово-механическое описание	70
4	Спин	90
4.1	Магнитный момент электрона. Магнетон Бора . . .	90
4.2	Эксперименты Штерна-Герлаха и гипотеза Гаудсмита и Уленбека	93
4.3	Спиновые переменные. Оператор спина. Матрицы Паули	97
4.4	Собственные функции и собственные значения оператора проекции спина \hat{s}_z	101
5	Основы квантовых вычислений	106
5.1	Операции на кубите	106
5.1.1	Понятие о кубите	106
5.1.2	Переход в другой базис	108
5.1.3	Операции над одним кубитом	111
5.1.4	Система из двух кубитов	121
5.2	Простейшие квантовые алгоритмы	142
5.2.1	Задача Дойча	145
5.2.2	Преобразование Уолша-Адамара	151
	Литература	156

Глава 1

Вводные замечания

1.1 Квантовые системы. Характеристика

Квантовая теория – это наука, занимающаяся исследованием систем, проявляющих свойства, отличные от классических. Мы привыкли связывать отклонение от классических свойств с размерами объектов. Однако не только (и не столько) размеры определяют особые свойства физических систем. Главной характеристикой, отвечающей за то, необходимо ли изучать данный объект в рамках квантовой теории или нет, является действие S этого объекта, участвующего в каком-либо физическом процессе.

Действие имеет размерность [энергия · время]. Строгого определения здесь приводить не будем. Для ответа на поставленный вопрос достаточно будет оценки порядка величины.

Если система в течение некоторого времени Δt участвует в некотором процессе и при этом обладает энергией E , то порядок величины S можно определить как

$$S \sim E \cdot \Delta t. \quad (1.1)$$

Оказывается, что **система будет проявлять квантовые свойства в процессе, действие которого сравнимо по величине**

с *квантом действия* h . Эта величина, названная в честь Макса Планка¹, является одной из семи фундаментальных констант. С 2019 года значение постоянной Планка считается зафиксированным и точно равным по величине

$$h = 6,62607015 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

В системе СГС это значение $h = 6,62607015 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}$.

В дальнейшем однако мы будем использовать *редуцированную постоянную Планка* $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1,034 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$. Это связано с тем, что во многих уравнениях квантовой теории \hbar возникает именно с коэффициентом 2π .

Пример 1.1. Допустим вы переходите дорогу (конечно, на зелёный свет). Ширина дороги $s = 20 \text{ м}$. Время перехода – около $\Delta t = 10 \text{ с}$. Таким образом, ваша средняя скорость $v = 2 \text{ м/с}$. Средняя масса человека 70 кг . В качестве оценки энергии в данном процессе можно использовать среднюю кинетическую энергию. Оценка для действия по (1.1):

$$S \sim E \cdot \Delta t = \frac{mv^2}{2} \cdot \Delta t = \frac{70 \cdot 2^2}{2} \cdot 10 \text{ Дж} \cdot \text{с} = 1400 \text{ Дж} \cdot \text{с} \sim 10^3 \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

Мы видим, что данное значение мягко скажем далеко от h .

Пример 1.2. Рассмотрим теперь электрон в атоме водорода. В рамках полуклассического подхода считают, что электрон – это частица массы $m \sim 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$ и зарядом $|e| = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$, вращающаяся вокруг ядра, имеющего такой же по абсолютной величине заряд, по окружности радиусом $a_0 \sim 0,509 \cdot 10^{-10} \text{ м}$. Пусть период обращения равен T . Оценим действие для процесса «один оборот электрона вокруг ядра».

Электрон движется по замкнутой круговой орбите ввиду действия кулоновской² силы притяжения, действующей со стороны

¹Макс Карл Эрнст Людвиг Планк (нем. *Max Karl Ernst Ludwig Planck*) (1858 – 1947) – немецкий физик-теоретик, один из основоположников квантовой механики. Нобелевский лауреат по физике 1918 года.

²Шарль Огюстен де Кулон (фр. *Charles-Augustin de Coulomb*) (1736 – 1806) – французский военный инженер, физик.

ядра. Эта сила и сообщает электрону центростремительное ускорение $a = \frac{v^2}{a_0}$. Запишем второй закон Ньютона³:

$$\frac{mv^2}{a_0} = \frac{ke^2}{a_0^2}. \quad (1.2)$$

Здесь $k = 9 \cdot 10^9 \frac{\text{Н} \cdot \text{м}^2}{\text{Кл}^2}$. Выражаем из (1.2) скорость:

$$v = \sqrt{\frac{ke^2}{ma_0}}. \quad (1.3)$$

Таким образом, энергия вращения электрона может быть оценена как:

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{ke^2}{2a_0},$$

а период обращения:

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi a_0}{v} = \sqrt{\frac{ma_0}{ke^2}} \cdot 2\pi a_0.$$

Оценка для действия:

$$S \sim E \cdot T = \frac{ke^2}{2a_0} \cdot \sqrt{\frac{ma_0}{ke^2}} \cdot 2\pi a_0 = \pi e \sqrt{kma_0}.$$

Вычисляем:

$$\begin{aligned} S &\sim 3,14 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \sqrt{9 \cdot 10^9 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 0,509 \cdot 10^{-10}} \text{ Дж} \cdot \text{с} \\ &\approx 3,21 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} \sim \hbar. \end{aligned}$$

Как мы видим, порядок действия в этом процессе совпадает с порядком \hbar . Это означает, что исследование системы «атом водорода» должно проводиться в рамках квантовой теории.

³Сэр Исаак Ньютон (англ. *Isaac Newton*) (1643 – 1727) – английский физик, математик, механик, астроном, один из основоположников классической механики.

Задания для самостоятельного решения

Задание 1.1. Приведите один-два примера процессов, в которых систему будет необходимо рассматривать в рамках квантовой теории.

Задание 1.2. Самый быстрый человек планеты преодолел стометровую дистанцию за 9,58 с. Оцените порядок действия в этом процессе.

Задание 1.3.1. Вы едете в гоночном автомобиле. Оцените, до какого размера вы с автомобилем должны уменьшиться, чтобы начать проявлять квантовые свойства, если максимальная скорость, которую вы можете развить, составляет 400 км/ч. Сделайте неутешительные выводы.

Задание 1.3.2. Вы спешите из университета домой. За какое время вы должны преодолеть требуемое расстояние, чтобы данный процесс необходимо было рассматривать в рамках квантовой теории.

1.2 Атомная система единиц

Итак, мы указали условия применимости квантовой теории и увидели, что не только размеры системы определяют проявление квантовых свойств. Тем не менее, говоря о последних, мы в первую очередь подразумеваем объекты микромира. В связи с этим характерные размеры, времена и энергии, присущие квантовым системам, это величины, сравнимые с атомными и молекулярными характеристиками.

Чтобы понять, о каких величинах идёт речь, рассмотрим одну из применяемых в атомной и квантовой физике систем единиц – атомную.

Любая механическая система единиц может быть построена на основе трёх величин: длины (L), массы (M), времени (T). В атомной системе по определению принимается:

$$\hbar = m_e = e = 1.$$

Здесь m_e – масса электрона.

Атомная единица длины. Чтобы понять, как связана эта единица с единицами других систем, необходимо составить из характеристик \hbar , m_e , e величину размерности длины. В дальнейшем удобно будет проводить вычисления в СГС. Выпишем размерности постоянной Планка, массы и заряда электрона:

$$[\hbar] = [E] \cdot [T] = \frac{[M][L]^2[T]}{[T]^2} = [L]^2[M][T]^{-1}; \quad (1.4)$$

$$[m_e] = [M]; \quad (1.5)$$

$$[e] = ([F][L]^2)^{1/2} = [L]^{3/2}[M]^{1/2}[T]^{-1}. \quad (1.6)$$

Чтобы получить величину размерности $[L]$ разделим \hbar на $e\sqrt{m_e}$:

$$\left[\frac{\hbar}{e\sqrt{m_e}} \right] = [L]^{1/2} \rightarrow [L] = \left[\frac{\hbar^2}{m_e e^2} \right].$$

При вычислении используем систему СГС:

$$1 \text{ ат.ед.дл.} = \frac{(1,034 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с})^2}{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot (4,8 \cdot 10^{-10} \text{ СГСЭ}_q)^2} \approx 0,5 \cdot 10^{-8} \text{ см.}$$

В СИ: $1 \text{ ат.ед.дл.} = 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$. Эта величина – характерный размер атома водорода a_0 , называемый *боровским радиусом*⁴. Часто длину выражают и в нанометрах или во внесистемных единицах – ангстремах⁵ (Å). Таким образом,

$$1 \text{ ат.ед.дл.} = a_0 = 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0,5 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 0,05 \text{ нм} = 0,5 \text{ Å}.$$

⁴Назван в честь Нильса Бора (дат. *Niels Henrik David Bohr*) (1885 – 1962) – датского физика, одного из основоположников квантовой механики, лауреат Нобелевской премии по физике 1922 г. Известен как создатель первой квантовой теории атома и так называемой *копенгагенской школы* квантовой механики.

⁵Единица названа в честь Андерса Йонаса Ангстрема (швед. *Anders Jonas Ångström*) – шведского учёного-астрофизика.

Атомная единица времени. Можно воспользоваться уже известным результатом:

$$[T] = \frac{[L]^2[M]}{[\hbar]} = \left[\frac{\hbar^3}{m_e e^4} \right].$$

Вычисляем:

$$1 \text{ ат.ед.вр.} = \frac{(1,034 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с})^3}{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot (4,8 \cdot 10^{-10} \text{ СГСЭ}_q)^4} \approx 24 \cdot 10^{-18} \text{ с} = 24 \text{ ас.}$$

Здесь использовано обозначение $1 \text{ ас} = 1 \text{ аттосекунда}$. Как мы видим, атомная единица времени – весьма малая величина. Чтобы как-то её себе представить, вычислим, какое расстояние проходит свет за 24 ас:

$$3 \cdot 10^8 \text{ м/с} \cdot 24 \cdot 10^{-18} \text{ с} = 72 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 144 \text{ ат.ед.дл.}$$

Таким образом, за время равное одной атомной единице свет проходит расстояние порядка сотни размеров атомов или, например, около 50 длин молекулы этанола.

На настоящий момент аттосекундная физика – это не научная фантастика, а уже хорошо осваиваемая реальность. Современные лазеры позволяют индуцировать импульсы аттосекундной длительности [6], что позволяет «заглянуть» вглубь молекул и даже атомов.

Атомная единица энергии. Действуя аналогично, получаем:

$$[E] = \frac{[\hbar]}{[T]}.$$

Вычисляем:

$$1 \text{ ат.ед.эн.} = \frac{1,034 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}}{24 \cdot 10^{-18} \text{ с}} \approx 4,3 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} = 4,3 \cdot 10^{-18} \text{ Дж.}$$

Часто используют внесистемную единицу *электрон-вольт* (эВ, или, в англоязычной литературе eV), равную по величине работе,

требуемой для перемещения электрона между точками с разностью потенциалов в один вольт⁶: $1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$.

$$1 \text{ ат.ед.эн.} = \frac{4,3 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}}{1,6 \cdot 10^{-19}} = 26,9 \text{ эВ}.$$

Для сравнения укажем, что потенциал ионизации атома водорода составляет 13,6 эВ – это энергия, необходимая для того, чтобы атом водорода, находящийся в основном состоянии (состоянии с наименьшей энергией), стал ионом (другими словами «вырвать электрон»).

Задания для самостоятельного решения

Задание 1.4. Вычислите атомную единицу напряжённости. Проанализируйте полученный результат.

Задание 1.5. Запишите в атомной системе единиц заряды ядер гелия, серы, железа, урана.

Задание 1.6. Радиус атома гелия оценивается в 126 пм⁷. Запишите данную величину в атомных единицах.

Задание 1.7. Радиус атома урана-235 составляет 2,61 ат.ед.дл. Укажите данную длину в ангстремах.

Задание 1.8. Работа выхода электронов с поверхности цезия составляет $3 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$. Укажите эту энергию в электрон-вольтах и в атомных единицах энергии.

⁶Единица названа в честь Алессандро Вольты (итал. *Alessandro Giuseppe Antonio Anastasio Gerolamo Umberto Volta*) (1745 – 1827) – итальянского физика, химика, физиолога.

⁷1 пм (пикометр) = 10^{-12} м .

Глава 2

Основные положения квантовой теории

2.1 Состояние квантовой системы. Измерения. Характеристика

Классические системы. 1. Когда мы говорим, что классический объект находится в определённый момент времени в некотором состоянии, то имеем ввиду, что знаем в этот момент координату (\mathbf{r}) и импульс (\mathbf{p}) объекта. Помимо этого состояние может быть охарактеризовано и другими параметрами, например, энергией (E), моментом импульса (\mathbf{L}) и др. Таким образом, можно, задавая состояние, указать набор значений параметров в интересующий момент времени:

$$(\mathbf{r}, \mathbf{p}, E, \mathbf{L}).$$

2. Состояние классической системы также характеризуется следующей особенностью. Если нам известны функции

$$(\mathbf{r}(t); \mathbf{p}(t)), \tag{2.1}$$

то мы можем указать состояние классической системы в любой момент времени. Таким образом, математически состояние классической системы задаётся двумя функциями (2.1).

3. Для того чтобы определить состояние системы мы проводим измерения (с помощью классических (!) приборов). Результаты измерения воспроизводимы. Например, если отпускать теннисный мячик с некоторой высоты, то по определению времени полёта можно вычислить высоту падения (косвенный метод измерения конечной координаты). Результат хорошо будет воспроизводиться с учётом возникающих погрешностей. Мы будем получать всегда данные из некоторого диапазона $(y - \Delta y, y + \Delta y)$, где Δy – величина погрешности.

Состояние квантовой системы. Можем ли мы рассуждать подобным же образом в случае квантовой системы?

Проведём мысленный эксперимент. Пусть существует некий квантовый объект. Чтобы узнать о нём какую-то информацию в нашем распоряжении есть только измерение, то есть *воздействие классическим прибором*. Предположим, мы хотим определить энергию у нашего объекта. В квантовой теории принято называть физические величины *наблюдаемыми*. Проведя соответствующее измерение, получаем показание прибора, например, E_1 .

В чём проблема? Во время измерения квантовая система взаимодействует с прибором, и «измеряемое» состояние разрушается. Это означает, что результат эксперимента **не может быть перепроверен**, следовательно, мы не можем говорить о его достоверности.

Но, предположим, что у нас есть две, три, пять, сто..., в общем N одинаковых квантовых объектов, находящихся в одинаковых состояниях. В этом случае мы можем провести N измерений. Каков будет результат?

В случае классических систем мы ожидаем увидеть N примерно одинаковых значений. Однако с квантовыми системами возможны два существенно различных исхода:

1) прибор покажет N одинаковых (в рамках погрешностей, даваемых самим прибором) значений E_1 ;

2) прибор покажет существенно различные значения, например, в a_1 случаях E_1 , в a_2 – E_2 и в a_3 – E_3 . Безусловно выполняется условие $a_1 + a_2 + a_3 = N$.

Какие выводы из этого можно сделать? В первом случае можно говорить о том, что квантовая система, находясь в исследуемом состоянии, обладает определённой энергией E_1 . Назовём его *состояние со значением наблюдаемой E_1* и обозначим

$$\text{Исследуемое состояние} = \text{Состояние с } E_1$$

В этом случае данное состояние называют *состоянием базиса* (или, *собственным состоянием*) *наблюдаемой E , соответствующим значению E_1* .

А что во втором? Это удивительно, но необходимо заключить, что квантовая система, находясь в исследуемом состоянии, *не обладает определённой энергией*. Нам, системам существенно классическим, сложно представить такую ситуацию, однако для квантовых объектов в этом нет ничего необычного. В таких случаях, как описано выше, мы можем сказать, что система находится в *суперпозиции* состояний с определёнными энергиями E_1 , E_2 и E_3 . Мы можем охарактеризовать это состояние тройкой чисел – значений энергий (E_1 , E_2 , E_3). Суперпозицию можно записать в виде суммы (так же, как и в случае, скажем, с геометрическими векторами), причём коэффициенты в суперпозиции дают нам возможность оценить вероятность того или иного результата измерения:

$$\begin{aligned} \text{Исследуемое состояние} = & C_1 \cdot \text{Состояние с } E_1 + \\ & + C_2 \cdot \text{Состояние с } E_2 + C_3 \cdot \text{Состояние с } E_3 \end{aligned}$$

О числах C_i мы пока ничего не знаем, поэтому должны принять самое общее – они комплексны. Причём:

$$|C_i|^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{a_i}{N}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.2)$$

(2.2) означает, что если бы у нас была возможность проводить бесконечно много измерений энергии у квантовой системы, находящейся в одном состоянии, то, с вероятностью $|C_i|^2$ можно получить результат E_i . Естественно должно выполняться условие *нормировки*:

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 + |C_3|^2 = 1.$$

Само исследуемое состояние в данном случае является *суперпозицией состояний базиса наблюдаемой E , соответствующих значениям E_1, E_2, E_3* , а набор этих трёх значений (E_1, E_2, E_3) с указанием соответствующих коэффициентов называют *представлением исследуемого состояния в базисе наблюдаемой E* .

Может возникнуть вопрос: какое максимальное количество существенно различных результатов при измерении некоторой наблюдаемой M может быть получено у квантовой системы, находящейся в некотором произвольном состоянии? Другими словами, сколько существует различных базисных состояний наблюдаемой M и различных значений M_i ?

Оказывается, это зависит от свойств, определяемых структурой квантовой системы и её окружения. Полный набор значений некоторой величины M для данной системы называется **спектром** наблюдаемой. Для различных наблюдаемых возможны следующие ситуации:

1.1) набор M представляет собой непрерывный неограниченный ряд значений. В таком случае говорят о *непрерывном спектре*. В таком случае число состояний в базисе и число значений бесконечно. Примером может быть наблюдаемая \mathbf{r} – координаты свободной частицы;

1.2) набор M представляет собой непрерывный ограниченный ряд значений. В таком случае также говорят о *непрерывном спектре*, число состояний в базисе и число значений бесконечно. Примером может быть наблюдаемая \mathbf{r} – координаты частицы, находящейся в поле, ограничивающем её положение в пространстве; скажем, у электрона в атоме;

2.1) набор M представляет собой дискретный неограниченный ряд значений. В таком случае все значения наблюдаемых и базисные состояния можно пронумеровать, а сам спектр называют *дискретным*. Число состояний в базисе и число значений в спектре бесконечно. Примером может быть энергия атома, находящегося в узле кристаллической решётки.

Замечание: в случае дискретных спектров возможна ситуация, когда N (при этом N может быть и бесконечным) различным базисным состояниям соответствует одно и то же значение наблюдаемой. Такие спектры называют *вырожденными*, а число N – кратностью вырождения. Примером является спектр энергии электрона в атоме водорода.

2.2) набор M представляет собой дискретный ограниченный ряд значений. Значения наблюдаемых и базисные состояния можно пронумеровать. Число значений в спектре конечно, а вот число состояний может быть как конечным, так и бесконечным (в этом случае, конечно, спектр вырожден). Примерами могут быть спин электрона или чётность состояния. Более подробно об этих наблюдаемых будет написано далее.

Совместные измерения. Вернёмся опять к классическим системам. Их состояние может быть описано определённым набором параметров – трёх, пяти, семи и т.д. в зависимости от того, что мы хотим знать о системе и какими приборами и методиками измерений обладаем. Ограничить полноту информации о классической системе могут только технические возможности. В случае квантовых объектов появляется дополнительная принципиальная трудность. Вернёмся к нашему эксперименту с определением наблюдаемой E в некотором состоянии. Предположим, что мы имеем дело с состоянием с определённым значением E_1 наблюдаемой и в нашем распоряжении N квантовых объектов, каждый из которых находится в таком состоянии. Теперь мы хотим определить в этом состоянии значение какой-нибудь наблюдаемой A .

Проводим измерения. И что же мы «наблюдаем»? Всё то же: возможно, что все N измерений покажут дадут значение A_i , а

возможно, будет некий определённый набор значений, скажем b_1 одно измерение даст A_1 , а $b_2 - A_2$. Что это означает?

1. В первом случае состояние, которое мы изучаем, является состоянием как базиса наблюдаемой E , так и базисом наблюдаемой A . В таких ситуациях говорят, что в данном состоянии обе наблюдаемые совместно измеримы, но, вместе с тем, важнее даже отметить, что эти две наблюдаемые имеют общий базис. А это означает, что в случае, когда система находится в каком-то из базисных состояний с определённым значением E , у неё также определено и значение A , то есть они совместно измеримы *всегда*.

2. Во втором случае исследуемое состояние является состоянием базиса наблюдаемой E , но по отношению в базису наблюдаемой A является суперпозицией базисных состояний. Таким образом, представление этого состояния в базисе наблюдаемой E – это число E_k , а представление его же в базисе наблюдаемой A – это пара чисел (A_1, A_2) с указанием вероятностей появления каждого в результате измерения. Данную суперпозицию можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \text{Исследуемое состояние} = C_1 \cdot \text{Состояние с } A_1 + \\ + C_2 \cdot \text{Состояние с } A_2. \end{aligned}$$

причём аналогично (2.2)

$$|C_i|^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{b_i}{N}, \quad i = 1, 2.$$

и

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1.$$

В таком случае говорят, что наблюдаемые E и A не могут быть совместно измерены.

Наконец, прежде чем перейти к математическому описанию, отметим, что:

1. Результат измерения наблюдаемой в некотором состоянии квантовой системы **принципиально случаен**. Вы не можете предсказать значение, которое покажет прибор. Это существенное отличие от измерений параметров классической системы.

2. Когда мы говорим, что исследуемое состояние квантовой системы представляет собой суперпозицию скажем двух состояний базиса наблюдаемой E , это не означает, что в указанном состоянии система имеет значение ИЛИ E_1 ИЛИ E_2 . Нет, это состояние, в котором значение наблюдаемой И E_1 И E_2 , а на результат эксперимента с измерением значения E вы никак не можете повлиять.

3. С учётом того, что для каждой наблюдаемой E существуют как наблюдаемые, совместно с ней измеримые, так и неизмеримые, получается, что информация о состоянии квантовой системы всегда неполна.

Задания для самостоятельного решения

Задание 2.1. Предположим, что вы провели 10^6 измерений наблюдаемой E в некотором состоянии. Результаты распределились следующим образом: по $2 \cdot 10^5$ значений E_1 и E_3 , по $3 \cdot 10^5$ значений E_2 и E_4 . Какой вывод вы сделаете? Как выглядит представление исследуемого состояния в базисе наблюдаемой E ?

Задание 2.2. Квантовая система находится в состоянии, которое в представлении базиса наблюдаемой A имеет вид

$$0,5 \cdot \text{Состояние с } A_1 + 0,5 \cdot \text{Состояние с } A_2 + \\ + 0,5 \cdot \text{Состояние с } A_3 + 0,5 \cdot \text{Состояние с } A_4.$$

Какие результаты и с какой вероятностью могут быть получены при измерении значения наблюдаемой A у квантовой системы, находящейся в указанном состоянии?

Задание 2.3. Вы исследуете некое состояние квантовой системы. Вы провели серию измерений наблюдаемых E и A . Результаты распределились следующим образом:

- 1) при измерении E 50% значений E_1 и 50% E_2 ;
- 2) при измерении A было получено четыре значения: A_1 , A_2 , A_3 , A_4 , причём они распределились поровну (по 25%).

Возможен ли такой исход эксперимента? Если да, то, как его можно объяснить. Что можно сказать о наблюдаемых E и A и об исследуемом состоянии.

Задание 2.4. Подумайте, какие математические объекты могут быть применены для описания состояния квантовой системы и наблюдаемых.

2.2 Математическое описание состояний квантовой системы и наблюдаемых

Если поразмышлять над тем, что было описано в предыдущем пункте, можно прийти к выводу о том, что математическое описание состояния квантовых систем и наблюдаемых имеет определённую аналогию с векторами, возможно матрицами... Да, действительно, так и есть. Прежде чем приступить к изучению формализма, применяемого в квантовой теории, рассмотрим геометрическую аналогию.

2.2.1 Аналогия для дальнейшего понимания

Рассмотрим вектор на плоскости (на N -мерный случай далее всё легко обобщается). Назовём его \mathbf{a} (рис.2.1). Этот вектор за-

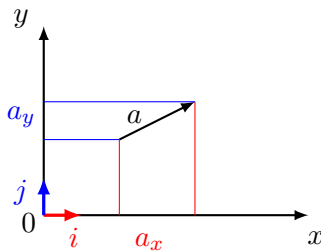


Рис. 2.1

даётся двумя числами (своими координатами), например, в декартовой системе (a_x, a_y) . Таким образом, мы можем сопоставить данному вектору так называемый вектор-столбец:

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

Координаты – это проекции данного вектора на соответствующую ось.

Любой вектор можно представить в виде линейной комбинации линейно независимых векторов. В пространстве это будет комбинация из трёх, а на плоскости – из двух векторов. Главное условие: векторы должны быть линейно независимыми.

С направлениями линейно независимых векторов связывают координатные оси, записывают вдоль них единичные векторы, задающие теперь эти направления, и полученную линейную комбинацию называют разложением вектора по базису двух (или трёх, если в пространстве) векторов. Чаще систему базисных векторов выбирают таким образом, чтобы векторы базиса были ортогональны (для геометрических векторов говорят, что они «перпендикулярны»).

В данном случае, наиболее привычном для нас, который изображён на рисунке (2.1), указанное разложение будет иметь вид

$$\mathbf{a} = a_x \mathbf{i} + a_y \mathbf{j}. \quad (2.4)$$

Здесь \mathbf{i} и \mathbf{j} – два единичных базисных вектора. Данным векторам так же можно сопоставить векторы-столбцы. Координаты первого вектора $(1, 0)$, второго $(0, 1)$, следовательно:

$$\mathbf{i} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{j} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Тогда разложение (2.4) можно представить в виде:

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_x \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ a_y \end{pmatrix} = a_x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Вопрос. Что теперь нужно сделать, чтобы «измерить» a_x ? Необходимо данный вектор спроецировать на ось OX . А для этого мы умножаем (2.3) скалярно на \mathbf{i} . А какой будет аналогичная операция в матричном представлении векторов? Для того, чтобы осталось только a_x , необходимо в (2.6) вектор-строку (10) умножить на вектор-столбец, задающий вектор:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix} = a_x. \quad (2.7)$$

Аналогично для a_y

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix} = a_y. \quad (2.8)$$

Таким образом, умножение на $\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}$ в данном случае выступает как действие своеобразного «проектора» на ось OX , а на $\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}$ – проектор на ось Y . Аналогично и для второй координаты. Можно записать по-другому:

$$\begin{pmatrix} a_x & 0 \\ 0 & a_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_x \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} a_x & 0 \\ 0 & a_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ a_y \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Задания для самостоятельного решения

Задание 2.5. Запишите векторы-столбцы, соответствующие векторам $\mathbf{a} = 2\mathbf{i} + 3\mathbf{j}$ и $\mathbf{b} = 5\mathbf{i} + 2\mathbf{j}$.

Задание 2.6. Вычислите скалярное произведение векторов из предыдущего задания, используя векторное представление.

Задание 2.7. Вспомните условие, которому должны соответствовать координаты двух векторов, чтобы их скалярное произведение было равно 0. Сформулируйте это правило для векторного представления.

2.2.2 Базис векторов состояний

1. В квантовой теории состояние объекта задаётся **вектором состояния** (также можно встретить термин **волновая функция**)¹ – вектором-столбцом, элементы которого – комплексные числа:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Также мы будем в дальнейшем использовать для обозначения состояний «бра-кет» (bracket) нотацию Дирака². В ней состояние описывается «кет»-вектором $|\Psi\rangle$ – комплекснозначной функцией.

2. Каждому вектору-столбцу ставится в соответствие сопряжённый элемент – вектор-строка с элементами комплексносопряжёнными элементам вектора-столбца³:

$$(a_1^* \quad a_2^* \quad \dots) \quad (2.11)$$

В дираковской нотации функция сопряжённая $|\Psi\rangle$ – это «бра»-вектор $\langle\Psi|$.

3. Так же, как и для геометрических векторов для векторов состояния вводится понятие скалярного произведения. В случае матричного формализма оно вычисляется следующим образом:

$$(a_1^* \quad a_2^* \quad \dots) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \end{pmatrix} = \sum_i a_i^* b_i. \quad (2.12)$$

В дираковских обозначениях скалярное произведение записывается как $\langle\Phi|\Psi\rangle$.

¹Это правда не всегда возможно. Но о таких специфических случаях будет рассказано в главе про квантовые вычисления.

² Дирак (Paul Adrien Maurice Dirac) (1902–1984) — английский физик.

³Данная операция называется *эрмитовым сопряжением* вектора.

4. Векторы состояния нормированы на единицу. Это означает, что должно выполняться условие:

$$(a_1^* \quad a_2^* \quad \dots) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \end{pmatrix} = \sum_i |a_i|^2 = 1. \quad (2.13)$$

Здесь использовано обозначение $|a|^2 = a^* \cdot a$. В дираковских обозначениях: $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$.

5. Два вектора будут называться ортогональными, если их скалярное произведение равно нулю.

6. Пространство векторов $|\Psi\rangle$, отвечающих всем вышеуказанным свойствам, а также свойству полноты, называется *гильбертовым*⁴ [1].

7. Математическое описание наблюдаемых в квантовой теории осуществляется с помощью операторов. Под оператором \hat{M} понимается линейное отображение в гильбертовом пространстве. Другими словами, это некоторое правило, действуя по которому на вектор $|\Psi\rangle$, мы получаем вектор $|\Phi\rangle$:

$$\hat{M}|\Psi\rangle = |\Phi\rangle.$$

8. Все операторы наблюдаемых в квантовой теории:

1) **линейны**: $\hat{M}(C_1|\Psi_1\rangle + C_2|\Psi_2\rangle) = C_1\hat{M}|\Psi_1\rangle + C_2\hat{M}|\Psi_2\rangle$;

2) **эрмитовы**. Об эрмитовости необходимо сказать более подробно.

Оператор \hat{M}^\dagger называется эрмитово сопряжённым оператору \hat{M} , если выполняется условие:

$$\langle \Phi | \hat{M}^\dagger | \Psi \rangle = (\langle \Psi | \hat{M} | \Phi \rangle)^*. \quad (2.14)$$

Эрмитовым⁵ будет называться такой оператор, для которого $\hat{M}^\dagger = \hat{M}$.

⁴Названо в честь Давида Гильберта (нем. *David Hilbert*) (1862 – 1943) – немецкого математика.

⁵Названо в честь Шарля Эрмита (фр. *Charles Hermite*) (1822 – 1901) – французского математика.

Этому свойству операторы в квантовой теории должны отвечать ввиду того, что все значения наблюдаемых – действительные числа⁶.

8. Среди всех векторов существует набор $|\Psi_i\rangle$, где каждый вектор отвечает равенству

$$\hat{M}|\Psi_i\rangle = M_i|\Psi_i\rangle. \quad (2.15)$$

Такие векторы и составляют базисный набор и называются собственными векторами (или функциями) оператора \hat{M} . А набор всех возможных M_i составляют спектр оператора. Уравнение (2.15) называется *уравнением на собственные функции и собственные векторы*.

Рассмотрим теперь все эти вопросы более подробно.

Итак, по аналогии с обычной для нас геометрией мы можем сопоставить каждому вектору состояния вектор-столбец, который можно разложить по произвольному базису.

В качестве базиса может выступать система ортогональных единичных векторов (или, другими словами, «ортонормированная система векторов»). В качестве такого базиса может быть выбрана система собственных функций какого-нибудь оператора.

Пусть имеется оператор \hat{S} . Решая для него уравнение на собственные функции и собственные значения

$$\hat{S}|\Psi_n\rangle = S_n|\Psi_n\rangle. \quad (2.16)$$

вы получаете набор собственных функций $|\Psi_n\rangle$ и соответствующих собственных значений S_n . Этот набор собственных функций, описывающий состояния с определёнными значениями S , и представляет собой базис.

По аналогии с геометрическим рассмотрением каждому такому вектору состояния $|\Psi_n\rangle$ сопоставляется единичный вектор-столбец по типу (2.5). Чаше это состояние записывают даже не

⁶Подробнее об этом можно почитать, например, в [7] и [4].

$|\Psi_n\rangle$, а просто $|n\rangle$. В дальнейшем мы будем придерживаться именно таких обозначений. Так, например, состояниям, описываемым $|\Psi_1\rangle$, $|\Psi_2\rangle$, $|\Psi_3\rangle$, которые дальше мы будем писать как $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$, будут соответствовать векторы-столбцы:

$$|1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}; |2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}; |3\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \dots \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Число элементов этого столбца зависит от числа собственных функций, полученных при решении (2.16). Это число может быть конечным, может быть бесконечным. Везде, где проставлены многоточия, имеются ввиду нули. Более сложные случаи, когда набор собственных значений получается непрерывным, вырожденным, мы разбирать не будем.

То, что любая пара этих векторов ортонормирована легко убедиться, вычислив скалярное произведение векторов. Напомню: система векторов называется ортонормированной, если:

- скалярное произведение двух различных векторов системы равно 0;
- скалярное произведение вектора самого на себя этой системы равно 1.

Математически это записывается следующим образом:

$$\langle n|m \rangle = \delta_{nm},$$

здесь использовано обозначение – символ Кронекера⁷. Вычислим, например, $\langle 1|2 \rangle$:

$$\langle 1|2 \rangle = (1 \ 0 \ 0 \ \dots) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix} = 0$$

Аналогичны расчёты для любой другой пары векторов.

⁷Леопольд Кронекер (нем. *Leopold Kronecker*) (1823 – 1891) – немецкий математик.

Задания для самостоятельного решения

Задание 2.8. Пусть имеются два вектора состояния $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$.

- 1) Записать векторы в матричном виде;
- 2) записать «бра»-векторы в матричной форме и дираковских обозначениях;

3) вычислите скалярные произведения $\langle\Psi|\Psi\rangle$, $\langle\Phi|\Phi\rangle$, $\langle\Phi|\Psi\rangle$ в матричной форме и с использованием дираковского формализма.

а) $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$; $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$;

б) $|\Psi\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + \sqrt{3}|1\rangle)$; $|\Phi\rangle = \frac{1}{5}(|0\rangle + 2\sqrt{6}|1\rangle)$;

в) $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$; $\frac{1}{2}(i|0\rangle|\sqrt{3}|1\rangle)$.

Задание 2.9. Определите коэффициенты C в следующих векторах состояний:

а) $|\Psi\rangle = 0,25|0\rangle - C|1\rangle$;

б) $|\Phi\rangle = |0\rangle + C|1\rangle$;

в) $|\Psi\rangle = \frac{C}{3}|0\rangle + C|1\rangle$.

2.2.3 Произвольное состояние квантовой системы

Любому состоянию $|\Psi\rangle$ можно сопоставить вектор-столбец по аналогии с (2.3), и это состояние может быть представлено в виде суперпозиции векторов базиса некоторого оператора по аналогии с (2.6):

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle. \quad (2.18)$$

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \dots \end{pmatrix} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix} + a_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \dots \end{pmatrix} + \dots \quad (2.19)$$

Набор a_n — это «координаты» вектора состояния $|\Psi\rangle$ в базисе оператора \hat{S} . Физический смысл имеет квадрат модуля коэффициента $|a_n|^2$, он указывает на вероятность получения значения S_n

при измерении значения величины S у системы, находящейся в состоянии, описываемом вектором $|\Psi\rangle$.

Для того чтобы определить вероятность получения какого-либо значения S_k при измерении значения величины S у системы, находящейся в состоянии $|\Psi\rangle$, необходимо узнать координату a_k в вышеприведённом разложении (2.19). Для этого необходимо использовать вектор-проектор по типу (2.7):

$$\langle k|\Psi\rangle = \langle k|\sum_n a_n|n\rangle = \sum_n a_n\langle k|n\rangle = \sum_n a_n\delta_{kn} = a_k. \quad (2.20)$$

В матричном виде, например, чтобы определить a_2 , необходимо умножить вектор-столбец, соответствующий $|\Psi\rangle$, на вектор-строку, соответствующую второму базисному вектору:

$$\langle 2|\Psi\rangle = (0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \dots \end{pmatrix} = a_2. \quad (2.21)$$

Набор коэффициентов $\{a_n\}$, который, как видно из (2.20), можно так же записать в виде $\langle k|\Psi\rangle$, называется **«представлением состояния $|\Psi\rangle$ в базисе оператора \hat{S} »**.

Для часто используемых представлений говорят ещё проще. Например, говорят, вектор состояния в *координатном представлении* ($\langle x|\Psi\rangle$), вектор состояния в *импульсном представлении* ($\langle p|\Psi\rangle$), вектор состояния в *энергетическом представлении* ($\langle E|\Psi\rangle$, или, в случае дискретного спектра можно встретить обозначение $\langle n|\Psi\rangle$, где n – главное квантовое число) и др.

С учётом этих обозначений разложение (2.18) может быть записано в виде:

$$|\Psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\Psi\rangle. \quad (2.22)$$

Возникающая здесь структура $|n\rangle\langle n|$ – это часть *проекционного оператора*, потому как, действуя на вектор состояния $|\Psi\rangle$, она оставляет базисный вектор $|n\rangle$ – своеобразную «проекцию вектора $|\Psi\rangle$ на базисное состояние $|n\rangle$ ».

2.2.4 Векторы состояния и операторы в координатном представлении

Волновая функция

Рассмотрим более подробно координатное представление, которое довольно часто используется в квантовой теории. Строгого построения векторов состояния в координатном представлении проводить не будем, так как это выходит за рамки курса, а укажем основные принципы работы в этом представлении. Здесь состояние системы задаётся комплекснозначной функцией координат и времени, называемой **волновой функцией**

$$|\Psi\rangle \equiv \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Изменение волновой функции со временем определяет **эволюцию состояния** квантовой системы.

С помощью этой функции мы также можем определить вероятность обнаружения частицы в какой-либо области пространства. Когда речь идёт о классической частице, мы, зная закон её движения, можем указать траекторию движения, и в каждый момент времени указать координату. Для квантовой частицы это сделать невозможно, для неё не существует понятия «траектория», она попросту не определена: квантовая частица «перемещается» в пространстве сразу по всем возможным траекториям, задаваемым волновыми функциями, имеющими смысл амплитуды вероятности.

Величина $|\Psi|^2 dV$, вычисленная в некоторый момент времени τ , – это вероятность обнаружить частицу в объёме dV в указанный момент. Таким образом, $|\Psi|^2$ имеет смысл плотности распределения вероятности возможных значений координат частицы. Вероятность обнаружить частицу в некотором объёме Ω :

$$\int_{\Omega} |\Psi(\mathbf{r}, \tau)|^2 dV.$$

А вероятность обнаружить существующую частицу «хоть где-то в пространстве» в произвольный момент времени должна быть равна единице, поэтому:

$$\int_V |\Psi(\mathbf{r}, \tau)|^2 dV = 1.$$

Данное условие называют условием нормировки⁸.

Физический смысл, связанный с плотностью распределения вероятности, накладывает определённые ограничения на волновые функции. Последние обязаны отвечать трём главным свойствам:

- 1) непрерывность;
- 2) однозначность;
- 3) конечность.

В том важном случае, когда все взаимодействия, в которых участвует квантовый объект, не меняются со временем, состояние описывается **стационарной волновой функцией**, в которой временная и координатные части разделены. В таком случае работают только с координатной частью $\Psi(\mathbf{r})$.

Пример 2.1. Пусть область нахождения частицы не ограничена. Могут ли стационарные состояния описываться функциями $\Psi_1(r) = Ce^{-kr}$, $\Psi_1(r) = Ce^{kr}$, $\Psi_1(r) = Ce^{-kr^2}$?

Решение. Все три функции непрерывны и однозначны. Однако, если первая и третья функции ограничены, то вторая функция – монотонно возрастает всюду на всей области определения и потому не удовлетворяет условию конечности. Таким образом, первая и третья функции могут принципиально выступать в качестве волновых, а вторая – нет.

⁸Нормировать волновую функцию на единицу не всегда возможно. Однако в дальнейшем в курсе мы будем рассматривать в основном (за исключением случая свободной частицы) только функции, удовлетворяющие указанному условию.

Пример 2.2. Пусть область нахождения частицы ограничивается некоторым объёмом V . Для простоты рассмотрим одномерный случай, например $(-\pi < x < \pi)$. Вне этой области частица не может существовать, поэтому волновая функция вне области равна нулю. Могут ли стационарные состояния описываться функциями $\Psi_1(x) = C \sin x$, $\Psi_2(x) = C \cos x$.

Решение. Обе функции ограничены и однозначны. Однако, для выполнения условия непрерывности функции должны быть равны нулю на границах области. Первая функция отвечает этим условиям, а вторая – нет. Таким образом, только $\Psi_1(x) = C \sin x$ могут принципиально выступать в качестве волновой.

Задания для самостоятельного решения

Задание 2.10. Определите размерность волновой функции.

Задание 2.11. Для следующих функций указать:

1) могут ли они являться волновыми функциями в указанном диапазоне координат (рассматривается только одномерный случай);

2) построить график функции;

3) определить нормировочную константу C (если ответ в п.1 положительный);

4) определить вероятность локализации квантового объекта в интервале $0 < x < a$;

а) $|\Psi\rangle = Cx(1 - x)$, $x \in (0, 1)$; $a = 0, 5$;

б) $|\Psi\rangle = \frac{C}{1 + (kx)^2}$ (укажите также размерность коэффициента k), $x \in (-\infty, +\infty)$; $a = 1/k$; $2/k$.

Примеры операторов

Рассмотрим в координатном представлении примеры операторов, используемых в квантовой теории.

Операторы координат \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} . Действие оператора координаты сводится к умножению на эту координату:

$$\hat{x}\Psi = x\Psi.$$

Также можно рассматривать оператор радиус-вектора:

$$\hat{\mathbf{r}}\Psi = \mathbf{r}\Psi,$$

в декартовых координатах $\hat{\mathbf{r}} = \hat{x}\mathbf{i} + \hat{y}\mathbf{j} + \hat{z}\mathbf{k}$.

Пример 2.3. Необходимо подействовать оператором координаты \hat{x} на функцию $\Psi = Ce^{-ax^2}$ ($a > 0$). Получаем:

$$\hat{x}\Psi = Cxe^{-ax^2}.$$

Операторы проекций импульса \hat{p}_x , \hat{p}_y , \hat{p}_z . Оператор проекции импульса на ось ОХ имеет вид $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. Таким образом, действие сводится к взятию производной по переменной x и дальнейшего умножения на коэффициент ($-i\hbar$). Аналогично и для двух других проекций импульса:

$$\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}; \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

Также можно рассматривать оператор импульса

$$\hat{\mathbf{p}} = \hat{p}_x\mathbf{i} + \hat{p}_y\mathbf{j} + \hat{p}_z\mathbf{k} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{k}\right) = -i\hbar\nabla,$$

здесь используется обозначение ∇ для дифференциального оператора

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{k}.$$

Пример 2.4. Необходимо подействовать оператором \hat{p}_y на функцию $\Psi(x, y) = Ce^{-a(x^2+y^2)}$ ($a > 0$). Получаем:

$$\hat{p}_y\Psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}(Ce^{-a(x^2+y^2)}) = 2i\hbar Caxe^{-a(x^2+y^2)}.$$

Подействуем на ту же функцию оператором $\hat{\mathbf{p}}$. При этом учтём, что функция не зависит от координаты z , а относительно перестановки координат $x \leftrightarrow y$ остаётся неизменной. Следовательно, производная по координате x может быть получена при замене x на y в производной по y . Получим:

$$\hat{\mathbf{p}}\Psi = -i\hbar\nabla\Psi = 2i\hbar a C e^{-a(x^2+y^2)}(xi + yj).$$

Операторы квадрата момента импульса L^2 и проекции момента импульса \hat{L}_z . Данные величины являются важными характеристиками квантовых систем. На примере данных операторов можно посмотреть подход к составлению операторов исходя из их определения в классической физике. Так, моментом импульса частицы, вращающейся относительно некоторой оси, называется векторная физическая величина равная векторному произведению радиус-вектора частицы на её импульс⁹: $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Оператором момента импульса будет называться оператор, действующий по правилу

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\mathbf{r} \times \nabla.$$

С точки зрения квантовой теории наиболее важными оказываются две величины: квадрат момента импульса L^2 и проекция момента импульса на ось вращения (как правило её обозначают OZ) L_z . Более того, данные величины возникают в механике при описании криволинейного движения частицы (момент импульса частицы, движущейся вдоль прямой, равен нулю), в частности, при вращении. В связи с этим обычно эти операторы записывают в сферической системе координат. В ней вид данных операторов оказывается простым и удобным для работы. Приведём их здесь без вывода¹⁰

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\nabla_{\theta,\phi}^2; \quad (2.23)$$

⁹Для обозначения векторного произведения скобки намеренно не ставятся, далее мы увидим почему.

¹⁰Вывод вида этих операторов выходит за рамки нашего курса, подробнее можно посмотреть в [9].

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (2.24)$$

В (2.23) используется обозначение $\nabla_{\theta,\phi}^2$. Это угловая часть оператора Лапласа¹¹. Мы встретимся с ним позже при рассмотрении темы «Атом водорода», там же и приведём его явный вид. Обратите внимание, что вид оператора проекции момента импульса \hat{L}_z напоминает по структуре операторы проекций импульса. Такое совпадение неслучайно и связано с тем, что проекция момента импульса на ось вращения играет ту же роль, что и проекция импульса на любую ось при поступательном движении.

Оператор энергии (Гамильтона) – гамильтониан. Вид этого оператора¹² исходит из определения. Механическая энергия системы есть сумма её кинетической и потенциальной энергий. Первая, как вы помните, для частицы определяется как $T = \frac{mv^2}{2}$. Принято, однако, использовать запись, содержащую импульс. Учитывая, что $p = mv$, можно показать, что $T = \frac{p^2}{2m}$. А вот вид потенциальной энергии в каждом случае индивидуален и зависит от того, с какими телами наша частица (система) взаимодействует.

Вид оператора кинетической энергии легко получить, учитывая, что $\hat{p}^2 = \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{p}} = (-i\hbar\nabla)(-i\hbar\nabla) = -\hbar^2\nabla^2$. Здесь ∇^2 – оператор Лапласа. Таким образом, $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}$.

Вид оператора потенциальной энергии в каждом случае индивидуален, поэтому в общем виде его записывают просто как \hat{U} . В координатном представлении этот оператор представляет собой некоторую функцию от координат и времени $\hat{U} = U(\mathbf{r}, t)$. Если величина взаимодействия с течением времени остаётся неизменной, то оператор потенциальной энергии от времени не зависит:

¹¹Пьер-Симон маркиз де Лаплас (фр. *Pierre-Simon de Laplace*) (1749 – 1827) – французский математик, физик, механик, астроном.

¹²Назван в честь сэра Уильяма Роуэна Гамильтона (англ. *William Rowan Hamilton*) (1805 – 1865) – ирландского математика, механика-теоретика, физика-теоретика, одного из основоположников теоретической механики.

$\hat{U} = U(r)$. Действие этого оператора сводится к умножению на функцию: $\hat{U}\Psi = U(r, t)\Psi$.

Таким образом, общий вид оператора энергии, или, как его ещё называют, оператора Гамильтона, \hat{H} даётся выражением

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \hat{U}. \quad (2.25)$$

Данный оператор играет наиважнейшую роль в квантовой теории. Каждая система ввиду индивидуальности оператора \hat{H} обладает своим набором собственных значений энергий, поэтому анализ собственных функций и собственных значений \hat{H} для каждой системы представляет первостепенную задачу квантовой теории. Рассмотрим несколько примеров.

Пример 2.5. Свободная частица – это такая частица, которая ни с кем и ни с чем не взаимодействует, а потому перемещается равномерно и прямолинейно. Таким образом, она обладает только кинетической энергией. В связи с этим оператор Гамильтона будет иметь для такой частицы вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}. \quad (2.26)$$

Пример 2.6. Замкнутая система двух частиц. Замкнутой называют систему, которая ни с чем не взаимодействует. Пусть систему составляют две частицы. Тогда каждая из них обладает кинетической энергией, а также эти частицы взаимодействуют между собой. У такого взаимодействия есть одна особенность – силы направлены вдоль одной прямой и зависят только от вектора относительного расположения частиц $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, а энергия взаимодействия зависит только от величины этого вектора. Для такой системы оператор Гамильтона будет иметь вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dr_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2}{dr_2^2} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|).$$

Используя обозначение \mathbf{r} , введённое выше гамильтониан можно записать в виде:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + U(r). \quad (2.27)$$

Данный гамильтониан имеет вид оператора энергии для одной частицы массой μ , определяемой как $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ и называемой *приведённой массой*. В этом случае говорят, что гамильтониан записан в системе центра масс двух частиц. В некоторых задачах такое рассмотрение оказывается удобным, например, при изучении атома водорода, водородоподобных атомов и др.

Пример 2.7. Одномерный линейный гармонический осциллятор. Часто используемая в физике система – гармонический осциллятор – система, способная совершать свободные гармонические колебания. На частицу, совершающую подобные колебания в одном направлении, в каждый момент времени действует возвращающая сила, а потенциальная энергия задаётся выражением $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Оператор Гамильтона:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (2.28)$$

Данная система находит своё применение в квантовой теории. Так, атомы в узлах кристаллической решётки любого твёрдого тела совершают малые колебания, вызываемые действием окружающих соседей, и могут рассматриваться как простейшие гармонические осцилляторы.

Задания для самостоятельной работы

Задание 2.12. Подействуйте оператором проекции импульса на ось ОХ на следующие функции:

- 1) $\Psi_1(x) = \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right)$;
- 2) $\Psi_2(x) = Cx^2 e^{-x^2}$.

Задание 2.13. Подействуйте оператором импульса на следующие функции:

- 1) $\Psi_1(r) = Ce^{-r}, (r > 0)$;
- 2) $\Psi_2(r) = C(x^2 + y^2)e^{-z^2}$.

Задание 2.14. Подействуйте оператором (2.26) на следующие функции:

1) $\Psi_1(x) = C \cos(kx)$. Какой вывод можно сделать? Какую размерность имеет коэффициент k ?

- 2) $\Psi_2(x) = Ce^{-kx} (x > 0)$.

Задание 2.15. Найдите результат действия операторов $\frac{d^2}{dx^2}x^2$ и $\left(\frac{d}{dx}\right)x^2$ на функции: а) $C \cos(kx)$; б) Ce^{kx} .

Собственные функции (векторы) и собственные значения операторов

Рассмотрим два важных примера. Напомним, что собственные функции и собственные значения некоторого оператора \hat{M} могут быть определены из решения уравнения (2.15) и анализа полученного решения на предмет соответствия основным свойствам волновых функций.

Собственные функции оператора проекции импульса $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$. Запишем уравнение на собственные функции и собственные значения оператора проекции импульса на ось ОХ в координатном представлении:

$$\hat{p}_x \Psi_{p_x} = p_x \Psi_{p_x}. \quad (2.29)$$

Подставляя вид оператора импульса, получаем:

$$-i\hbar \frac{d\Psi_{p_x}}{dx} = p_x \Psi_{p_x}. \quad (2.30)$$

Решая данное уравнение (однородное линейное дифференциальное уравнение первого порядка), получаем:

$$\Psi_{p_x} = Ce^{\frac{ip_x}{\hbar}x}. \quad (2.31)$$

Коэффициент определяется из условия нормировки.

Если бы никаких ограничений на функцию не накладывалось, то полученное решение представляло бы собой собственную функцию оператора проекции импульса, а собственными значениями являлись бы любые комплексные числа. Здесь же, однако, мы имеем дело с волновыми функциями, описывающими состояние реальной физической системы, а это означает, что полученные функции должны отвечать трём обязательным свойствам: **конечность, непрерывность, однозначность**.

Полученная функция:

- 1) непрерывна;
- 2) однозначна, так как каждому значению x соответствует одно значение функции;
- 3) с конечностью есть одна тонкость. Попробуйте подставить вместо p_x комплексное (или просто мнимое) число и посмотрите, что получится. Убедитесь в том, что полученная функция в данном случае не является конечной. Если же ограничить значения p_x действительным множеством значений, то функция остаётся всегда конечной¹³.

Таким образом:

- набор собственных значений p_x – все действительные значения;
- набор соответствующих собственных функций задаётся (2.31).

Обычно используют обозначение $k = \frac{p_x}{\hbar}$, называемое также *волновым числом*. Его размерность обратна длине. В таком случае собственная функция нумеруется индексом k и имеет вид $\Psi_k(x) = C e^{ikx}$. Так, функция $\Psi_1 = C e^{ix}$ является собственной функцией оператора проекции импульса с соответствующим собственным значением, численно равным $p_x = 1 \cdot \hbar$ кг · м/с.

Собственные функции оператора проекции импульса \hat{L}_z . Для определения собственных функций и значений решается

¹³Напоминаем формулу Эйлера $e^{\pm i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$.

уравнение, которое для данного оператора имеет вид:

$$\hat{L}_z \Psi_{L_z} = L_z \Psi_{L_z}.$$

$$-i\hbar \frac{d\Psi_{L_z}}{d\varphi} = L_z \Psi_{L_z}.$$

Уравнение аналогично уравнению из предыдущего примера, следовательно, решение имеет ту же структуру:

$$\Psi_{L_z} = C e^{\frac{iL_z}{\hbar} \varphi}. \quad (2.32)$$

Коэффициент C определяется из условия нормировки, а φ – полярный угол сферической системы координат.

Аналогично проанализируем полученную функцию:

- 1) непрерывна;
- 2) анализ свойства конечности аналогично предыдущему случаю приводит нас к тому, что L_z должны быть действительными (как и положено собственным значениям операторов в квантовой теории);

3) здесь возникает тонкость с однозначностью. В отличие от предыдущего примера аргумент функции φ – полярный угол сферической системы координат. Два значения, разделённые на 2π , указывают на одну и ту же точку в пространстве. Рассмотрим, например, случай $L_z = 1,5\hbar$, функция (2.32) примет вид:

$$\Psi_{L_z} = C e^{1,5i\varphi}.$$

Значения $\varphi = \pi$ и $\varphi = 3\pi$ соответствуют одной точке в пространстве (при условии равенства двух других координат сферической системы). Таким образом, это одна и та же точка и значение волновой функции обязано быть одинаковым. Вычислим его:

$$\Psi(\pi) = C e^{1,5i\pi} = C(\cos 1,5\pi + i \sin 1,5\pi) = -iC;$$

$$\Psi(3\pi) = C e^{4,5i\pi} = C(\cos 4,5\pi + i \sin 4,5\pi) = iC.$$

Как мы видим, значения получились различными. Это и есть демонстрация неоднозначности. Следовательно, на L_z должны накладываться какие-то специальные ограничения, чтобы функция (2.32) оставалась однозначной.

Чтобы устранить неоднозначность, необходимо, чтобы при изменении φ на $2\pi n$, показатель экспоненты менялся так же на число, кратное 2π . Таким образом:

$$\frac{L_z}{\hbar}(\varphi + 2\pi) = \frac{L_z}{\hbar}\varphi + 2\pi\frac{L_z}{\hbar} = \frac{L_z}{\hbar}\varphi + 2\pi m, \quad m \in Z.$$

Отсюда следует, что L_z/\hbar должно быть целым. Таким образом, L_z – не произвольное действительное число, оно должно быть кратно \hbar .

Определим C . Для этого воспользуемся условием нормировки:

$$\int_0^{2\pi} |\Psi|^2 d\varphi = \int_0^{2\pi} |C|^2 d\varphi = 2\pi|C|^2 = 1 \rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Окончательно:

- собственные значения L_z кратны \hbar ; обычно пишут

$$L_z = m\hbar. \quad (2.33)$$

- набор соответствующих собственных функций задаётся (2.32).

При подстановке (2.33) в (2.32):

$$\Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m \in Z.$$

Так, функция $\Psi_2(\varphi) = C e^{2i\varphi}$ является собственной функцией оператора проекции момента импульса с соответствующим собственным значением, численно равным $L_z = 2\hbar$.

Пример 2.8. Полезно рассмотреть, как будут выглядеть собственные функции оператора L_z , если мы используем матричный или дираковский формализм. Итак, они нумеруются квантовым

числом m , которое может принимать целые значения. Собственную функцию, отвечающую квантовому числу m (то есть значению $L_z = \hbar m$), обозначим $|m\rangle$.

Вид этих функций:

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (2.34)$$

Состоянию $|0\rangle$ будет соответствовать вектор-столбец:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} \dots \\ 1 \\ \dots \end{pmatrix}.$$

Столбец имеет бесконечное число элементов, так как множество всех целых чисел бесконечно... Значение $m = 0$ является центральным среди всех этих значений. Таким образом, в векторе-столбце вместо многоточий нули, а единица располагается посередине столбца.

Рассмотрим теперь функцию $|\Psi\rangle = C \sin 2\varphi$. Посмотрим, каково её представление в базисе (2.34). Преобразуем выражение:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= C \sin 2\varphi = \frac{C}{2}(1 + \cos 4\varphi) = \frac{C}{2} + \frac{C}{4}e^{-4i\varphi} + \frac{C}{4}e^{4i\varphi} = \\ &= \frac{C\sqrt{2\pi}}{2} \cdot \frac{e^{i0}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{C\sqrt{2\pi}}{4} \cdot \frac{e^{-4i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{C\sqrt{2\pi}}{4} \cdot \frac{e^{4i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \\ &= \frac{C\sqrt{2\pi}}{2}|0\rangle + \frac{C\sqrt{2\pi}}{4}|-4\rangle + \frac{C\sqrt{2\pi}}{4}|4\rangle. \end{aligned}$$

Определим исходя из физического смысла коэффициентов:

$$\left|\frac{C\sqrt{2\pi}}{2}\right|^2 + \left|\frac{C\sqrt{2\pi}}{4}\right|^2 + \left|\frac{C\sqrt{2\pi}}{4}\right|^2 = 1 \Rightarrow \frac{3\pi}{4}|C|^2 = 1; \quad C = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}.$$

Следовательно,

$$|\Psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{1}{2}|-4\rangle + |0\rangle + \frac{1}{2}|4\rangle \right).$$

Соответствующий вектор-столбец и его «разложение» по базисным векторам:

$$|\Psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} \dots \\ 1/2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1/2 \\ \dots \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} \dots \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} \dots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} \dots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \dots \end{pmatrix}.$$

Вместо многоточий здесь имеются ввиду нули; $1/2$ сверху стоит на позиции, соответствующей базисному вектору $|-4\rangle$, 1 по центру соответствует базисному вектору $|0\rangle$; $1/2$ внизу расположен на позиции, соответствующей базисному вектору $|4\rangle$.

Запишем, в соответствии с (2.22) все ненулевые $\langle m|\Psi\rangle$:

$$\langle -4|\Psi\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{3}}; \quad \langle 0|\Psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}; \quad \langle 4|\Psi\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{3}}.$$

Остальные $\langle m|\Psi\rangle = 0$. Разложение в матричном виде или указание набора коэффициентов $\langle m|\Psi\rangle$, – это и есть представление состояния $|\Psi\rangle = C \sin 2\varphi$ в базисе оператора \hat{L}_z .

Иногда нам известна волновая функция, описывающая состояния и необходимо проверить, является ли она собственной для некоторого оператора. Для этого необязательно решать уравнение и сравнивать исследуемую функцию с решением, а достаточно воспользоваться (2.15).

Пример 2.9. Проверим, является ли функция $\Psi(x) = C \sin(2x)$ собственной функцией оператора $\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2}$. Подействуем опера-

тором на указанную функцию:

$$\hat{A}\Psi = -\frac{d^2}{dx^2}C \sin(2x) = -4C \sin(2x) = -4 \cdot \Psi.$$

Таким образом, $\Psi(x) \equiv \Psi_{-4}(x)$ является собственной функцией оператора \hat{A} , а соответствующее собственное значение $A = -4$.

Задания для самостоятельной работы

Задание 2.16. Определите собственные функции и собственные значения оператора (2.26). Свои результаты вы можете проверить, если загляните в следующую главу.

Задание 2.17. Найти собственное значение оператора

$$\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx},$$

принадлежащее собственной функции $\Psi_A(x) = \frac{C \sin(kx)}{x}$.

Задание 2.18. Определить, при каком значении параметра α функция $\Psi(x) = Ce^{-\alpha x^2}$ является собственной функцией оператора (2.28). Какую размерность имеет коэффициент α ? Укажите размерность полученного собственного значения оператора. Сделайте вывод.

Результаты измерений

Как мы уже обсуждали собственные значения операторов в квантовой теории имеют смысл результатов измерений значения физической величины у системы, находящейся в определённом состоянии.

Важное замечание: результатом измерения значения величины может быть только (!!!) одно из значений спектра (то есть одно из собственных значений оператора). Это особенно важно в случае дискретного спектра.

О результатах измерений мы говорили в самой первой главе. Теперь можно рассмотреть несколько примеров.

Пример 2.10. В результате измерений проекции импульса ОХ в у частицы, находящейся в некотором состоянии в 25% случаев наблюдаемое значение $p_x = 1 \cdot \hbar$ кг·м/с, а в 75% $p_x = 1,5 \cdot \hbar$ кг·м/с. Как будет выглядеть волновая функция, отвечающая данному состоянию?

Решение. Волновая функция представляет собой суперпозицию двух собственных функций оператора \hat{p}_x :

$$\Psi(x) = \frac{1}{2}e^{1 \cdot ix} + \frac{\sqrt{3}}{2}e^{1,5 \cdot ix}.$$

Пример 2.11. Система находится в состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi(\varphi) = A \cos \varphi$. Какие значения и с какими вероятностями могут быть получены при измерении проекции момента импульса на ось ОZ в этом состоянии?

Решение. В данном случае видно, что функция не является собственной функцией, поэтому это состояние не является состоянием с определённым значением проекции момента импульса. Для того, чтобы ответить на вопрос задачи, необходимо разложить данную функцию по собственным функциям оператора. В данном случае это довольно легко сделать, потому что косинус с помощью формулы Эйлера раскладывается на экспоненты с мнимым показателем, которые являются собственными функциями. Таким образом:

$$\Psi = A \cos \varphi = \frac{A}{2}Ce^{i\varphi} + \frac{A}{2}Ce^{-i\varphi} = \frac{A}{2}\Psi_1 + \frac{A}{2}\Psi_{-1}.$$

Таким образом, данное состояние является суперпозицией двух состояний с собственными значениями $L_z = \hbar$ и $L_z = -\hbar$. Отметим, что C здесь – это коэффициент в собственной функции, определяемый нормировкой; A – это коэффициент, отвечающий за вероятности результатов измерений.

Соответствующие вероятности равны по $0,25|A|^2$. Таким образом:

$$0,25|A|^2 + 0,25|A|^2 = 1 \rightarrow A = \sqrt{2}.$$

Вероятности можно определить и без вычисления A , достаточно знать, чему равно $0,25|A|^2$.

Получаем: если система находится в состоянии, описываемом функцией $\Psi(\varphi) = A \cos \varphi$, то в результате измерения проекции момента импульса могут быть значения с вероятностью 50% $\Psi(\varphi) = A \cos \varphi$ и с вероятностью 50% $L_z = -\hbar$.

Пример 2.12. Возможен случай, когда при многократных измерениях результат меняется, но пробегает множество совершенно различных собственных значений (этот случай реализуется в основном для величин, операторы которых имеют непрерывный спектр собственных значений). В этом случае, работая в координатном представлении, наблюдаемое значение величины определяют по формуле:

$$\langle M \rangle = \int_{\Omega} \Psi^* \hat{M} \Psi dV, \quad (2.35)$$

где Ω – область интегрирования.

Задания для самостоятельной работы

Задание 2.19. Определить возможные значения оператора \hat{L}_z и их вероятности для системы, находящейся в состоянии:

а) $\Psi(\varphi) = C(1 + \cos^2 \varphi)$; б) $\Psi(\varphi) = C(1 + \sin^2 \varphi)$; в) $\Psi(\varphi) = C(1 + \cos(3\varphi))^2$; г) $\Psi(\varphi) = C(1 - \sin(2\varphi))^2$.

Задание 2.20. Собственные значения и отвечающие им нормированные собственные функции оператора некоторой физической величины A равны $\Psi_k(x) = C \sin \frac{kx}{a}$ (a и C – константы). Волновая функция частицы в некоторый момент времени равна $\Psi(x) = B \sin \frac{2x}{a} \cos \frac{5x}{a}$ (B – константа). Какие значения величины A можно обнаружить при измерениях в этот момент времени?

Задание 2.21. Пусть собственная функция некоторого оператора \hat{F} имеет вид $\Psi_n(x) = C \sin \frac{\pi n x}{l}$ (l – некоторая постоянная, $x \in (0, l)$). Найти ожидаемое значение величины F при измерении, если система находится в состоянии а) $\Psi(x) = Ax(l - x)$; б) $\Psi(x) = A \sin^2 \frac{\pi x}{l}$.

Задание 2.22. Рассмотрите оператор инверсии \hat{I} . Его действие приводит к изменению знака у пространственных координат волновой функции, то есть $\hat{I}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r})$. Для простоты можно рассматривать одномерный случай: $\hat{I}\Psi(x) = \Psi(-x)$. Определите собственные функции и собственные значения данного оператора. Охарактеризуйте спектр.

Коммутаторы

Наконец, осталось выяснить, как определить, являются ли две величины A и B совместно измеримыми. Для ответа на данный вопрос можно прибегнуть к вычислению **коммутатора**.

Коммутатором $[\hat{A}, \hat{B}]$ двух операторов \hat{A} и \hat{B} называют оператор, определяемый по правилу:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (2.36)$$

Возможны два случая:

1) Коммутатором является нулевой оператор, другими словами при вычислении коммутатора выясняется, что $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. В таком случае говорят, что операторы коммутируют. С точки зрения квантовой теории это означает, что величины A и B совместно измеримы.

Примеры коммутирующих операторов: $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$; $[\hat{x}\hat{y}, \hat{p}_z] = 0$. В данном случае результат объясняется тем, что взятие производных, осуществляющееся при действии операторов проекций импульса, производится по одной переменной, а умножение – по другой.

2) Операторы не коммутируют. С точки зрения квантовой теории это означает, что в рамках одного измерения нельзя одновременно определить со сколь угодно высокой точностью значения физических величин A и B (величины не измеримы совместно).

Пример некоммутирующих операторов:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x] &= \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x = \\ &= i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}x - x\frac{\partial}{\partial x}\right) = i\hbar\left(\hat{1} + x\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial x}\right) = i\hbar\hat{1}. \end{aligned}$$

Комментарий: при проведении вычисления необходимо помнить, что вся конструкция действует на то, что написано справа – то есть справа стоит какая-то произвольная функция.

Задания для самостоятельной работы

Задание 2.23. Вычислите следующие коммутаторы: $[\hat{p}_x, \hat{x}^2]$; $[\hat{p}_x^2, \hat{x}]$.

Задание 2.24. Вычислите коммутатор $[\hat{H}, \hat{x}]$.

Задание 2.25. В задании 2.22 был введён оператор инверсии. Проанализируйте одномерный случай. Как вы думаете, с какими операторами (уже известными вам) коммутирует данный оператор.

2.2.5 Представление оператора в базисе другого оператора

Так же, как и любой вектор состояния, оператор так же может быть записан в различных представлениях. Для того чтобы понять, как выглядит оператор в каком-либо представлении, воспользуемся снова разложением (2.22) и определением оператора. Рассмотрим сначала более общий случай: *представление оператора в базисе другого оператора*. Итак,

1) Некий оператор \hat{F} отвечает реальному действию на систему. Если система находится в состоянии, описываемом волновой

функцией $|\Psi\rangle$, то воздействие на систему будет описываться как $\hat{F}|\Psi\rangle$ и приведёт к тому, что система перейдёт в некоторое новое состояние, описываемое другой волновой функцией $|\Phi\rangle$. Таким образом:

$$\hat{F}|\Psi\rangle = |\Phi\rangle. \quad (2.37)$$

2) Рассмотрим в качестве базисных функций систему собственных функций некоего оператора \hat{S} . В этом случае состояния $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$ согласно (2.22) в представлении этого оператора будут иметь вид:

$$|\Psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\Psi\rangle;$$

$$|\Phi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\Phi\rangle.$$

Задача состоит в том, чтобы понять, как при этом выглядит оператор \hat{F} .

Чтобы было хоть немного проще разобраться, давайте представим, что мы не в бесконечномерном пространстве (это вообще для нас не представимо), а в трёхмерном. В этом случае в указанных суммах по три слагаемых. Запишем соответствующие векторам состояниям $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$ векторы-столбцы:

$$|\Psi\rangle \equiv \begin{pmatrix} \langle 1|\Psi\rangle \\ \langle 2|\Psi\rangle \\ \langle 3|\Psi\rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}; \quad |\Phi\rangle \equiv \begin{pmatrix} \langle 1|\Phi\rangle \\ \langle 2|\Phi\rangle \\ \langle 3|\Phi\rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}.$$

Тогда (2.37) будет иметь вид:

$$\hat{F} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

В результате некоего математического действия из вектора-столбца размером (3×1) получаем вектор-столбец (3×1) . Из курса линейной алгебры известно, что этого можно добиться умножением вектора-столбца размером (3×1) на матрицу (3×3) :

$$(3 \times 3) \times (3 \times 1) = (3 \times 1).$$

Итак, получается, что оператор \hat{F} в представлении другого оператора в данном случае – это некая матрица 3×3 :

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Подставив (2.39) в (2.38), получим, например, для b_1 :

$$\langle 1|\Phi\rangle = b_1 = f_{11}a_1 + f_{12}a_2 + f_{13}a_3 = \sum_k f_{1k}a_k = \sum_k f_{1k}\langle k|\Psi\rangle. \quad (2.40)$$

Легко обобщить теперь этот результат для базисов любых размеров. m -й коэффициент разложения функции $|\Phi\rangle$ будет иметь вид:

$$\langle m|\Phi\rangle = \sum_k f_{mk}\langle k|\Psi\rangle. \quad (2.41)$$

Осталось определить, как именно вычисляется f_{mk} . Для этого воспользуемся (2.37), в которой представим $|\Psi\rangle$ в виде разложения по базису, а затем скалярно умножим на $\langle m|$:

$$|\Phi\rangle = \hat{F}|\Psi\rangle = \hat{F} \sum_n |n\rangle\langle n|\Psi\rangle;$$

$$\langle m|\Phi\rangle = \langle m|\hat{F}|\Psi\rangle = \langle m|\hat{F} \sum_n |n\rangle\langle n|\Psi\rangle = \sum_n \langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|\Psi\rangle. \quad (2.42)$$

Сравнив (2.41) и (2.42), заключаем:

$$f_{mk} = \langle m|\hat{F}|k\rangle. \quad (2.43)$$

f_{mk} называют **матричным элементом** оператора \hat{F} в представлении базиса оператора \hat{S} . Теперь (2.41) примет вид:

$$\langle m|\Phi\rangle = \sum_k \langle m|\hat{F}|k\rangle\langle k|\Psi\rangle. \quad (2.44)$$

2.2.6 Оператор в собственном представлении

Теперь рассмотрим, как выглядит оператор \hat{F} в своём собственном представлении. Здесь в качестве базиса выступает набор собственных функций данного оператора, так что:

$$\hat{F}|n\rangle = F_n|n\rangle.$$

Определим согласно (2.43) матричный элемент f_{kn} в данном базисе:

$$f_{kn} = \langle k|\hat{F}|n\rangle = \langle k|F_n|n\rangle = F_n\langle k|n\rangle = F_n\delta_{kn}.$$

Получаем, что только при $k = n$ получается не ноль. Таким образом, матрица оператора \hat{F} имеет ненулевые элементы только при $k = n$, а это элементы главной диагонали. Таким образом, есть только элементы f_{nn} , причём они равны соответствующему собственному значению.

В этом есть определённая аналогия с геометрическим примером, рассмотренным ранее. Аналогом данной матрицы является матрица в (2.9).

Выпишем теперь, как выглядит эта матрица:

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} F_1 & 0 & 0 \\ 0 & F_2 & 0 \\ 0 & 0 & F_3 \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Если вы посмотрите на (2.9), то увидите, что применение этой матрицы к одному из базисных векторов даст соответствующее собственное число, умноженное на этот же базисный вектор.

Переходы между двумя любыми представлениями, то есть получается между двумя матрицами – это задача линейной алгебры. Переход от (2.39) к (2.45) называется **диагонализацией** матрицы.

Пример 2.13. Рассмотрим, как выглядит оператор \hat{L}_z в собственном представлении.

Для того, чтобы его записать, нужно вспомнить, как выглядят собственные значения этого оператора:

$$L_z = m\hbar.$$

Таким образом, матрица (2.45) будет иметь вид:

$$\hat{L}_z = \begin{pmatrix} \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\hbar & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hbar & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}.$$

Задания для самостоятельного решения

Задание 2.26. Пусть оператор \hat{F} имеет два собственных вектора. Назовём их $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Соответствующие собственные значения обозначим F_1 и F_2 .

1) Запишите, как выглядит данный оператор в собственном представлении.

2) Рассмотрите следующие пары векторов:

а) $|0'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$; $|1'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$;

б) $|0'\rangle = \frac{1}{2}(\sqrt{3}|0\rangle + |1\rangle)$; $|1'\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle - \sqrt{3}|1\rangle)$.

Покажите, что каждая из пар составляет ортонормированный базис. Запишите, как выглядит оператор \hat{F} в каждом из этих базисов в матричном виде. Проанализируйте полученный результат: сравните суммы диагональных элементов (след) и определители (детерминант) полученных матриц; что можно сказать про недиагональные элементы.

Задание 2.27. Пусть оператор \hat{F} имеет четыре собственных вектора. Назовём их $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$. Соответствующие собственные значения обозначим F_1 , F_2 , F_3 , F_4 .

1) Запишите, как выглядит данный оператор в собственном представлении.

2) Рассмотрите следующую четвёрку векторов:

$$|0'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |3\rangle); |1'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle); \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle); \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |3\rangle).$$

Покажите, что данные четыре вектора образуют ортонормированный базис. Запишите, как выглядит оператор \hat{F} в указанном базисе в матричном виде. Проанализируйте полученный результат.

Глава 3

Стационарное уравнение Шрёдингера

Основным уравнением квантовой теории является уравнение Шрёдингера¹. В нестационарном случае (когда $U(\mathbf{r}, t)$) оно определяет неизвестную эволюцию состояния. В том случае, когда $U(r) = \text{const}$, состояние квантового объекта стационарно. Мы выше уже обращали внимание на то, что в стационарном случае координатная и временная части волновой функции разделяются, и для определения первой решают *стационарное уравнение Шрёдингера*:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \quad (3.1)$$

Как мы видим по структуре – это уравнение на собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона. Рассмотрим несколько важных примеров.

¹Эрвин Шрёдингер (нем. *Erwin Rudolf Josef Alexander Schrodinger*) (1887 – 1961) – австрийский физик-теоретик. Один из основоположников квантовой механики. Лауреат Нобелевской премии по физике 1933 г.

3.1 Свободная частица

Начнём рассмотрение задач на определение энергетического спектра систем со свободной частицы. Оператор Гамильтона даётся выражением (2.26), а (3.1) принимает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi. \quad (3.2)$$

Данное уравнение представляет собой линейное однородное дифференциальное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами. Как правило, в квантовой теории стараются такого рода уравнения делать приведёнными (то есть оставлять при старшей производной коэффициент единицу):

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0. \quad (3.3)$$

Для удобства дальнейшего решения вводится следующее обозначение:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (3.4)$$

1. E – энергия частицы, положительная, следовательно, k – действительно и, более того, положительно. Если мы знаем набор k , то мы знаем и энергетический спектр.

2. Размерность k :

$$\begin{aligned} [k] &= \left[\frac{m^{1/2} E^{1/2}}{\hbar} \right] = \left[\frac{m^{1/2} E^{1/2}}{E \cdot T} \right] = \left[\frac{m^{1/2}}{E^{1/2} \cdot T} \right] = \\ &= \left[\frac{m^{1/2}}{\left(m \cdot \frac{L^2}{T^2} \right)^{1/2}} \cdot T \right] = \left[\frac{1}{L} \right]. \end{aligned}$$

Таким образом, k – это величина, имеющая размерность обратной длины. В СИ это $1/\text{м}$. k так же называют ещё **ВОЛНОВЫМ ЧИСЛОМ**.

После введения данного обозначения уравнение (3.5) примет вид:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0. \quad (3.5)$$

Решением уравнения является суперпозиция двух экспонент:

$$\Psi_k(x) = C_1 e^{-ikx} + C_2 e^{ikx}. \quad (3.6)$$

Если бы нам нужно было решить просто дифференциальное уравнение, мы бы на этом остановились. Но здесь речь идёт о реальной системе, и (3.6) должно отвечать состоянию этой системы. А состояние может описываться только волновой функцией, на которую накладываются три главных условия: «непрерывность – ограниченность – однозначность».

1. Данная функция непрерывна.

2. Данная функция ограничена. Ранее мы указывали, что k – действительное положительное число, поэтому показатели в обеих экспонентах мнимые, но, согласно формуле Эйлера² $\exp^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$, поэтому значение волновой функции всюду ограничено (при условии конечности коэффициентов C_1 и C_2).

3. Функция однозначна.

Таким образом, все условия выполнены. Слагаемое $C_1 e^{ikx}$ соответствует частице, движущейся в положительном направлении оси OX , а $C_2 e^{ikx}$ – в отрицательном (рис.3.1). Если частица движется в положительном направлении оси OX , то $C_1 = C$ и $C_2 = 0$, а если в отрицательном, то наоборот.

Определение коэффициента C мы здесь не приводим³. С учётом вычисления C (3.6) для частицы, движущейся в положительном направлении оси OX , примет вид:

$$\Psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx}. \quad (3.7)$$

² Леонард Эйлер (нем. *Leonhard Euler*) (1707 – 1783) – швейцарский, немецкий и российский математик и механик.

³ Вычисление C можно посмотреть в [7] или [9]

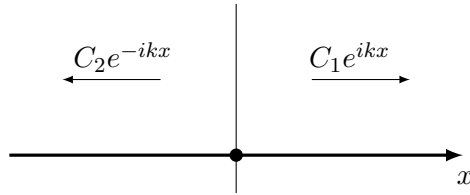


Рис. 3.1

Проанализируем полученный результат.

1. Выражение вида $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ikx}$ называется **плоской волной де Бройля**⁴.

2. Плотность вероятности $|\Psi_k|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$ есть величина постоянная, а это означает, что все положения свободной частицы являются равновероятными.

Энергия частицы для каждого k определяется из (3.4):

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (3.8)$$

Проанализируем полученный результат.

1. Энергетический спектр свободной частицы непрерывный, то есть энергия свободной частицы может быть любым положительным числом⁵.

2. Полученный энергетический спектр вырожденный, причём кратность вырождения равна двум. Это означает, что одной энергии соответствует два возможных состояния (их суперпозиция

⁴Луи де Бройль (фр. *Louis-Victor-Pierre-Raymond, 7ème duc de Broglie, Louis de Broglie*) (1892 – 1987) – французский физик-теоретик. Один из основоположников квантовой механики. Лауреат Нобелевской премии по физике 1929 г.

⁵Мы рассматриваем случай нерелятивистской свободной частицы, поэтому никаких ограничений на энергию не накладывается. Если частица релятивистская, то её состояние определяется из решения соответствующих уравнений, зависящих от типа частиц.

(3.6) и получается при решении уравнения Шрёдингера), отвечающие движению в различных направлениях⁶

3.2 Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме

3.2.1 Потенциальная яма

Укажем сначала, что такое «потенциальная яма».

Представьте, что Вы идёте по дорожке и, не замечая открытого люка, падаете⁷. С точки зрения физики можно в этом случае сказать, что Вы попали в «потенциальную яму», создаваемую гравитационным полем Земли. Ширина ямы – это, условно, диаметр люка.

Важно отметить два обстоятельства. Во-первых, если длина Вашего шага много больше ширины ямы, то Вы, скорее всего, в неё не попадёте. Во-вторых, если Ваша скорость (кинетическая энергия) достаточно велика, то тоже, вероятнее всего, падение не состоится.

Теперь представим себе некую частицу, пролетающую мимо другой частицы или какой-то более сложно устроенной системы. При пролёте на определённом расстоянии произойдёт взаимодействие, которое можно описывать силой или потенциальной энергией. Результатом «встречи» будет изменение состояния частицы и системы. Так, например, пролетающая частица может отклониться от первоначального направления движения.

⁶Мы рассматриваем здесь одномерный случай для простоты, принимая, что знаем, вдоль какой оси будет двигаться наша частица. В общем, трёхмерном, случае кратность вырождения получается равной бесконечности, так как любое из направлений движения свободной частицы с энергией E равновероятно. Например, если в результате какого-то взаимодействия одна из частиц оказывается свободной, то мы не можем указать, в каком именно направлении она улетит – все направления движения равновероятны, и это необходимо учитывать в практических приложениях.

⁷Мы ни в коем случае Вам этого не желаем.

Взаимодействие, однако, может оказаться настолько «сильным», что частица, испытывая воздействие системы, становится её «спутником». Область, в которой после этого оказывается частица, локализуется. Частица из свободной становится «связанной». Состояния, в которых она может при этом находиться, будут называться *связанными* состояниями. В этом случае говорят, что частица наша находится в потенциальной яме.

Потенциальную энергию взаимодействия можно описать функцией $U(x, y, z)$. Для упрощения дальнейшего рассмотрения мы сначала разберём несколько одномерных случаев, поэтому далее потенциальная функция будет зависеть только от одной переменной.

Может ли частица перейти из связанного состояния в свободное? Конечно. Однако, сама она сделать этого не может. Чтобы частице «выбраться» из потенциальной ямы, ей необходимо обладать достаточной энергией.

Например, в случае с падением в яму. Чтобы из неё выбраться, Вам нужно набрать определённую потенциальную энергию mgh , где h – глубина ямы. В Вашем случае можно попробовать использовать самого себя в помощь. Но квантовая система позволить себе этого не может. Дополнительная энергия может прийти только извне. Так же, как и Вам, кто-то может помочь выбраться.

Пока частица находится в яме, её положение можно сравнить с положением человека, который живёт в доме без лестниц и окон, но с лифтом. Житель, находясь, предположим, на втором этаже, вызывает лифт и может переехать на любой другой этаж. Но, если он в этом доме с рождения, то не знает, есть ли что-то кроме этих этажей. Он не может находиться между четвёртым и пятым этажами, например. Чтобы перебраться со второго на третий этаж, нужно некоторое точное значение энергии, соответствующее данному переходу.

3.2.2 Бесконечно глубокая потенциальная яма или яма с бесконечно высокими стенками

Представьте себе дом, который был описан выше, но у которого бесконечное число этажей. Вы даже не знаете, есть ли там где-то наверху «выход». Но вам и неважно. Это Ваш мир. Подобная модель будет называться «частица в яме с бесконечно высокими стенками». Описанная ситуация кажется фантастической, однако, при определённых условиях и она может работать. Например, в том случае, когда энергетических ресурсов, которыми мы обладаем, недостаточно для того, чтобы «освободить» частицу. К тому же это достаточно простая математическая модель, анализ решения которой позволяет разобраться в некоторых особенностях поведения квантовых объектов.

В первую очередь, необходимо разобраться, как будет выглядеть в данном случае функция $U(x)$. Тот факт, что стенки «бесконечно высокие» означает, что частица не может выбраться из ямы и попасть в область вне её. То есть, на языке энергий это означает, что не существует такой энергии, которую можно было бы сообщить частице, чтобы она выбралась из ямы. В таких случаях пишут, что в области вне ямы потенциальная энергия равна бесконечности. Однако, частица внутри ямы «свободна», то есть там никого и ничего нет, она свободна. Отсюда следует, что $U(x)$ будет иметь в данной модели следующий вид:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, a), \\ \infty & x \notin (0, a). \end{cases} \quad (3.9)$$

Схематически можно изобразить данную яму так, как показано на рис. 3.2. Яма разбивает всё пространство на три области. Оператор Гамильтона:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x),$$

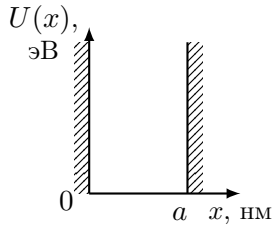


Рис. 3.2. Схематическое изображение потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками: a – ширина ямы.

а стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + U(x)\Psi = E\Psi. \quad (3.10)$$

Тонкость в решении этого уравнения заключается в том, что $U(x)$ – кусочно-заданная, следовательно, есть три области, и в каждой своё уравнение. В дальнейшем мы будем использовать следующие обозначения:

- I – область слева от ямы ($x < 0$);
- II – область внутри ямы ($0 < x < a$);
- III – область справа от ямы ($x > 0$).

Некоторое упрощение состоит в том, что в областях вне ямы, там, где $U(x) = \infty$, частица вообще находиться не может, поэтому во всех точках вне ямы волновая функция будет равна 0. Таким образом $\Psi_I(x) = \Psi_{III}(x) \equiv 0$.

В области II уравнение принимает вид (3.2). Решение можно записать сразу, оно будет иметь вид (3.6) с учётом (3.4). Однако, для дальнейшего анализа удобно будет решение записать в другом виде:

$$\Psi_{II}(x) = C_1 \sin kx + C_2 \cos kx. \quad (3.11)$$

Рассуждая так же, как и в примере со свободной частицей, мы должны проанализировать, отвечает ли полученное решение всем необходимым свойствам волновой функции.

1. Данная функция однозначна.

2. Данная функция конечна.

3. А вот с непрерывностью есть тонкость. В отличие от предыдущего примера со свободной частицей, которая теоретически может оказаться где угодно, для частицы в яме существует только ограниченная область в пространстве, в которой она может находиться (область II), а в двух других областях функция тождественно равна нулю. Однако на границах этих областей функция должна оставаться непрерывной. Это означает, что должны выполняться следующие условия (они ещё называются **граничными** или **краевыми**)⁸:

$$\begin{aligned}\Psi_I(0) &= \Psi_{II}(0), \\ \Psi_{II}(a) &= \Psi_{III}(a)\end{aligned}$$

Из первого условия получаем:

$$0 = C_1 \sin 0 + C_2 \cos 0 = C_2 \Rightarrow C_2 = 0.$$

Следовательно, волновая функция в области II должна иметь вид:

$$\Psi_{II}(x) = C_1 \sin kx.$$

Выполнение второго условия требует

$$C_1 \sin ka = \Psi_{III}(a) = 0 \Rightarrow C_1 \sin ka = 0.$$

У данного уравнения два альтернативных пути решения:

- либо принять $C_1 = 0$, но в этом случае тогда мы вообще получаем решение «всюду ноль», то есть отсутствие частицы. Но так как последняя существует, мы обязаны, наоборот, считать, что C_1 никак не 0;

⁸Указанные условия должны выполняться не только для самих функций, но и для их первых производных, однако в данной задаче второе условие не понадобится.

- остаётся только $\sin ka = 0$, а это может быть только при определённых значениях k :

$$\begin{aligned}\sin ka &= 0, \\ ka &= \pi n, n \in Z, \\ k_n &= \frac{\pi n}{a}.\end{aligned}$$

Обратите внимание на то, что у k появился индекс n . Это означает, что k не произвольно, а зависит от n . Таким образом, множество $\{k_n\}$ счётно, причём n начинает пробегать значения с единицы, а не с нуля. Действительно, если мы примем $n = 0$, то придём опять к случаю $k = 0$ и $E = 0$, когда частицы не существует.

Теперь мы можем записать решение уравнения Шрёдингера для частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками:

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ C_n \sin \frac{\pi n x}{a}, & 0 \leq x \leq a, \\ 0, & x > a. \end{cases} \quad (3.12)$$

Обратите внимание, что у функции появился индекс, так же, как и у постоянного коэффициента. Число n называют *главным квантовым числом*, оно нумерует уровни с определённой энергией. Состояние с $n = 1$ называют *основным*. Находясь в нём, частица обладает минимально возможной энергией.

Все остальные уровни называются *возбуждёнными*, состояние с $n = 2$ называют первым возбуждённым, с $n = 3$ – вторым возбуждённым и т. д. Соответствующие энергии определяем согласно (3.4):

$$\begin{aligned}k_n &= \frac{\pi n}{a} = \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}}, \\ E_n &= \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}.\end{aligned} \quad (3.13)$$

Проанализируем полученное выражение для спектра энергий.

1. Данный спектр дискретный. Это означает, что энергия частицы в яме не может быть произвольным числом, и все состояния частицы можно пронумеровать.

2. Спектр невырожденный: каждому значению энергии E_n соответствует только одно состояние Ψ_n .

Остался только вопрос с C_n . Этот коэффициент определяется из условия нормировки. Волновая функция $\Psi_n(x)$ может быть использована для вычисления вероятности обнаружения частицы, находящейся в заданном состоянии, в какой-либо области пространства. Для этого необходимо вычислить интеграл:

$$P(x_1 < x < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \Psi^*(x) \Psi(x) dx. \quad (3.14)$$

Если вычислить (3.14) по всем возможным значениям координаты (по всему объёму), то мы должны получить единицу, так как это вероятность обнаружить частицу хоть где-то, если она существует. Учитывая, что частица в нашей модели может находиться только внутри ямы, то интеграл будет давать ненулевой вклад только в области $(0, a)$. Таким образом:

$$1 = \int_0^a \Psi^*(x) \Psi(x) dx = \int_0^a |C_n|^2 \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx. \quad (3.15)$$

Данный интеграл предлагается вычислить самостоятельно. В результате будет получено $|C_n|^2 = \frac{2}{a}$. Обратите внимание, что значение коэффициента не зависит от n .

Обычно функцию вне ямы не записывают. Тогда окончательно получаем для стационарных состояний частицы в яме с бесконечно высокими стенками:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a}; \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}. \quad (3.16)$$

!!! Частица в яме может находиться либо в одном из состояний, задаваемом (3.16), либо в линейной суперпозиции этих состояний.

!!! Значения, которые могут быть получены при измерении энергии частицы в яме, не произвольны, это может быть только одно из значений, задаваемых (3.16).

!!! Если состояние системы описывается линейной суперпозицией из m векторов состояний, то при измерении энергии прибор может выдавать только какое-то из значений энергий, соответствующих состояниям, входящим в суперпозицию.

Пример 3.1. Запишите волновую функцию и значение энергии, отвечающие второму возбуждённому состоянию частицы массы $m = 1$ ед. в яме шириной $a = 2$ ед.

Решение. Второе возбуждённое состояние – это состояние с $n = 3$. Получаем:

- волновая функция:

$$\Psi_3(x) = \sin \frac{3\pi x}{2}.$$

- энергия:

$$E_3 = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{8}.$$

Пример 3.2. Частица $m = 1$ ед. в яме шириной $a = 2$ ед. находится в состоянии, задаваемом волновой функцией $\Phi(x) = A(\sin \pi x + \sin 2\pi x)$. Какие значения и с какой вероятностью могут быть получены при измерении энергии у частицы в этом состоянии?

Решение.

1. Сначала необходимо посмотреть, является ли указанная функция собственной функцией оператора (в данном случае энергии, раз речь идёт о её измерении) Гамильтона. Сравнивая нашу функцию и функцию вида (3.16), делаем вывод, что не является, а является суперпозицией собственных.

Запишем собственную функцию для частицы в яме с данными параметрами:

$$\Psi_n(x) = \sin \frac{\pi n x}{2}$$

Отсюда следует, что $\Phi(x)$ является суперпозицией собственных функций с $n = 2$ и $n = 4$. Таким образом, функцию для простоты дальнейшего анализа можно переписать в виде:

$$\Phi(x) = A\Psi_2(x) + A\Psi_4(x).$$

2. Таким образом, при измерении энергии прибор будет выдавать одно из двух значений E_2 и E_4 :

$$E_2 = \frac{\pi\hbar^2}{2}; E_4 = 2\pi^2\hbar^2.$$

3. Наконец, обращаем внимание на коэффициенты при волновых функциях в суперпозиции, они одинаковы и равны A . Но квадраты модулей A^2 – это и есть искомые вероятности. Тогда получаем, что каждое из возможных значений энергии может быть получено с вероятностью 50%.

Пример 3.3. Частица в яме находится в первом возбуждённом состоянии. С какой вероятностью её можно будет обнаружить в левой половине ямы?

Решение. Для того чтобы ответить на этот вопрос, воспользуемся (3.14) для расчётов:

$$\begin{aligned} P(0 < x < a/2) &= \frac{2}{a} \int_0^{a/2} \sin^2 \frac{2\pi x}{a} dx = \frac{2}{a} \int_0^{a/2} \frac{1 - \cos \frac{4\pi x}{a}}{2} dx = \\ &= \frac{1}{a} \int_0^{a/2} dx - \frac{1}{a} \int_0^{a/2} \cos \frac{4\pi x}{a} dx = \frac{1}{2} - \frac{1}{a} \cdot \frac{a}{4\pi} \sin \frac{4\pi x}{a} \Big|_0^{a/2} = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Обращаем Ваше внимание на то, что второй интеграл с косинусом – это интеграл от периодической функции по её полному периоду, поэтому можно сразу было, не считая, писать ноль.

Таким образом, вероятность обнаружить частицу в левой половине ямы равна 0,5, так же, как и вероятность обнаружить её в правой половине ямы.

Пример 3.4. Частица в яме шириной $a = 1$ ед. находится в состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi(x) = \sqrt{2} \sin \pi x$. Определить ожидаемое значение координаты в этом состоянии.

Решение. Действуем аналогично всем случаям с измерениями.

1. Сначала необходимо определить, является ли указанная функция собственной функцией оператора координаты. Мы не искали собственные функции оператора координаты, но очевидно, что указанная функция собственной функцией оператора координаты не является (покажите это самостоятельно).

2. Данная функция так же не является суперпозицией конечного числа собственных функций оператора координаты.

3. Ожидаемое значение координаты вычисляем по формуле:

$$\langle x \rangle = \int_0^1 \Psi^*(x) \hat{x} \Psi(x) dx.$$

Подставляя значения, находим:

$$\langle x \rangle = 2 \int_0^1 x \sin(\pi x) dx = \frac{1}{2}.$$

Этот результат совершенно не означает, что объект находится в точке с этой координатой и при измерении прибор покажет 0,5. Среди выдаваемых прибором значений большинство будут локализоваться вблизи 0,5. Для получения более полной информации о состоянии нашего объекта обычно вычисляют ожидаемое значение квадрата координаты в этом состоянии, что предлагается сделать самостоятельно.

Задания для самостоятельного решения

Задание 3.1. Запишите волновую функцию и значение энергии, отвечающие основному и первому возбуждённому состояниям частицы массы равной массе электрона в яме шириной $a = 5$ нм (энергию рассчитать в джоулях и электрон-вольтах).

Задание 3.2. Частица $m = 1$ ед. в яме шириной $a = 1$ ед. находится в состоянии, задаваемом волновой функцией $\Phi(x) = A(\sin 3\pi x + \sin \pi x)$. Какие значения и с какой вероятностью могут быть получены при измерении энергии у системы в этом состоянии?

Задание 3.3. Частица $m = 1$ ед. в яме шириной $a = 0,5$ ед. находится в первом возбуждённом состоянии. Определить ожидаемые значения координаты и квадрата координаты и вычислить величину флуктуации $\sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$.

Задание 3.4. Частица в яме ширины $a = 3$ ед. находится в третьем возбуждённом состоянии. С какой вероятностью её можно будет обнаружить в левой трети ямы ($0 < x < 1$), во второй трети ямы ($1 < x < 2$)? Постройте график плотности вероятности частицы в этом состоянии. Отметьте штриховкой площади, численно равные найденным вероятностям.

Задание 3.5*. Предлагается подготовить программный модуль «Частица в яме с бесконечно высокими стенками», в котором реализуется:

- 1) задание ширины ямы и массы частицы – входные данные;
- 2) построение графиков волновой функции $\Psi(x)$ и плотности распределения вероятности $|\Psi(x)|^2$ для различных n (на одном графике одновременно построить зависимости при $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$);
- 3) провести вычисление энергий уровней для различных n в джоулях, эргах, электрон-вольтах (или атомных единицах энергии);
- 4) построить диаграмму энергий;
- 5) вычислить ожидаемое значение координаты и квадрата координаты, а также флуктуацию для нескольких различных n .

3.3 Атом водорода

3.3.1 Общие сведения

Анализируя общую структуру атома водорода, необходимо обратить внимание на следующее:

- тяжёлое положительно заряженное ядро локализовано в центре атома и занимает малую часть пространства этой системы, ядро в атоме водорода (у наиболее распространённого изотопа) представляет собой протон;
- отрицательно заряженный электрон находится в области вокруг ядра.

Параметры системы представлены в таблице 3.1.

Таблица 3.1

Параметр	Ядро	Область вокруг ядра
Масса	$M = 1,6726 \cdot 10^{-27}$ кг	$m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг
Заряд	$e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл	$-e$
Размеры	~ 1 фм $= 10^{-15}$ м	$0,053$ нм $= 5,3 \cdot 10^{-11}$ м
Плотность	$\sim 10^{18}$ кг/м ³ $= 10^9$ т/см ³	~ 100 кг/м ³

Важно обсудить такую величину как размер атома водорода. Он определяется из соображений классической физики, и полученное при расчётах число совпадает с экспериментальными данными.

Для расчёта радиуса атома водорода рассматривается полуклассическая модель, в которой электрон, находясь в основном состоянии (если атом предоставить самому себе, то электрон будет находиться в состоянии с наименьшей энергией – основном состоянии), движется вокруг ядра по окружности радиуса r . Этот радиус и принимается за размер атома водорода.

Для его оценки учтём, что:

- протон и электрон взаимодействуют по закону Кулона:

$$F = \frac{e^2}{r^2}.$$

Обращаем ваше внимание на то, что здесь приведена формула, записанная в системе СГС. В СИ необходимо было бы умножить на коэффициент $k = 9 \cdot 10^9 \frac{\text{Н} \cdot \text{м}^2}{\text{Кл}^2}$.

- кулоновская сила вызывает у электрона ускорение a , которое связано с действующей силой по второму закону Ньютона:

$$F = ma.$$

- с другой стороны действие этой силы приводит к тому, что электрон вращается по окружности. Сила действует только вдоль радиуса, поэтому движение по окружности будет равномерное, а ускорение будет направлено к центру окружности (центростремительное ускорение):

$$a = \frac{v^2}{r}.$$

Получаем:

$$\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \rightarrow r = \frac{e^2}{mv^2}.$$

- момент импульса электрона L не может принимать произвольные значения (поэтому и модель *полуклассическая*), при этом величина момента импульса электрона кратна \hbar . С другой стороны, величина момента импульса может быть найдена из определения:

$$L = rp = mvr.$$

Минимальное ненулевое значение момента импульса равно \hbar . Таким образом:

$$mvr = \hbar \rightarrow v = \frac{\hbar}{mr}.$$

Подставляя выражение для скорости в формулу для радиуса, получаем:

$$r = \frac{e^2 \cdot m^2 r^2}{m \cdot \hbar^2} \rightarrow r = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Данное число – радиус атома водорода – называют **боровским радиусом** и обозначают a_0 .

Рассчитаем это значение (в системе СГС):

$$a_0 = \frac{(1,054 \cdot 10^{-27})^2 \text{ эрг}^2 \cdot \text{с}^2}{9,1 \cdot 10^{-28} \text{ г} \cdot (4,8 \cdot 10^{-10} \text{ СГСЭ}_q)^2} = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 0,053 \text{ нм}.$$

Последняя строка в таблице 3.1 приведена для «наглядности». Масса ядра, как мы видим, больше чем в 1000 раз больше массы электрона, и размер занимаемой области соответственно больше примерно во столько же. Отсюда и такое чудовищное различие в плотности. Можете сравнить: плотность ядерного вещества в 10^{15} раз больше, чем плотность воды. Можете попытаться себе это представить, хотя думаю, вряд ли получится. Плотность электронного вещества в 10 раз меньше чем плотность воды – а это представить уже гораздо легче.

Что это даёт с точки зрения рассмотрения атома водорода как квантовой системы? Вы помните, что для исследования квантовой системы необходимо:

- указать вид оператора Гамильтона;
- записать с этим оператором уравнение Шрёдингера;
- решить данное уравнение и проанализировать полученное решение: проверить, всегда ли полученное решение удовлетворяет всем необходимым свойствам волновой функции, и, если не всегда, то при каких ограничительных условиях. Эти ограничительные условия и дают выражения для собственных значений – то есть энергетического спектра. Также нужно обеспечить выполнение условия нормировки волновой функции;
- наконец, дополнительно, необходимо изучить, с операторами каких физических величин коммутирует оператор Гамильтона, тогда мы будем знать, какие величины совместно измеримы с энергией у данной системы.

3.3.2 Квантово-механическое описание

Гамильтониан

1. Вообще говоря, система «атом водорода» состоит из двух объектов (ядро, электрон), поэтому, когда мы пишем оператор Гамильтона, должны учитывать и оператор кинетической энергии ядра, и оператор кинетической энергии электрона и оператор потенциальной энергии взаимодействия ядра с электроном.

Однако, ввиду того, что ядро имеет малый размер (по сравнению с атомной системой) и очень тяжёлое (по сравнению с массой электрона), оно малоподвижно. Да, оно будет двигаться из-за взаимодействия, но это будут пренебрежительно малые колебания, совершаемые практически на месте. Таким образом, можно считать, что в данной задаче мы имеем дело с движением одной частицы вокруг неподвижного центра притяжения. Более подробно мы разбирать этот вопрос не будем, однако отметить важный факт необходимо: *мы рассматриваем атом водорода как систему, состоящую из одного объекта (электрона), расположенного в некоторой области вокруг ядра.*

Всё это приводит к тому, что в операторе Гамильтона атома водорода будет только одно слагаемое, отвечающее кинетической энергии – оператор кинетической энергии электрона.

2. Электрон и ядро взаимодействуют по закону Кулона как две частицы, обладающие электрическими зарядами. Причём, так как заряды противоположные, то имеет место притяжение. Электрон из-за этого находится в определённой области и не является, таким образом, свободной частицей. Электрон в атоме – это объект, находящийся в связанном состоянии. А, как Вы помните, мы говорили, что у квантового объекта, находящегося в связанном состоянии, набор энергий дискретный. Уже можно такое предположение делать. Далее мы увидим, что так оно и есть.

3. Система обладает ещё одним важным свойством. Ядро атома очень тяжело и мало и расположено в «центре» системы. Элек-

трическое ⁹ поле ядра обладает следующим свойством: величина силы, с которой ядро действует в каждой точке на помещённый в неё заряженный объект, будет зависеть только от величины заряда и расстояния между ядром и этой точкой, но не будет зависеть от того, в каком направлении эта точка располагается. Другими словами, если Вы размещаете один и тот же заряд в различных точках на окружности радиуса r , в центре которой находится ядро, то сила, действующая со стороны ядра, будет одинаковой и не будет зависеть от того, где именно на окружности находится заряд. То же самое можно сказать и про потенциальную энергию объекта, помещённого в поле ядра (сила и потенциальная энергия – связанные между собой величины).

Поля, обладающие такими свойствами, называются **центральными** или **сферически-симметричными**. Именно поэтому для таких систем предпочтительно математическое описание в **сферической системе координат**.

Итак, вокруг атомного ядра существует своеобразная «потенциальная яма», причём потенциальная энергия частицы в ней зависит только от расстояния от центра и имеет вид:

$$U(r) = -\frac{e^2}{r}. \quad (3.17)$$

Обращаем Ваше внимание на то, что здесь приведена формула, записанная в системе СГС¹⁰.

Ниже представлен график (в относительных единицах) потенциальной энергии.

Таким образом, теперь мы можем записать, как будет выглядеть оператор Гамильтона для атома водорода:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r}. \quad (3.18)$$

⁹И гравитационное кстати тоже, ядро же обладает массой. Просто гравитационное гораздо слабее электрического по интенсивности и не учитывается.

¹⁰В СИ присутствовал бы ещё коэффициент $k = 9 \cdot 10^9 \frac{\text{Н} \cdot \text{м}^2}{\text{Кл}^2}$.

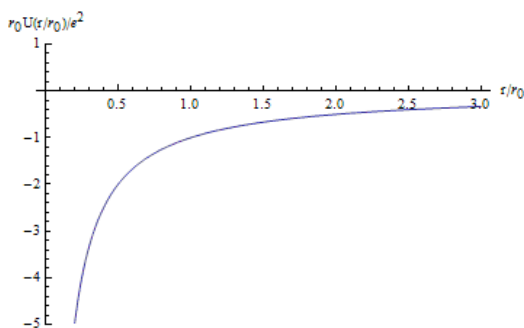


Рис. 3.3. График функции (3.17). Построен в относительных единицах

Здесь — элементарный заряд; m — масса электрона (если быть точными, то m — это так называемая приведённая масса системы «ядро-электрон», но она практически равна массе электрона); r — это расстояние между ядром и электроном (с учётом того, что ядро практически покоится, систему координат выбирают таким образом, чтобы её начало совпадало с положением ядра, тогда r — это фактически расстояние от начала координат до предполагаемого положения электрона).

Обращаем внимание: этот оператор Гамильтона уже не одномерный (!), а трёхмерный.

Уравнение Шрёдингера

Общая запись

Для того чтобы понять, что вообще происходит с электроном в атоме водорода, если предоставить этот атом самому себе (не действовать никак на него, не помещать ни в какие дополнительные внешние поля), необходимо решать стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \quad (3.19)$$

Оператор Гамильтона имеет вид (3.18). Задача получается трёхмерной, и она аналитически решается (что бывает далеко не всегда). Более того, если проводить вычисления в сферической системе координат (напоминаем, что в ней три координаты – одна «радиальная» r и две «угловые» θ и φ), то решение существенно упрощается, а именно радиальную и угловые переменные удаётся разделить. Причина этого уже обсуждалась выше (сферическая симметрия нашей квантовой системы). Подробное решение этого уравнения мы приводить не будем, но некоторые важные аспекты мы обсудим.

В первую очередь, нужно преобразовать вид оператора кинетической энергии, содержащего оператор Лапласа ∇^2 . В декартовой системе последний имеет вид суммы вторых производных по координатам:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Напоминаем, как связаны координаты декартовой и сферической систем:

$$x = r \cos \varphi \sin \theta,$$

$$y = r \sin \varphi \sin \theta,$$

$$z = r \cos \theta.$$

Можно показать (попробует проделать вычисления самостоятельно), что в сферической системе координат оператор Лапласа будет иметь вид:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \quad (3.20)$$

В данном выражении выделяют две части:

- первые два слагаемых – это так называемая *радиальная* часть оператора Лапласа ∇_r^2 ;

- выражение в скобках содержит только угловые переменные и представляет собой *угловую* часть оператора Лапласа $\nabla_{\theta, \varphi}^2$. Важно то, что выражение в скобках совпадает с оператором квадрата

момента импульса \hat{L}^2 (2.23) с точностью до знака и квадрата постоянной Планка: $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2$.

С учётом вышеизложенного (3.20) примет вид

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2},$$

а уравнение Шрёдингера (3.19):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla_r^2 - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) \Psi - \frac{e^2}{r} \Psi = E \Psi.$$

Обычно уравнение записывают в приведённом виде, то есть таким, чтобы при операторе Лапласа был коэффициент 1:

$$\nabla_r^2 \Psi - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r} + E \right) \Psi = 0. \quad (3.21)$$

Зависимость от углов в (3.21) «скрыта» в операторе квадрата момента импульса.

Подходы к решению

Представьте, что электрон вращается вокруг ядра. Это на самом деле не совсем так, но данная модель вполне рабочая. В центральном поле движение всегда плоское. Что это означает? Это означает, что, если частица движется в поле подобном нашему, то движется она всё время в одной плоскости. Так вот при таком движении вводят систему координат, в которой ось OZ перпендикулярна плоскости вращения.

Из курса механики известно, что при движении в сферически-симметричном поле сохраняется квадрат момента импульса и его проекция на ось OZ. Но, вместе с тем выполняется и закон сохранения энергии. А это означает, что энергия, квадрат момента импульса, проекция момента импульса могут иметь совместно измеримые определённые значения (!!!). Таким образом, можно

предположить, что операторы \hat{L}^2 , \hat{L}_z и \hat{H} коммутируют. И это действительно так.

Далее, если вернуться к виду операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z , то можно обратить внимание на то, что они зависят только от угловых переменных, следовательно, и собственные функции этих операторов зависят только от них. А уравнение (3.21) можно разделить на два: уравнение на функцию, зависящую от радиальных координат и функцию, зависящую от угловых координат. Причём, общее решение – волновая функция, которую мы ищем, представляет собой произведение этих функций:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi). \quad (3.22)$$

Подставляем (3.22) в (3.21) – переменные «разделяются». Вычисления проведите самостоятельно. Окончательно получим:

$$r^2 \frac{\nabla_r^2 R(r)}{R(r)} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r} + E \right) r^2 = \frac{\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi)}{\hbar^2 Y(\theta, \varphi)}.$$

Слева остаётся зависимость от радиальной переменной, а справа – от угловых.

Равенство должно выполняться при любых значениях координат. Это возможно только в том случае, когда левая и правая части выражения представляют собой константу:

$$r^2 \frac{\nabla_r^2 R(r)}{R(r)} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r} + E \right) r^2 = \frac{\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi)}{\hbar^2 Y(\theta, \varphi)} = A. \quad (3.23)$$

Решение задачи на угловую часть волновой функции

Сначала решают уравнение на функцию Y . Мы напишем сразу решение и обсудим его. Содержание решения выходит за рамки вашего курса по квантовой теории¹¹. Итак, уравнение выглядит следующим образом

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = A \hbar^2 Y(\theta, \varphi). \quad (3.24)$$

¹¹Подробное решение описано в [7] или [4].

Это уравнение на собственные функции и собственные значения оператора квадрата импульса. Оно известно в математике как уравнение на так называемые сферические функции (или их ещё называют «*игрек эль эм функции*») [2]:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} i^l \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}};$$

$$Y_{l0}(\theta) = i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta).$$
(3.25)

Выражения приведены для ознакомления. Вторая формула – это частный случай для $m = 0$. В формулах P_l – полиномы Лежандра¹², а P_l^m – присоединённые полиномы Лежандра. Они определяются следующим образом [2]:

$$P_l(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \cdot \frac{d^l}{(d \cos \theta)^l} (\cos^2 \theta - 1)^l;$$

$$P_l^m(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \sin^m \theta \cdot \frac{d^{l+m}}{(d \cos \theta)^{l+m}} (\cos^2 \theta - 1)^l.$$

Данные функции имеют очень простой вид при малых значениях параметров l и m .

Так, например, укажем примеры для трёх значений:

$$l = 0, m = 0; l = 1, m = -1; l = 1, m = 1; m = 0.$$

Предварительно получим выражения для полиномов Лежандра:

$$P_0(\cos \theta) = \frac{1}{2^0 0!} \cdot (\cos^2 \theta - 1)^0 = 1;$$

$$P_1(\cos \theta) = \frac{1}{2^1 1!} \cdot 2 \cos \theta = \cos \theta;$$

¹² Адриен Мари Лежандр (фр. *Adrien-Marie Legendre*) (1752 – 1833) – французский математик.

$$P_1^1(\cos \theta) = \frac{1}{2^1 1!} \sin \theta \cdot 2 = \sin \theta.$$

Сферические функции:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \quad Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta;$$

$$Y_{1,\pm 1} = i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}.$$

Полученное решение необходимо проанализировать.

Итак, функции (3.25) – это решения уравнения (3.24). Можно обратить также внимание на то, что один из множителей в (3.25) представляет собой собственную функцию оператора \hat{L}_z . Отмечаем появление двух индексов l и m , это связано с анализом полученного общего решения уравнения на необходимые свойства волновой функции.

Итак, собственные функции зависят от двух параметров, называемых квантовыми числами. У каждого из них есть своё собственное название. Эти параметры нумеруют состояния с определёнными значениями квадрата момента импульса и проекции момента импульса на ось OZ.

Квантовое число l называют орбитальным. Оно может принимать любые неотрицательные целые значения (0, 1, 2, ...). Значение данного квантового числа задаёт определённое значение квадрата момента импульса L^2 :

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1). \quad (3.26)$$

Обращаем внимание, что в выражение для квадрата импульса не входит (!!!) параметр m , хотя собственные функции имеют этот индекс. Таким образом, нескольким собственным функциям соответствует одно собственное значение. Это означает, что оператор квадрата момента импульса имеет *вырожденный спектр*.

Возвращаясь к уравнению (3.24), теперь можно записать:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (3.27)$$

Значение орбитального квантового числа подсказывает форму электронного облака. Электрон – квантовый объект, который локализован в определённой области пространства вокруг ядра. Эта локализация может быть изображена в виде так называемого «электронного облака». Его форма определяется значением квадрата момента импульса электрона. В качестве примера рассмотрим первые три значения орбитального квантового числа.

Если $l = 0$, то $L^2 = 0$. Состояние с таким значением квадрата момента импульса сферически симметрично, выделенного направления для движения электрона не существует; в связи с этим форма электронного облака – сфера (шар).

В атомной физике значение орбитального квантового числа очень важно, поэтому для каждого состояния с заданным l имеются специальные названия. Так, состояние с $l = 0$ называется s -состоянием.

Если $l = 1$, то $L^2 = 2\hbar^2$. Форма электронного облака в этом случае напоминает «восьмёрку» (p -состояние). Если $l = 2$, то $L^2 = 6\hbar^2$. Форма электронного облака в этом случае похожа на «лепесток» (d -состояние). Далее идут f -, g -состояния и т.д.

Квантовое число m называют магнитным. Мы с ним встречались, когда получали собственные функции оператора \hat{L}_z . Оно может принимать только целые значения. Для реальной системы, однако, существует ещё более жёсткое ограничение: значение магнитного квантового числа по модулю не может превышать значение орбитального квантового числа. Таким образом, m может принимать значения при заданном l от $-l$ до $+l$. Подумайте, с чем связано это ограничение, почему оно возникает.

Магнитное квантовое число определяет значение проекции момента импульса электрона: $L_z = \hbar m$.

Если, например, $l = 0$, то m может быть равно только 0. Это состояние описывается волновой функцией, угловая часть которой равна Y_{00} .

Если $l = 1$, то m может быть равно -1 , 0 или 1 . Таким образом, мы можем записать три собственных функции $Y_{1,-1}$, Y_{10} , Y_{11} ,

каждая из них будет задавать состояние с различными L_z , но одинаковым значением $L^2 = 2\hbar^2$. Трём функциям будет соответствовать состояние с одним и тем же значением величины L^2 . В этом случае говорят, что *кратность вырождения равна трём*.

В общем случае какого-то заданного l магнитное квантовое число может принимать значения от $-l$ до l .

Задание 3.6. Определите кратность вырождения состояния с определённым значением l .

Решение уравнения на радиальную часть волновой функции

Возвращаемся к уравнению (3.23) и используем (3.27), получаем:

$$\nabla_r^2 R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r} + E \right) R(r) = 0.$$

Используя вид радиальной части оператора Лапласа, полученный выше, можно записать:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r} + E \right) R(r) = 0. \quad (3.28)$$

Данное уравнение мы решать не будем, укажем только последовательность действий¹³.

1. Делается подстановка $R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$. Если аккуратно её провести, то должно получиться следующее:

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] \chi = 0. \quad (3.29)$$

2. Полученное уравнение (3.29) можно рассматривать как одномерное уравнение, как будто частица движется в потенциале, задаваемом функцией $U_{eff}(r)$:

$$U_{eff}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \rightarrow$$

¹³Подробное решение изложено в [4], [7].

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U_{eff}(r)]\chi = 0.$$

3. Конечно, на решение накладываются определённые условия. Во-первых, r – неотрицательное число (по определению координаты в сферической системе и по самому смыслу этой величины).

Во-вторых, при $r \rightarrow 0$ радиальная функция $R(r)$ должна оставаться конечной (иначе, не будет никакого смысла в волновой функции – с помощью квадрата её модуля определяется вероятность нахождения объекта в некоторой области пространства), поэтому функция $\chi(r)$ должна так же стремиться к 0 при $r \rightarrow 0$. Это условие граничное записывают в виде

$$\chi(0) = 0.$$

Далее, слишком далеко от ядра вероятность обнаружить электрон так же мала и на очень далёком расстоянии обращается в 0, это означает что при $r \rightarrow \infty$ должно выполняться $R(r) \rightarrow 0$.

Приведём решение уравнения (3.28) ниже для ознакомления:

$$R_{nl} = \frac{2}{n^2 a_0 (2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} F\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{na_0}\right). \quad (3.30)$$

Здесь F – это вырожденная гипергеометрическая функция [2].

Важно обратить внимание на появление двух индексов. Один из них мы уже знаем – это орбитальное квантовое число (l). Второе – это n – главное квантовое число – оно и нумерует уровни энергий.

Выпишем в качестве примера две радиальные функции, с ними мы выполним далее несколько упражнений.

$$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}; \quad R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} e^{-\frac{r}{2a_0}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right). \quad (3.31)$$

Главное квантовое число может принимать только натуральные (!!!) значения. При этом, оказывается, что возникают ограничения

на орбитальное квантовое число, а именно: *орбитальное квантовое число l не может быть больше $(n - 1)$.*

Итак, мы получаем следующее решение стационарного уравнения Шрёдингера (3.21):

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (3.32)$$

где радиальная функция определяется (3.30), а угловая – (3.25).

Каждое состояние нумеруется тремя индексами – квантовыми числами.

Первое n – главное квантовое число, задаёт номер энергетического уровня (энергию). Может принимать натуральные значения: 1, 2, 3, ...

Второе l – орбитальное квантовое число, определяет квадрат момента импульса (форму электронного облака). Может принимать неотрицательные целые значения, но не более $(n - 1)$. Таким образом, если, например $n = 1$, то l может принимать только значение 0.

Третье m – магнитное квантовое число, определяет проекцию момента импульса на ось OZ. Может принимать целые значения, но только от $-l$ до l . Так, например, не может существовать состояние Ψ_{120} , потому что $l = 2$ больше $n = 1$ и т.п.

Для полноты картины необходимо отметить, что существует ещё одно квантовое число s – четвёртое – оно никак не следует из решения уравнения Шрёдингера (3.21), потому как величина, связанная с данным квантовым числом, определяет существенно квантовую характеристику электрона, называемую спином. О спине более подробно мы будем говорить в следующей главе.

Пока же стоит отметить, что:

- спином обладают только квантовые объекты;
- аналога спину у классических объектов нет;
- соответственно в стационарном уравнении Шрёдингера спин не появится;

- спиновая переменная и часть волновой функции, учитывающая наличие спина, никак не связана с пространственными координатами, поэтому общий вид волновой функции электрона в атоме водорода с учётом спина выглядит следующим образом:

$$\Psi_{nlms}(r, \theta, \varphi, s) = R_{nl}Y_{lm}(\theta, \varphi)\chi_s, \quad (3.33)$$

- спиновое квантовое число s может принимать только два значения: $+1/2$ и $-1/2$.

В дираковских обозначениях эти состояния записываются с перечислением квантовых чисел следующим образом: $|nlms\rangle$. Например, состояние с $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$, $s = +1/2$ можно обозначить следующим образом: $|100, \frac{1}{2}\rangle$.

Энергетический спектр

Анализ решения уравнения на радиальную часть волновой функции позволяет получить вид собственных значений оператора Шрёдингера, то есть возможных энергий электрона в атоме водорода [4]:

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{e^2}{a_0}. \quad (3.34)$$

Снова отметим, что для вычислений по данной формуле необходимо использовать систему СГС. Проанализируем приведённое выражение для энергии.

1. Собственные функции нумеруются тремя квантовыми числами, а собственные значения – только одним – главным квантовым числом. Это означает, что различным состояниям могут соответствовать одни и те же энергии. Таким образом, энергетический спектр электрона в атоме водорода *вырожден*.

2. Энергии состояний электрона в атоме водорода (связанных состояний) *отрицательны*. Обратите внимание на рис.3.3 – видно, что если электрон находится в яме, то его энергия – отрицательна.

Это два самых важных свойства энергетического спектра электрона в атоме водорода. Рассмотрим теперь некоторые примеры.

Анализ некоторых состояний

Основное состояние

Мы уже говорили выше, что если атом водорода предоставить самому себе, то электрон в нём, вероятнее всего, будет находиться в состоянии с наименьшей возможной энергией. Если обратить внимание на формулу (3.34), то мы увидим, что минимальное значение достигается при $n = 1$. Скольким состояниям соответствует данная энергия?

Если $n = 1$, то орбитальное квантовое число может принимать только значение $l = 0$ (так как оно изменяется от 0 до $n - 1$). Магнитное квантовое число m может быть равным только 0. Спиновое число s может принимать два значения $-1/2$ и $+1/2$.

В атомной физике эти состояния обозначаются $1s^1$ и $1s^2$. Напоминаем, что под «s» здесь понимается $l = 0$. В этом состоянии форма электронного облака – шар.

Получается, что при $n = 1$ имеем $l = 0$, $m = 0$ и два значения s . Это означает, что собственному значению E_1 соответствует два состояния $\Psi_{100,-1/2}(r, \theta, \varphi, s)$ и $\Psi_{100,+1/2}(r, \theta, \varphi, s)$. Причём эти функции будут отличаться только спиновой частью. В связи с этим получается, что данное состояние вырождено по спину (это означает, что энергия не зависит от значения спина). Кратность этого вырождения равна двум (по числу состояний, отвечающих одному собственному значению). Дальше мы не будем на этом акцентировать внимание и писать будем только координатную функцию, в данном случае это $\Psi_{100}(r, \theta, \varphi)$, определяемую по (3.32) с учётом (3.30) и (3.25).

Запишем эту функцию и определим соответствующую энергию.

$$\Psi_{100}(r, \theta, \varphi) = R_{10}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}};$$

$$E_1 = -\frac{1}{2 \cdot 1} \cdot \frac{e^2}{a_0} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{(4,8 \cdot 10^{-10} \text{СГСЭ}_q)^2}{0,53 \cdot 10^{-8} \text{см}} = -21,74 \cdot 10^{-12} \text{эрг}.$$

Расчёты проводятся в СГС.

Мы видим, что волновая функция зависит только от радиальной переменной, не зависит от углов. Это соответствует тому, о чём говорилось выше про форму электронного облака – она имеет форму шара: вероятность обнаружения электрона, находящегося в основном состоянии, в определённой области пространства не зависит от направления, в котором мы эту область выделяем. Эту энергию можно выразить и в джоулях, если вспомнить, что $1 \text{ Дж} = 10^7 \text{ эрг}$. Получим:

$$E_1 = -21,74 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}.$$

Часто энергии квантовых объектов выражают во внесистемных единицах – «электрон-вольтах». Это связано с тем, что энергии квантовых объектов, энергии переходов между состояниями выражаются в долях, единицах, сотнях, тысячах, ну может быть миллионах этих единиц.

Напомним, что «электрон-вольт» – это работа, которую совершает электрическое поле по переносу электрона между точками с разностью потенциалов в 1 вольт. Как известно эта работа равна произведению заряда электрона на разность потенциалов:

$$A = eU = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл} \cdot 1\text{В} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 1 \text{ эВ}.$$

Уже сейчас можно обратить внимание, что по порядку величины эта работа близка к E_1 . Выразим энергию основного состояния электрона в атоме водорода в электрон-вольтах:

$$E_1 = -21,74 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} / (1,6 \cdot 10^{-19}) = -13,5875 \text{ эВ} \text{ } (-13,6 \text{ эВ}).$$

Это минимально возможная энергия, которой может обладать электрон в атоме водорода.

Если снова обратиться к рис.3.3, то можно заметить, что в области выше 0 ямы нет. То есть, для того, чтобы вырвать электрон из ямы, необходимо сообщить ему такую энергию, при которой энергия электрона станет хотя бы равной 0 или выше.

Если электрон находится в своём основном состоянии, то его энергия $-13,6$ эВ, и для выхода в «свободное состояние» (континуум) необходима энергия $13,6$ эВ. При этом атом ионизуется. В связи с этим энергия $|E_1|$ так же называется ещё энергией ионизации.

Итак, запишем окончательно координатную часть собственной функции основного состояния и соответствующее собственное значение:

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}; \quad E_1 = -13,6 \text{ эВ}. \quad (3.35)$$

Первое возбуждённое состояние

Все состояния, в которых электрон обладает энергией, избыточной по сравнению с минимальной, называются возбуждёнными.

Следующее значение энергии ($n=2$):

$$E_2 = -\frac{1}{2 \cdot 2^2} \cdot \frac{e^2}{a_0} = -\frac{E_1}{4} = -5,44 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} = -3,4 \text{ эВ}.$$

Видим, что это значение уже гораздо ближе к 0.

Посмотрим, скольким состояниям (то есть скольким собственным функциям) соответствует данное собственное значение.

Итак, $n = 2$. При этом l может быть равным 0 и 1. Если $l = 0$, то форма электронного облака – шар, магнитное квантовое число m может принимать значение только 0. При этом возможны два значения спинового квантового числа. Координатная часть собственной функции данного состояния

$$\Psi_{200}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}.$$

В атомной физике это состояние будет обозначаться $2s$. С учётом возможных значений спина: $2s^1$ и $2s^2$. Обратите внимание, что и эта функция не зависит от угловых переменных.

Сравним квадраты волновых функций состояний Ψ_{100} и Ψ_{200} . Они указывают плотность распределения вероятности обнаружить квантовый объект в определённой области пространства. Здесь правда необходимо учесть, что мы работаем в сферической системе координат, поэтому вероятность того, что электрон, будучи в состоянии Ψ_{nlm} , может быть обнаружен в области Ω , необходимо вычислять по формуле:

$$P = \int_{\Omega} |\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 dV = \int_{\Omega} |\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi. \quad (3.36)$$

Вычислений проводить не будем. Для сравнения ниже представлены квадраты модулей волновых функций с учётом интегрирования по углам (от них волновые функции состояний 100 и 200 не зависят) и умножением на r^2 . По графику, в частности, можно

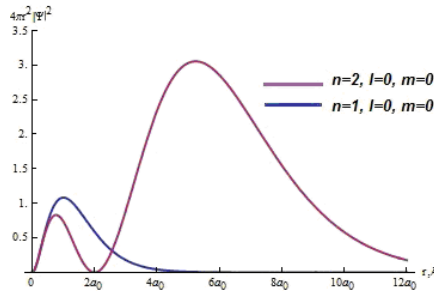


Рис. 3.4

увидеть, где скорее всего будет находиться электрон в том или ином состоянии. Мы видим, что, например, для основного состояния (график синего цвета) максимум распределения находится в точке a_0 , что вполне логично. Мы говорили, что электрон, находясь в основном состоянии, находится ближе всего к ядру, на расстоянии примерно равном боровскому радиусу, значит, вероятность обнаружить его в этой области наиболее высока. А если

электрон находится в состоянии с $n = 2$, то, скорее всего, его можно будет обнаружить на расстоянии около пяти боровских радиусов и т.д.

Для других состояний, где орбитальное и магнитное квантовые числа ненулевые, распределение более сложное, так как там проявляется уже зависимость от углов.

Задание 3.7*. Определите вероятность обнаружить электрон, находящийся в основном состоянии, в области $0 < r < 2a_0$.

Если $l = 1$, то форма электронного облака имеет вид «восьмёрки». При этом возможны следующие значения магнитного квантового числа: $-1, 0, 1$. Значение магнитного момента определяет ориентацию «восьмёрки» в пространстве. Таким образом, у нас есть три координатных собственных функции:

$$\Psi_{210}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{4\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta;$$

$$\Psi_{21,-1}(r, \theta, \varphi) = \frac{i}{4\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{-i\varphi};$$

$$\Psi_{21,+1}(r, \theta, \varphi) = \frac{i}{4\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{i\varphi}.$$

В атомной физике эти состояния принято обозначать $2p$ с верхним индексом, нумерующим значения магнитного и спинового магнитного чисел. Всего таких состояний может быть 6 (3 по магнитному квантовому числу и на каждое из них две возможности по спинам). Итак, получаем, что с $n = 2$ возможно 4 различных состояния (без учёта спина). А если мы учитываем спин (что вообще-то необходимо делать), то 8. И всем эти восьми состояниям соответствует одна и та же энергия E_2 . Таким образом, состояние с энергией E_2 вырождено по квадрату момента импульса, проекции момента импульса на ось OZ и по спину, причём кратность вырождения равна 8.

Случай $n=3$

Определим кратность вырождения состояния с $n = 3$. В этом случае энергия равна

$$E_3 = -\frac{1}{2 \cdot 3^2} \cdot \frac{e^2}{a_0} = -\frac{E_1}{9} = -2,42 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} = -1,51 \text{ эВ}.$$

Разберём этот случай:

l может быть равным 0, 1 или 2.

Если $l = 0$, то m может быть равным только 0 (1).

Если $l = 1$, то m может быть равным $-1, 0, 1$ (3).

Если $l = 2$, то m может быть равным $-2, -1, 0, 1, 2$ (5).

Итого: $5 + 3 + 1 = 9$ состояний. Учитывая, что для каждого из них спин электрона может принимать одно из двух значений, получаем, что таких состояний 18. Итак, 18 различным состояниям будет соответствовать одна и та же энергия.

Задание 3.8. Вычислите кратность вырождения для состояния с произвольным n .

Задания для самостоятельного решения

Задание 3.9. Вычислите энергии электрона, соответствующие уровням с $n = 4$ и $n = 5$, ответ выразите в электрон-вольтах.

Задание 3.10. Покажите, что оператор квадрата момента импульса коммутирует с оператором Гамильтона атома водорода. Что это означает с точки зрения возможных результатов измерения?

Задание 3.11 Постройте график функции

$$U_{eff}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

для $l = 0, 1, 2$, отметьте a_0 .

Задание 3.12. Электрон в атоме водорода находится в первом возбуждённом состоянии. Определите вероятность его обнаружения в области $0 < r < a_0$ и сравните эту вероятность с аналогичной для электрона, находящегося в основном состоянии.

Задание 3.13. Постройте графики функций $4\pi|\Psi_{n00}|^2r^2$ для нескольких n . Обратите внимание на количество нулей каждой функции. Проведите сравнительный анализ. Укажите на имеющиеся закономерности.

Глава 4

СПИН

4.1 Магнитный момент электрона. Магнетон Бора

Впервые о такой характеристике как *спин частицы* заговорили в рамках исследования задачи о поведении электрона в атоме при помещении последнего в постоянное магнитное поле (далее, всюду — просто *магнитное поле*).

Рассмотрим, например, атом водорода. Как уже было изложено ранее, он представляет собой тяжёлое, практически неподвижное пренебрежимо малое (*по сравнению с размерами атома*) положительно заряженное ядро и отрицательно заряженную, весьма подвижную, область вокруг ядра. Таким образом, если рассматривать эту систему с точки зрения зарядов, то получится, что положительный заряд не движется, а отрицательный — весьма подвижен. В упрощённой модели (*которой придерживались в начале XX в.*) этот отрицательный заряд вообще рассматривали как движущийся вокруг ядра по орбите электрон. В этом смысле можно вообще говорить о том, что в атоме имеется своеобразный кольцевой ток I , создаваемый движущимся зарядом — электроном. Оценим величину этого тока.

Сила кругового тока будет равна отношению заряда электрона к периоду обращения его по орбите. Мы принимаем в данной модели, что электрон вращается по круговой орбите радиуса r с линейной скоростью v . Используя связь периода с циклической частотой ($T = 2\pi/\omega$) и циклической частоты с линейной скоростью ($v = \omega r$), получим:

$$I = \frac{e}{T} = \frac{e\omega}{2\pi} = \frac{ev}{2\pi r}. \quad (4.1)$$

Что будет, если такую систему поместить в магнитное поле? Известно, что магнитное поле действует только на *движущиеся* заряды. Таким образом, какие-то изменения будут наблюдаться только у электрона, так как ядро в рамках данной модели неподвижно. Согласно классической электродинамике магнитное поле будет взаимодействовать с существующим в атоме кольцевым током. Но любое взаимодействие всегда описывается количественно силой, моментом сил или энергией. Удобно в этой модели считать, что на кольцевой ток в магнитном поле действует момент сил, стремящийся повернуть плоскость кольца (плоскость, в которой вращается электрон) определённым образом. Для количественного описания этого процесса вводится характеристика, называемая дипольным магнитным моментом, величина которого в системе Гаусса¹ определяется выражением:

$$\mu = \frac{1}{c}IS, \quad (4.2)$$

Укажем, что в СИ эта зависимость выглядит схожим образом — отсутствует только скорость света c . Подставляя (4.1) в (4.2), получаем:

$$\mu = \frac{I \cdot S}{c} = \frac{evr}{2c}. \quad (4.3)$$

¹Карл Гаусс (нем. *Johann Carl Friedrich Gauß*) (1777 – 1855) – немецкий математик, механик, физик, геодезист, астроном. Один из величайших математиков в истории.

Контур с током, обладающий магнитным моментом μ , помещённый в магнитное поле с индукцией \mathbf{B} испытывает механический вращающий момент, величина которого:

$$M = \mu B \sin \alpha, \quad (4.4)$$

где α — это угол между направлением магнитного момента и вектором магнитной индукции. Если при включении магнитного поля угол между \mathbf{B} и μ равен α , то виток начнёт поворачиваться таким образом, чтобы момент сил стал равным нулю (это произойдёт при $\alpha = 0$), когда магнитный момент «выстроится» по полю. Другими словами, когда плоскость вращения электрона станет перпендикулярна вектору магнитной индукции. Это и наблюдается в экспериментах.

Вернёмся к (4.3). Если умножить числитель и знаменатель дроби на массу, в числителе возникает выражение $m_e v r^2$, представляющее собой произведение импульса электрона на длину его радиус-вектора, совпадающего с радиусом орбиты. Это модуль момента импульса L . При движении электрона по окружности радиус-вектор — это радиус орбиты, а вектор скорости направлен по касательной. Следовательно, в каждый момент времени у электрона в рассматриваемой модели векторы \mathbf{r} и \mathbf{v} перпендикулярны (!). А это означает, что момент импульса для электрона направлен вдоль оси, перпендикулярной плоскости вращения. Это, в свою очередь, определяет выбор системы координат таким образом, чтобы указанное направление совпало с осью OZ . Таким образом, момент импульса электрона имеет только составляющую $L_z = m_e v r$ и выражение для дипольного момента (4.3) примет вид:

$$\mu = \frac{e L_z}{2 m_e c}. \quad (4.5)$$

Здесь важно отметить, что (4.5) отражает связь между абсолютными величинами моментов. Векторы же их направлены противоположно из-за того, что электрон имеет отрицательный заряд.

² m_e — масса электрона.

Однако, электрон – это объект, движение которого подчиняется законам не классической, а квантовой механики (*оттого и модель, рассматриваемая нами называется полуклассической*). Такая особенность поведения электрона приводит, в частности, к тому, что значение момента импульса электрона при орбитальном движении не может быть произвольным действительным числом. В частности, проекция момента импульса на ось OZ кратна постоянной Планка \hbar , а именно, $L_z = \hbar m$. Здесь $m = -l \dots, -1, 0, 1 \dots l$ – магнитное квантовое число. Таким образом,

$$\mu = \frac{e\hbar m}{2m_e c} = \mu_B m. \quad (4.6)$$

Константа $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$ – магнетон Бора. Магнитный момент электрона кратен данной постоянной. При вычислении её значения по указанной формуле необходимо помнить, что соотношение записано в системе Гаусса. В записи этого выражения в СИ отсутствует коэффициент c .

Задание 4.1. Вычислите значение магнетона Бора. Вычисления можете проводить в системе Гаусса или СИ, однако, помните о различиях записи (4.6) в этих системах.

4.2 Эксперименты Штерна-Герлаха и гипотеза Гаудсмита и Уленбека

В вышеприведённых рассуждениях всё очень логично... с точки зрения таких вот полуклассических оценок. Квантовая теория, как всегда, вносит коррективы. Начать хотя бы с того, что о каком-то конкретном моменте импульса электрона говорить вообще нельзя, потому что он определяется через значение координаты и импульса (скорости), а, как мы уже знаем, эти две величины никак нельзя определить точно в любой момент времени. В тонкости вдаваться сейчас не будем, но сразу можно сказать, что момент

импульса у электрона никто не оценивает. Мы уже об этом собственноручно говорили. Важными с точки зрения анализа состояния являются квадрат импульса и его проекция на ось OZ , а эти величины для многих квантовых объектов сохраняются, а потому имеют определённое значение. К тому же полуклассические оценки вполне допустимы для предварительных расчётов.

Всё было прекрасно ровно до тех пор, пока не были проведены эксперименты. Рассмотрим в качестве примера один из наиболее известных экспериментов, осуществлённых в 1922 году немецкими физиками Отто Штерном³ и Вальтером Герлахом⁴.

Целью эксперимента было доказательство того, что магнитный момент электрона может принимать только дискретный ряд значений⁵ согласно (4.6). Дискретность магнитного момента связана с дискретностью проекции момента импульса на ось OZ .

Как это можно было доказать? «Различить» значения L_z у электрона можно, поместив атом в магнитное поле. Величина взаимодействия атома с магнитным полем будет зависеть от значения L_z у последнего. Это приведёт к тому, что атомы с различными L_z будут по-разному отклоняться в магнитном поле (выше или ниже на различные расстояния). Если пучок атомов, летящий в каком-то направлении, попадает в область действия магнитного поля, то он расщепляется, так как, в зависимости от L_z каждого атома, величина воздействия магнитного поля на атом будет отличаться. Далее, каждый атом летит в своём направлении и попадает в определённую точку мишени, оставляя «след» в виде точки.

Если бы L_z принимало непрерывный ряд значений, то, каждый атом отклонялся бы индивидуально, причём как вверх, так и вниз (в зависимости от знака проекции L_z), и на мишени следы от прилетающих атомов были бы расположены хаотично, то есть

³Отто Штерн (нем. *Otto Stern*) (1888 – 1969) – немецкий и американский физик. Лауреат Нобелевской премии по физике 1943 года.

⁴Вальтер Герлах (нем. *Walther Gerlach*) (1889 – 1979) – немецкий физик.

⁵В квантовой теории говорят в таких случаях, что величина (здесь магнитный момент) «квантуется».

после эксперимента была бы видна затемнённая область в форме полосочки.

Если бы L_z принимало дискретный ряд значений, то вместо тёмной непрерывной полосочки была бы видна серия тонких полос (в соответствии с дискретностью набора значений L_z).

Результаты эксперимента подтвердили гипотезу о дискретности L_z у электрона. Более того, был поставлен вопрос: *а что если в пучке будут только атомы, находящиеся в основном состоянии?* При рассмотрении темы «атом водорода», мы указали на то, что в этом состоянии $l = 0$ и $m = 0$, а это означает, что момент импульса в целом и проекция момента импульса на ось OZ равны нулю (*кстати, оба этих момента одновременно должны быть отмечены, потому как из первого абсолютно не вытекает второе — можете сами подумать почему*). Тогда получается, что атомы в пучке в магнитном поле не должны отклоняться. Следовательно, в результате эксперимента должна была получиться узкая непрерывная полоска в центре мишени.

Результат эксперимента был неожиданным. Вместо ожидаемой одной полоски, были чётко выявлены две — одна чуть выше центра мишени, другая — ниже. Проведённая численная оценка (по величине отклонения полоски от центральной части мишени) показала, что значение проекции магнитного момента, которой должен был обладать электрон, чтобы так отклониться, равно μ_B .

В течение следующих трёх лет накопились и другие экспериментальные данные, которые подтверждали результаты Штерна и Герлаха. Первая попытка объяснить столь необычное поведение электронов в магнитном поле была предпринята в 1925 году Сэмюэлом Гаудсмитом⁶ и Джорджем Уленбеком⁷. Ими была высказана гипотеза о наличии у электрона «внутреннего (собствен-

⁶Сэмюэл Абрахам Гаудсмит (англ. *Samuel Abraham Goudsmit*) (1902 – 1978) – американский физик-теоретик.

⁷Джордж Юджин Уленбек (англ. *George Eugene Uhlenbeck*) (1900 – 1988) – американский физик-теоретик.

ного) механического момента» и связанного с ним собственного магнитного момента. Механическим моментом это было названо весьма условно, просто потому что эффекты, проявляемые в магнитном поле, связанные с наличием этой характеристики у электрона, напоминали картину взаимодействия магнитного момента (определяемого механическим моментом импульса) с магнитным полем. Далее, эта новая характеристика была названа *спином*⁸. Однако, как позже выяснилось, никакого отношения к вращению эта характеристика не имеет.

Большой вклад в изучение и построение теории спина внёс швейцарский физик-теоретик Вольфганг Паули⁹. Было показано, что спин электрона может принимать только два значения, что математически теорию спина можно построить аналогично теории механического момента L . Существенное отличие заключается в следующем. Если проекция L_z может для электрона принимать целые значения \hbar , то, для корректного объяснения результатов экспериментов со спином, пришлось исходить из того, что значения s_z должно быть $\frac{\hbar}{2}$. В этом случае противоречия, возникавшие в эксперименте, снимались.

Описать указанное свойство сложно, так как аналогов в классической физике спин не имеет. Можно привести такой мысленный пример. Представьте себе мир, в котором люди обладали бы следующим свойством. При повороте на 180° вокруг оси симметрии своей у них бы произвольно (!!!) поднимались руки, при следующем повороте – также произвольно опускались. Такой мир сильно бы отличался от привычного нам. Скажем, по положению рук мы могли бы делать какие-то дополнительные выводы о совершаемых человеком поворотах. Это очень грубая аналогия, но, по крайней мере, вот такую характеристику как «положение рук»

⁸от англ. *spin* – вращение, кружение. Вспомните, например, как называют приём подкрутки мяча в теннисе большим или настольном: такую технику называют «топ-спином».

⁹Вольфганг Паули (нем. *Wolfgang Ernst Pauli*) – швейцарский физик-теоретик. Лауреат Нобелевской премии по физике 1945 года.

можно было бы называть проекцией спина на ось OZ , и она бы имела отдалённую похожесть на то, что называется спином электрона или атомного ядра. Двум значениям отвечали бы поднятые руки (проекция спина вверх « \uparrow ») и опущенные руки (проекция спина вниз « \downarrow »).

Позже выяснилось, что любой квантовый объект, а не только электрон, обладает спином. Оказалось, что существуют квантовые системы, спин которых, так же как и у электрона, полуцелый. Но, вместе с тем, обнаружили объекты, обладающие и целым спином. Первые были названы *фермионами*¹⁰, а вторые — *бозонами*¹¹. Примером бозона является фотон, его спин равен 1.

Мы не будем подробно обсуждать вопрос о фермионах, бозонах, сложных системах. Отметим только, что стройную теорию спина в квантовой теории построил Вольфганг Паули¹². В дальнейшем мы подробнее рассмотрим только теорию спина электрона. Это связано с тем, что спин электрона принимает всего лишь два дискретных значения, а именно такие системы находят в настоящее время применение в квантовой теории информации и квантовых вычислениях.

4.3 Спиновые переменные. Оператор спина. Матрицы Паули

Ввиду специфики спина, а именно, отсутствия аналога в классической физике, можно сделать несколько важных предположений.

¹⁰ Названы в честь Энрико Ферми (итал. *Enrico Fermi*) (1901 – 1954) – итальянского физика-теоретика. Лауреат Нобелевской премии по физике 1938 года.

¹¹ Названы в честь Сатъендра Нат Бозе (англ. *Satyendra Nath Bose*) (1894 – 1974) – индийского физика, одного из создателей квантовой статистики.

¹² Любопытно, что Паули первое время отвергал наличие у электрона собственного магнитного момента.

1. В связи с наличием у квантового объекта *спина* s в волновой функции, описывающей состояние этого объекта, появляется ещё одна переменная (называемая спиновой). Так же появляется и ещё одно квантовое число — спиновое (m_s). Теперь волновая функция, описывающая состояние частицы, например, электрона в атоме водорода будет иметь общую структуру

$$|n, l, m, m_s\rangle = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)\chi_{m_s}.$$

Здесь χ_{m_s} — это спиновая часть волновой функции.

2. В связи с тем, что классического аналога данной величине нет, часть волновой функции, отвечающая за спин, не может быть выражена ни в координатном ни в импульсном представлениях.

3. Квантовая теория построена таким образом, что все уравнения в ней, операторы, векторы состояний в предельном переходе при $\hbar \rightarrow 0$ сводятся к определённым классическим аналогам. Мы не касались подробно этого вопроса. Однако, здесь стоит отметить, что, так как у спина нет аналогов в классической физике, то в каких бы уравнениях и записях в квантовой теории он ни встречался, в предельном переходе $\hbar \rightarrow 0$ он должен пропадать.

4. Вспомним, что число собственных значений спина электрона (а это известно было из экспериментов) равно двум. Следовательно, и собственных векторов должно быть два. Также, мы не можем записать в координатном или импульсном представлении и функцию спиновую и оператор. Получается, что собственные векторы можно представить в виде матриц-столбцов из двух элементов всего лишь, а это означает, что оператор спина — это будет матрица 2×2 . Причём, учитывая, что спин — это векторная величина, у неё есть три проекции, им будут соответствовать три оператора для каждой проекции. Аккуратный вывод этих матриц мы проводить не будем, однако укажем, что Паули исходил из двух предпосылок:

1) свойства этих матриц должны быть таковы, чтобы коммутационные соотношения для них были аналогичны коммутационным соотношениям проекций момента импульса;

2) любая матрица 2×2 отвечает некоторому повороту вектора на плоскости вокруг оси, перпендикулярной этой плоскости. Для того чтобы описать произвольный поворот необходимо задание в общем случае четырёх матриц: трёх матриц поворота вокруг каждой из осей и одной единичной матрицы.

Паули предложил использовать три матрицы (теперь они носят его имя), отвечающие всем необходимым требованиям. Далее мы просто укажем их вид:

$$\sigma_x \equiv \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y \equiv \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z \equiv \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Оператор спина записывается через матрицы Паули следующим образом:

$$\hat{s} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}, \quad (4.8)$$

где $\hat{\sigma} = \sigma_x \mathbf{i} + \sigma_y \mathbf{j} + \sigma_z \mathbf{k}$.

Итак, действие оператора спина (или оператора проекции спина) сводится к умножению вектора-столбца (называемого также *спинором*) на матрицу. Выпишем операторы проекции спина:

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Свойства матриц Паули (оператора спина). Матрицы Паули обладают важными свойствами, часть из которых мы рассмотрим.

Свойство 1. Любая матрица 2×2 может быть представлена в виде линейной комбинации матриц Паули и единичной матрицы. Это свойство похоже (но не аналогично) на свойство о том, что любой вектор на плоскости может быть представлен в виде линейной комбинации двух линейно независимых векторов, а любой вектор в пространстве — трёх. В пространстве матриц 2×2 число базисных элементов равно четырём. Таким образом, если A —

произвольная матрица 2×2 , то:

$$A = \lambda_0 I + \sum_{k=1}^3 \lambda_k \sigma_k.$$

Свойство 2. Квадрат любой из матриц Паули (и единичной кстати тоже) равен единичной матрице:

$$\sigma_k^2 = I.$$

Свойство 3. След любой из матриц Паули равен нулю:

$$Sp\sigma_i = 0.$$

Свойство 4. Определитель любой из матриц Паули равен -1 :

$$\det ||\sigma_j|| = -1.$$

Свойство 5. Произведение матриц Паули равно единичной матрице, умноженной на мнимую единицу:

$$\sigma_x \sigma_y \sigma_z = iI.$$

Свойство 7. Эрмитовость. Любая из матриц Паули (как и любой оператор наблюдаемой в квантовой теории) эрмитова.

$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i$$

Свойство 7. Коммутационные соотношения. Наконец, важными свойствами матриц Паули являются значения коммутаторов, посчитанных с ними.

$$[\sigma_x, \sigma_y] = \dots; [\sigma_x, \sigma_z] = \dots; [\sigma_y, \sigma_z] = \dots$$

Задание 4.2. Докажите свойства 2 — 6. В свойстве 7 вычислите коммутаторы. Исходя из полученных результатов для коммутаторов запишите коммутационные соотношения для проекций спина.

4.4 Собственные функции и собственные значения оператора проекции спина \hat{s}_z

Посмотрим, как выглядят собственные функции и собственные значения оператора проекции спина \hat{s}_z . Записываем уравнение на собственные значения и собственные функции оператора:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_\lambda = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_\lambda. \quad (4.10)$$

Укажем два способа решения приведённого матричного уравнения.

Способ 1. (4.10) можно рассматривать как систему двух линейных уравнений. Для того, чтобы понять, как она выглядит, проведём в левой части (4.10) умножение матрицы на матрицу:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}_\lambda = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_\lambda.$$

Данное матричное уравнение эквивалентно двум линейным уравнениям:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar}{2} - \lambda\right)a &= 0, \\ \left(\frac{\hbar}{2} + \lambda\right)b &= 0. \end{aligned}$$

Произведение равно нулю, когда хотя бы один из множителей равен нулю. Пусть $a = 0$. Но тогда во втором уравнении b не может быть равно нулю¹³. Действительно, если мы положим $b = 0$, то собственный вектор будет нулевым, а, следовательно, и вся волновая функция будет нулевой, что фактически будет означать, что никакого квантового объекта не существует. Отсюда следует однозначный вывод: b не может быть равно нулю ни при каких условиях, если $a = 0$. Но в этом случае второе равенство может быть

¹³Вспомните, такая же ситуация возникала у нас при рассмотрении частицы в яме при решении уравнения Шрёдингера.

верным только в случае $\lambda = -\frac{\hbar}{2}$. Отсюда следует, что решением системы является $a = 0$, b — любое и требуется, чтобы $\lambda = -\frac{\hbar}{2}$. Не будем забывать, что мы имеем дело с реальной системой, состояние которой описывается волновой функцией, и на эту волновую функцию накладываются определённые ограничения. В частности, условие нормировки, которое для спиновой части волновой функции имеет вид:

$$(a^* \ b^*)_{\lambda} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_{\lambda} = |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (4.11)$$

Учитывая (4.11), получаем окончательно, что одно из решений: $a = 0$, $b = 1$ при $\lambda = -\frac{\hbar}{2}$. Таким образом, одна из собственных функций (собственных векторов) оператора \hat{s}_z , соответствующая собственному значению $\lambda = -\frac{\hbar}{2}$ имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_{\lambda = -\frac{\hbar}{2}}.$$

Рассуждая аналогичным образом, находим второе решение: если предположить $b = 0$, то a не может быть равна нулю и из условия нормировки (4.11) следует, что $a = 1$. При этом, чтобы первое равенство оставалось верным, требуется, чтобы $\lambda = \frac{\hbar}{2}$. Это и есть второе собственное число. Получаем:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{\lambda = +\frac{\hbar}{2}}.$$

Подведём итог. Итак, у оператора \hat{s}_z имеются два собственных значения и две соответствующих собственных функции (собствен-

ных вектора)¹⁴:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{\lambda=+\frac{\hbar}{2}}; \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_{\lambda=-\frac{\hbar}{2}}. \quad (4.12)$$

Способ 2. Уравнение (4.10) можно решать как задачу на нахождение собственных векторов и собственных значений матрицы.

1. В первую очередь находят собственные значения матрицы. Для этого из элементов главной диагонали вычитают λ . Для полученной матрицы вычисляют соответствующий определитель и приравнивают к нулю. Получают так называемое *характеристическое уравнение*. Для нашей задачи:

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar}{2} - \lambda & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} - \lambda \end{vmatrix} = 0; \quad (4.13)$$

$$\lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4} = 0.$$

Последнее уравнение имеет два решения $\lambda = \pm \frac{\hbar}{2}$.

2. Для каждого собственного значения строится собственный вектор по следующему правилу. Собственный вектор для матрицы 2×2 представляет собой вектор-столбец из двух элементов. Записывают матрицу из (4.13), подставляя какое-то из собственных значений, действуют на вектор-столбец с ещё неопределёнными элементами и приравнивают к нулевому вектору-столбцу. Полученное уравнение решают. В нашем случае, например, для собственного значения $\lambda = +\frac{\hbar}{2}$ имеем:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

¹⁴Обратите внимание ниже, какое именно из состояний обозначено $|0\rangle$, а какое $|1\rangle$. Именно такие обозначения приняты в квантовой теории информации, квантовой криптографии и квантовых вычислениях.

$$-\hbar b = 0; a = \forall.$$

Таким образом, получаем, что $b = 0$, а a , учитывая условие нормировки, равно единице. Отсюда:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{\lambda=+\frac{\hbar}{2}}.$$

Мы получили тот же результат, что и при решении первым способом (см.(4.12)).

Задание 4.3. Вычислите аналогичным образом второй собственный вектор, отвечающий другому собственному значению.

Несколько слов об обозначениях.

1. Все вышеприведённые вычисления проводились в матричном формализме. Но, мы можем использовать и дираковскую нотацию. Можно встретить следующие обозначения. Когда проекция спина на ось OZ у электрона имеет значение $+\frac{\hbar}{2}$, то говорят, что электрон находится в состоянии «спин вверх» и обозначают в связи с этим $|\uparrow\rangle$. Соответственно, когда проекция спина на ось OZ у электрона имеет значение $-\frac{\hbar}{2}$, то говорят, что электрон находится в состоянии «спин вниз» и обозначают в связи с этим $|\downarrow\rangle$. Если свести воедино все обозначения, получим:

$$|\uparrow\rangle = |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{\lambda=+\frac{\hbar}{2}}; \quad |\downarrow\rangle = |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_{\lambda=-\frac{\hbar}{2}}.$$

2. По аналогии с магнитным числом m , которым нумеруют состояния с определённым L_z , вводится *спиновое магнитное число* (или, просто *спиновое число*). Вспомните, если электрон находится в состоянии с магнитным числом m , это означает, что его проекция момента импульса на ось OZ равна $L_z = \hbar m$. Таким же образом определяют и магнитное спиновое число. Значения проекции спина электрона на ось OZ могут быть равны $+\frac{\hbar}{2}$ или $-\frac{\hbar}{2}$, в этом случае говорят, что магнитное спиновое число равно

$m_s = +\frac{1}{2}$ или $m_s = -\frac{1}{2}$ соответственно. Тогда можно записать для проекции спина электрона $s_z = \hbar m_s$. Такая запись удобна для анализа, так как она абсолютно идентична записи для L_z .

Задание 4.4. Решите задачу о собственных значениях и функциях для проекции спина на ось OX ; на ось OY .

Задание 4.5. Запишите собственные векторы оператора σ_x в базисе собственных векторов σ_y и σ_z .

Задание 4.6*. Запишите, как выглядят операторы σ_y и σ_z в представлении оператора σ_x ; операторы σ_x и σ_z в представлении оператора σ_y .

Глава 5

ОСНОВЫ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

5.1 Операции на кубите

5.1.1 Понятие о кубите

В квантовых компьютерах для реализации вычислений используются процессы квантовой природы, проявляющиеся в экспериментах с объектами микромира — элементарными частицами, атомами, молекулами, молекулярными кластерами и др. Описание таких процессов основано на применении комплексных чисел и комплексных матриц.

Как хорошо известно, базовым понятием классической теории информации является **бит** [11]. Классический бит принимает значения 0 или 1 (и только эти значения).

Кубит (quantum bit) является наименьшим элементом, выполняющим функцию хранения информации в квантовом компьютере [10, 5, 12].

Кубитом называется квантовая система $|\psi\rangle$, допускающая два состояния: $|0\rangle$ и $|1\rangle$ [12]. В соответствии с так называемой «бракет» (bracket) нотацией Дирака, символы $|0\rangle$ или $|1\rangle$ читаются как

«кет 0» и «кет 1» соответственно. Скобки $|\dots\rangle$ указывают, что ψ является некоторым состоянием квантовой системы.

В случае с системой «электрон», «атомное ядро», $|0\rangle$ – это состояние с направлением спина вверх, $|1\rangle$ – спин вниз. В случае с двухуровневым атомом, $|0\rangle$ – это состояние с более низкой энергией.

Фундаментальное различие между классическим битом и кубитом заключается в том, что кубит может находиться в состоянии, отличном от $|0\rangle$ или $|1\rangle$. Произвольное состояние кубита определяется линейной комбинацией базисных состояний:

$$|\Psi\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle. \quad (5.1)$$

В рамках квантовых вычислений пользуются не только дираковским, но и матричным формализмом. В нём каждое состояние представляется в виде вектора столбца. В случае когда речь идёт о простой системе (одном кубите) с двумя выделенными состояниями, вектор состояния записывают в виде столбца с двумя элементами. Для вектора состояния, задаваемого (5.1):

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

Сравнивая (5.1) и (5.2), легко получить матричное представление состояний с определёнными значениями контролируемых параметров (спина/энергии), то есть для $|0\rangle$ и $|1\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \end{pmatrix} = C_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + C_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Таким образом,

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

«Бра»-векторы будут иметь вид¹ [3]:

$$\langle 0| = (1 \ 0); \quad \langle 1| = (0 \ 1). \quad (5.4)$$

Вычислим скалярные произведения базисных векторов и произвольного состояния:

1) для состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle 0|0\rangle &= (1 \ 0) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1; \\ \langle 1|1\rangle &= (0 \ 1) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1; \\ \langle 0|1\rangle &= (1 \ 0) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0; \quad \langle 1|0\rangle = 0. \end{aligned} \quad (5.5)$$

2) для произвольного состояния $|\Psi\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \Psi|\Psi\rangle &= (C_0^*\langle 0| + C_1^*\langle 1|)(C_0|0\rangle + C_1|1\rangle) = \\ &= |C_0|^2\langle 0|0\rangle + C_0^*C_1\langle 0|1\rangle + C_0C_1^*\langle 1|0\rangle + |C_1|^2\langle 1|1\rangle = |C_0|^2 + |C_1|^2 = 1, \end{aligned}$$

или, в матричном виде:

$$\langle \Psi|\Psi\rangle = (C_0^* \ C_1^*) \cdot \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \end{pmatrix} = |C_0|^2 + |C_1|^2 = 1. \quad (5.6)$$

Условие (5.6) называют условием нормировки.

5.1.2 Переход в другой базис

Базис $|0\rangle$ и $|1\rangle$ не единственно возможный. В случае с двухуровневой системой он является, безусловно, очень удобным. Но

¹«Бра»-вектор может быть получен из «кет»-вектора путём операции **эрмитового сопряжения**. При этом, в матричном виде этой операции соответствует транспонирование матрицы (5.2) и замена всех её элементов на комплексно сопряжённые. См. также (2.11).

нужно понимать, что им не ограничиваются. В различных прикладных задачах могут использоваться другие ортонормированные базисы. Что понимается под ортонормированным базисом? Для однокубитовой системы – это любые два вектора состояния, которые удовлетворяют двум условиям:

- 1) ортогональность;
- 2) нормированность на единицу.

Для базиса $|0\rangle$ и $|1\rangle$ эти условия проверены выше. Рассмотрим другой, очень распространённый, базис. Это два вектора:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle); \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \quad (5.7)$$

Обозначим их $|0'\rangle$ и $|1'\rangle$ соответственно. Определим, какие «координаты» имеет вектор базиса $|0\rangle$ в этом новом базисе. Для этого необходимо вычислить «проекцию» данного вектора на векторы нового базиса. Вспомните, из курса аналитической геометрии: для решения поставленной задачи вычисляют скалярные произведения вектора с базисными векторами. Итак, для $|0\rangle$ имеем:

$$\begin{aligned} \langle 0'|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 0| + \langle 1|)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}; \\ \langle 1'|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 0| - \langle 1|)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

Следовательно, $|0\rangle$ в новом базисе имеет вид:

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0'\rangle + |1'\rangle). \quad (5.8)$$

Для лучшего понимания можно рассмотреть геометрическую аналогию (рис. 5.1). В ней базисным векторам $|0\rangle$ и $|1\rangle$ можно сопоставить единичные орты координатных осей Ox и Oy (красные векторы на рисунке).

Любой вектор на плоскости можно представить в виде разложения по этим базисным векторам. Аналогично любой вектор

состояния можно представить в виде разложения базисных векторов $|0\rangle$ и $|1\rangle$.

Однако, если мы теперь повернём каждый из этих векторов на 45° , то получим два других вектора, которые будут так же единичными и останутся ортогональными (синие векторы на рисунке). Любой вектор можно будет разложить и по этому базису,

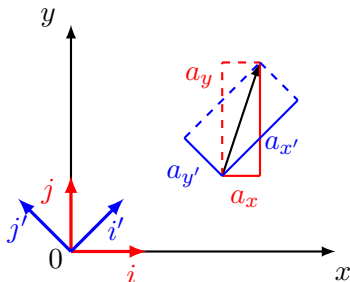


Рис. 5.1

конечно, он будет иметь другие координаты. Если написать координаты этого «повёрнутого» на 45° базиса, то получится выражение вида (5.7). Координаты вектора i в «повёрнутом» базисе будут иметь вид аналогичный (5.8).

Как видно из этой аналогии, существует бесконечное множество различных базисов. Если рассмотреть любую пару базисов, то переход между ними – это поворот на какой-то определённый угол.

Задания для самостоятельного решения

Задание 5.1. Рассмотрите вектор $a = i + j$. Запишите соответствующий вектор-столбец. Запишите вектор-столбец, соответствующий вектору, полученному поворотом вектора a на: а) 90° по часовой стрелке; б) 90° против часовой стрелки; в) 180° ; г) 60° по часовой стрелке; д*) на произвольный угол φ против часовой стрелки.

Задание 5.2*. Запишите преобразования из предыдущего задания в матричном виде.

Задание 5.3. Запишите матрицу, на которую необходимо умножить вектор-столбец, соответствующий вектору $\mathbf{a} = a_x \mathbf{i} + a_y \mathbf{j}$, чтобы получить вектор-столбец, соответствующий вектору $\mathbf{a}' = a_y \mathbf{i} + a_x \mathbf{j}$. На какой угол нужно повернуть \mathbf{a} , чтобы получить \mathbf{a}' ?

Задание 5.4*. Обобщение. Пусть имеется вектор $\mathbf{a} = a_x \mathbf{i} + a_y \mathbf{j}$. В результате его поворота на произвольный угол φ против часовой стрелки получается вектор \mathbf{a}' . Запишите матрицу поворота.

Задание 5.5. Запишите координаты вектора состояния $|1\rangle$ в базисе $|0'\rangle$ и $|1'\rangle$.

Задание 5.6. Запишите координаты векторов состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ в базисе, «повёрнутом» на произвольный угол φ . Воспользуйтесь результатами решения задания 5.1 (и 5.4).

5.1.3 Операции над одним кубитом

В рамках квантовых вычислений рассматривают различные операции над кубитами, называемые **гейтами** или **вентильями** (quantum gate). Их изображают в виде схем или диаграмм (quantum circuit). Некоторый квантовомеханический оператор U , преобразующий единичный кубит (one-qubit gate), изображается следующим образом:

$$|\psi_{\text{in}}\rangle \quad \text{---} \boxed{U} \text{---} \quad |\psi_{\text{out}}\rangle$$

Последовательность выполнения шагов квантового алгоритма соответствует направлению на схеме слева направо.

Каждая операция в схеме – это не просто абстракция, а сложно устроенный физический прибор, реализация которого зависит от того, с какой из квантовых систем работают. В случае поляризованных фотонов в качестве кубитов – это сложная система зеркал, в случае с двухуровневыми атомами – это система лазеров, в случае ядер с контролируруемыми спинами – это различные магнитные ловушки, а сами операции над кубитами производятся

в случае управления ядерными спинами при очень низких температурах и т.д.

Гейты осуществляют логические операции над кубитам. Заметим, что об изменении состояния $|\Psi\rangle$ во времени говорят также как об **эволюции** квантовой системы.

Математически воздействие квантового гейта на кубит $|\Psi\rangle$ осуществляется посредством применения **квантовомеханического оператора**, например, $U|\Psi\rangle$ [13, 14]. Операторы могут быть представлены в виде унитарных матриц. В частности, эволюция одного кубита описывается унитарной матрицей размера 2×2 .

Последовательное применение ряда операторов U_1, U_2, \dots, U_n к одному кубиту эквивалентно воздействию оператора W , матрица которого является произведением матриц $U_1 U_2 \dots U_n$ [12]:

$$U_n(U_{n-1}(\dots(U_2(U_1|\Psi)))\dots) = (U_n U_{n-1} \dots U_1)|\Psi\rangle = W|\Psi\rangle. \quad (5.9)$$

Такой оператор W называется **композицией** операторов U_1, U_2, \dots, U_n . Вследствие некоммутативности операции умножения матриц в общем случае имеет значение порядок применения квантовых гейтов.

В табл. 5.1 перечислены гейты, преобразующие один кубит, и матричные представления этих гейтов.

Пример 5.1. Измерение состояния. Важным шагом работы квантовых алгоритмов является процедура **измерения состояния**. При измерении состояния кубита он случайным образом переходит в одно из своих состояний: $|0\rangle$ или $|1\rangle$. Следовательно, комплексные коэффициенты C_0 и C_1 из определения кубита (5.1) связаны с вероятностью получить значение 0 или 1 при измерении его состояния. Согласно постулатам квантовой теории, вероятности переходов в состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ равны $|C_0|^2$ и $|C_1|^2$ соответственно. В связи с этим равенство (5.6) отражает закон сохранения вероятности. После измерения кубит переходит в базовое состояние, отвечающее классическому результату измерения. Вероятности получения результата $|0\rangle$ или $|1\rangle$, вообще говоря, различны для различных состояний квантовой системы.

Таблица 5.1
Операции над одним кубитом

Название	Обозначение	Матрица
Тождественное преобразование		$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
Элемент Паули X		$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
Элемент Паули Y		$\sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$
Элемент Паули Z		$\sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
Элемент Адамара		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$
Фазовый элемент		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$
Элемент $\pi/8$		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$
Измерение		Проекция на состояния вычислительного базиса

Другими словами, квантовое вычисление есть последовательность операций простого вида над совокупностью взаимодействующих между собой кубитов. На заключительном этапе процедуры квантового вычисления измеряется состояние квантовой системы и делается вывод о результате вычисления. Измерение дает возможность получить на макроскопическом уровне информацию о квантовом состоянии. Особенностью квантовых измерений явля-

ется их необратимость, что коренным образом отличает квантовые вычисления от классических.

Пример 5.2. Оператор инверсии X (NOT). Предположим, перед нами стоит задача перевести состояние $|0\rangle$ в $|1\rangle$ или наоборот, то есть осуществить операцию **инверсии**.

Решение. Задачу можно решать двумя способами.

Способ 1. С использованием матричного формализма. Любое действие над одним кубитом можно представить в виде унитарной матрицы 2×2 . В данном случае, так как мы пока не знаем, как выглядит наша матрица, записываем её в общем виде:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

Запишем её действие на базисные векторы $|0\rangle$ и $|1\rangle$:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Выполнив умножение, получаем: $a = 0$; $c = 1$; $b = 1$; $d = 0$. Таким образом, матрица, осуществляющая инверсию, имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

Способ 2. С использованием дираковского формализма. При решении данным способом необходимо ориентироваться на свойства скалярных произведений (5.5). Учитывая, что $\langle 0|0\rangle = 1$ и, поэтому $|1\rangle\langle 0|0\rangle = |1\rangle$ и $|1\rangle\langle 0|1\rangle = 0$. Аналогично, так как $\langle 1|1\rangle = 1$, то $|0\rangle\langle 1|1\rangle = |0\rangle$ и $|0\rangle\langle 1|0\rangle = 0$. Объединяя результаты, получим:

$$(|1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|)|0\rangle = |1\rangle;$$

$$(|1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|)|1\rangle = |0\rangle.$$

Итак, в дираковских обозначениях оператор инверсии имеет вид:

$$|1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|. \quad (5.11)$$

Переход от матричного формализма к дираковскому. Составим таблицу, в которой каждый столбец «нумеруется» соответствующим базисным «кет-вектором», а каждая строка – соответствующим «бра-вектором»; элемент a_{ij} – соответствующий элемент матрицы оператора.

Таблица 5.2

	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$
$\langle 0 $	0	1
$\langle 1 $	1	0

И, далее, оператор записывается в виде суммы произведений каждого элемента матрицы на оператор $|i\rangle\langle j|$. Убедитесь самостоятельно, что матрице (5.10) действительно соответствует оператор в виде (5.11).

Задание 5.7. Покажите, что оператор X не меняет состояний повёрнутого на 45° базиса $|0'\rangle$ и $|1'\rangle$, определённых согласно (5.7).

Пример 5.3. Оператор Адамара (H).² Данный оператор переводит состояния базиса $(|0\rangle, |1\rangle)$ в $(|0'\rangle, |1'\rangle)$, то есть, можно сказать, «поворачивает базис» на 45° . У данной операции нет аналогов в классических вычислительных схемах. Получается, что квантовый объект переводится из базисного состояния в суперпозицию. Получим вид этого оператора, например, в матричной форме. Итак, оператор Адамара³, по определению, действует по следующему правилу:

$$|0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle); \quad (5.12)$$

$$|1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \quad (5.13)$$

²Не путать с оператором Гамильтона!

³Назван в честь Жака Адамара (фр. *Jacques Salomon Hadamard*) (1865 – 1963) – французского математика и механика.

Запишем действие оператора на базисные векторы $|0\rangle$ и $|1\rangle$ в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Проведя умножение, получаем: $a = c = b = -d = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Таким образом, матрица, соответствующая оператору Адамара, имеет вид:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

Задание 5.8. Получите выражение для оператора Адамара в дираковских обозначениях.

Задание 5.9. Рассмотрите оператор Z (см. таблицу 5.1). Укажите, как он действует, получите его выражение в матричном виде и в дираковских обозначениях.

Эквивалентные схемы. В сложных вычислительных схемах над кубитом производится целый ряд операций. В связи с этим важным бывает получение эквивалентной схемы. Можно привести аналогию из электричества. Вспомните, сложную схему сопротивлений можно заменить на эквивалентную. В случае квантовых вычислений для построения эквивалентной схемы (если таковая существует) широко используется матричный метод. Рассмотрим несколько примеров.

Пример 5.4. Двукратное применение оператора Адамара. Определим, как преобразуется кубит $|\Psi\rangle$ под действием двукратного применения элемента Адамара:

$$|\psi\rangle \quad \text{---} \boxed{H} \text{---} \boxed{H} \text{---} \quad |\psi'\rangle$$

Решение.

Как показано выше, в матричном представлении элемент Адамара описывается матрицей

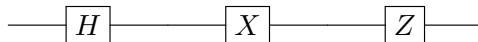
$$M_H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Вычислим матрицу, соответствующую двукратному применению элемента Адамара как матричное произведение (см. формулу (5.9)):

$$M_H M_H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.16)$$

Получена единичная матрица, следовательно, двукратное применение элемента Адамара возвращает кубит в его исходное состояние. Таким образом, схема с двумя последовательными гейтами Адамара эквивалентна тождественному преобразованию (то есть над кубитом в итоге никаких действий не производится).

Пример 5.5. Рассмотрим подход к вычислению эквивалентной матрицы для схемы, представленной на рисунке ниже.



Решение. На входе есть некое однокубитовое состояние $|\Psi\rangle$. Определение того, как работает схема, означает:

- 1) знание того, что будет на выходе схемы при любом входном состоянии квантовой системы;
- 2) построение эквивалентной матрицы, соответствующей итоговому последовательному действию всех матриц.

Мы рассмотрим два способа решения данной задачи. Изобразим схему более подробно (рис. 5.2).

Способ 1. После действия оператора Адамара получается первое промежуточное состояние $|\Psi_1\rangle$.

После прохождения оператора NOT получается второе промежуточное состояние $|\Psi_2\rangle$.

Пусть на входе $|0\rangle$. Тогда после прохождения оператора Адамара получим $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$. После прохождения через оператор NOT (X на рисунке) ничего не меняется, ведь оператор NOT только меняет $|0\rangle$ на $|1\rangle$ и наоборот, и в итоге мы получаем то же самое состояние (ведь от перемены мест слагаемых сумма не меняется). Далее, после прохождения Z , с $|0\rangle$ ничего не происходит, а вот перед $|1\rangle$ появляется «-». Таким образом, на выходе

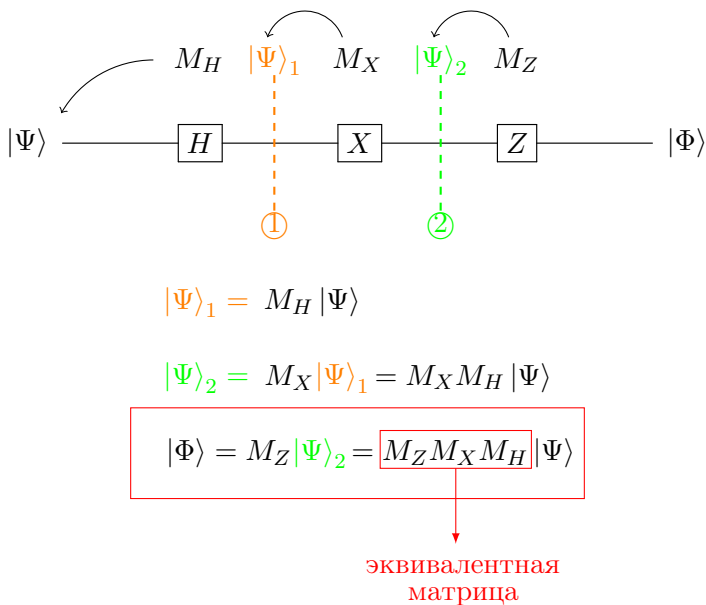


Рис. 5.2. Схема к Примеру 5.5.

получим: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. Аналогичный анализ с входным $|1\rangle$ даёт на выходе $\frac{1}{\sqrt{2}}(-|0\rangle - |1\rangle)$.

Если эти состояния пойдут дальше на другие узлы, то важно оставлять ответ именно в таком виде. Если же это полная схема, то знак (фаза) не имеют значение.

Как теперь записать эквивалентную данным преобразованиям матрицу исходя из результатов, полученных данным способом? Выпишем результаты действия эквивалентной матрицы на каждое из значений:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Здесь два матричных уравнения, из которых можно получить че-

тыре линейных уравнения с четырьмя неизвестными. Решая систему, получаем:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}; \quad b = -\frac{1}{\sqrt{2}}; \quad c = -\frac{1}{\sqrt{2}}; \quad d = -\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Способ 2. Изначально можно работать с использованием матричного метода. Суть этого метода можно понять, посмотрев на подписи внизу рисунка 5.2. Получение каждого следующего вектора состояния происходит умножением матрицы, соответствующей оператору, на текущий вектор состояния.

Пусть у нас на входе состояние $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$.

1. Действием оператора Адамара (условно на рисунке обозначен M_H) получаем первое из промежуточных состояний:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a+b \\ a-b \end{pmatrix}.$$

2. Действием оператора X (на рисунке обозначен условно M_X) получаем следующее промежуточное состояние (на рисунке $|\Psi_2\rangle$):

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a+b \\ a-b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a-b \\ a+b \end{pmatrix}.$$

3. Действием оператора Z (M_Z на рисунке) получаем окончательно:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a-b \\ a+b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a-b \\ -a-b \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} b-a \\ a+b \end{pmatrix}.$$

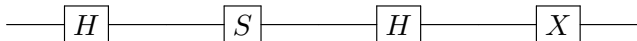
Эквивалентную матрицу можно получить, вычислив произведение матриц, но в обратном порядке:

$$M_{eq} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Как мы видим получен тот же результат, что и в случае решения первым способом.

Пример 5.6. Вычислите результат действия квантовой схемы



на кубит, находящийся первоначально в состоянии $|0\rangle$.

Решение.

Состояние кубита $|0\rangle$ описывается матрицей $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Принимая во внимание матричное представление квантовых элементов H , S и X из табл. 5.1, получим:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1-i}{2} \\ \frac{1+i}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Таким образом в результате действия квантовой схемы на кубит, находящийся в состоянии $|\Psi\rangle = |0\rangle$, он перейдет в состояние

$$|\Psi'\rangle = \frac{1-i}{2}|0\rangle + \frac{1+i}{2}|1\rangle.$$

Задания для самостоятельного решения

Задание 5.10. Вычислите результат действия квантовой схемы

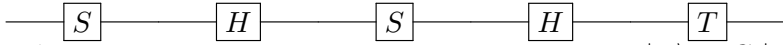


на кубит, находящийся первоначально в состоянии $|1\rangle$.

Ответ: в результате действия квантовой схемы на кубит, находящийся в состоянии $|\Psi\rangle = |1\rangle$, он перейдет в состояние

$$|\Psi'\rangle = \left(-\frac{i}{\sqrt{2}}\right)|0\rangle - \left(\frac{1-i}{2}\right)|1\rangle.$$

Задание 5.11. Вычислите результат действия квантовой схемы



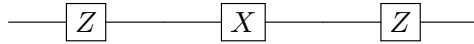
на кубит, находящийся первоначально в состоянии $|\Psi\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$, где $C_0, C_1 \in \mathbb{C}$.

Ответ: кубит, находящийся в состоянии $|\Psi\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$, перейдет в состояние

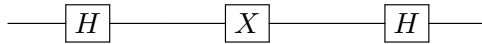
$$|\Psi'\rangle = \left(\frac{1}{2}(1+i)C_0 + \frac{1}{\sqrt{2}}C_1\right)|0\rangle + \left(\frac{1}{2}(1+i)C_0 - \frac{1}{\sqrt{2}}C_1\right)|1\rangle$$

Задание 5.12. Составьте эквивалентную матрицу для схемы:

а)



б)



5.1.4 Система из двух кубитов

Базисные состояния

Пусть теперь мы имеем дело с системой из двух кубитов. Назовём один из них А, а другой В⁴. Если рассматривать двухкубитовую систему как целое (АВ), то для неё возможны четыре базисных состояния (рис.5.3). Соответствующие векторы-столбцы, отвечающие каждому из этих состояний:

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.17)$$

⁴Здесь есть одна тонкость. Существуют квантовые системы (фермионные), в которых кубиты невозможно различить, и поэтому мы даже не можем их занумеровать. Для такой системы на вектор состояния накладываются определённые ограничения. Рассмотрение данного вопроса мы опустим и далее будем по умолчанию считать, что наши кубиты различимы, а это означает, что существует различие в составлении базиса для системы АВ и ВА.

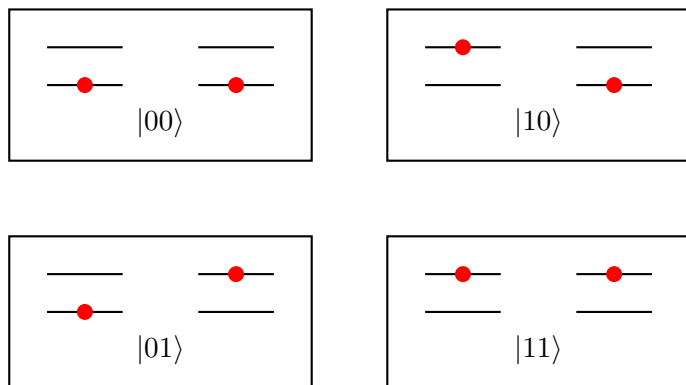


Рис. 5.3. Иллюстрация базисных состояний двухкубитовой системы. В качестве кубитов выступают двухуровневые атомы.

Произвольный вектор состояния двухкубитовой системы будет описываться вектором-столбцом с определёнными координатами. Например, для вектора состояния

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle \quad (5.18)$$

В случае, когда мы имеем дело с многокубитовой системой, часто все нули и единицы не пишут, а нумеруют каждый вектор состояния индексом от 0 до $2^N - 1$ (N – число кубитов), указывая, в дираковских обозначениях внизу число N . Так, для базисных состояний двухкубитовой системы используют также следующие обозначения:

$$|0\rangle_2 \equiv |00\rangle; |1\rangle_2 \equiv |01\rangle; |2\rangle_2 \equiv |10\rangle; |3\rangle_2 \equiv |11\rangle.$$

Задание 5.13. Проверьте ортогональность любых из двух базисных векторов двухкубитовой системы.

Прямое произведение

При рассмотрении двухкубитовой системы может возникнуть вопрос: если известно состояние каждого кубита, то как математически записать состояние системы?

Для этого применяют операцию **прямого произведения** (или его ещё называют **тензорным произведением**) матриц. Данная операция обозначается \otimes и предполагает перемножение каждого элемента одной матрицы на каждый элемент другого.

Таким образом, если матрица размером $(m \times n)$ тензорно умножается на матрицу $(k \times l)$, то получится матрица размером $(mk \times nl)$.

Пример 5.7. Пусть кубит А находится в состоянии $|0\rangle_A$, а кубит В – в состоянии $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)_B$ (отметим, что это состояние уже нельзя изобразить так, как это сделано на рис.5.3).

Состоянию $|0\rangle_A$ будет соответствовать вектор-столбец $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_A$, а состоянию $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ – столбец $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}_B$. При прямом перемножении матрицы (1×2) на матрицу (1×2) получают матрицу размером (1×4) . При этом при выполнении умножения сначала записывают произведение элемента первой строки вектора-столбца кубита А на оба элемента вектора-столбца кубита В, а затем уже произведение элемента второй строки:

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_A \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}_B = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_{AB}.$$

Вычисление произведения в дираковских обозначениях осуществляется обычным алгебраическим путём:

$$|0\rangle_A \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)_B = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A |0\rangle_B + |0\rangle_A |1\rangle_B) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{AB} + |01\rangle_{AB})$$

Задания для самостоятельного решения

Задание 5.14. Запишите состояние двухкубитовой системы, если состояния кубитов А и В:

- 1) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ и $\frac{1}{2}(|0\rangle + \sqrt{3}|1\rangle)$;
- 2) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ и $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$;
- 3) $\frac{1}{2}(|0\rangle + \sqrt{3}|1\rangle)$ и $\frac{1}{5}(|0\rangle + 2\sqrt{6}|1\rangle)$ соответственно.

Задание 5.15*. Общий вид состояния двухкубитовой системы $|\Psi\rangle_{AB} = C_0|00\rangle + C_1|01\rangle + C_2|10\rangle + C_3|11\rangle$. Каким условиям должны удовлетворять коэффициенты C_i , чтобы данное двухкубитовое состояние можно было представить в виде тензорного произведения однокубитовых векторов состояний.

Матрица (оператор) плотности. Чистые и смешанные состояния

Система двух кубитов может находиться в произвольном состоянии, задаваемом суперпозицией базисных состояний, например:

$$|\Psi\rangle_{AB} = a|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + b|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B. \quad (5.19)$$

Допустим мы имеем возможность проводить измерения только с одним из кубитов, скажем А.

Итак, мы измеряем кубит А, проецируя его на одно из состояний $|0\rangle_A$ или $|1\rangle_A$. Что получится в результате? С вероятностью $|a|^2$ мы получим результат $|0\rangle_A$, при этом система перейдёт в состояние $|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B$, с вероятностью $|b|^2$ мы получим $|1\rangle_A$, но при этом система перейдёт в состояние $|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B$.

Если мы сразу после измерения на кубите А могли бы провести измерение над кубитом В, то получили бы вполне определённое состояние. Так, если результат измерения $|0\rangle_A$, то измерение на В даст $|0\rangle_B$ и аналогично для $|1\rangle_A$. Если после измерения состояния одного кубита измерение на втором даёт гарантированный

результат, то говорят, что в состоянии $|\Psi\rangle_{AB}$ кубиты А и В **коррелированы** (или, **запутаны**). В англоязычной литературе такие состояния называются (**entangled states**).

Предыдущее действие касалось только задачи определения состояния кубита А. Допустим теперь мы хотим измерить значение какой-либо величины у кубита А. Что мы должны сделать? Подействовать оператором этой величины. Но, так как мы будем действовать при этом только на кубит А обозначим этот оператор M_A . С кубитом В при этом ничего не происходит. Для того, чтобы показать, какое действие будет в этом случае производиться над системой из двух кубитов, мы должны составить тензорное произведение операторов, действующих на отдельные кубиты: $M_A \otimes I_B$. Эта запись и отражает тот факт, что мы действуем только на кубит А, а второй оставляем неизменным. Каким будет ожидаемое значение величины М у кубита А, если система находится в состоянии $|\Psi\rangle_{AB}$? С подобными вычислениями мы уже знакомы:

$$\begin{aligned} {}_{AB}\langle\Psi|M_A \otimes I_B|\Psi\rangle_{AB} &= \\ &= (a^*\langle 00| + b^*\langle 11|)M_A \otimes I_B(a|00\rangle + b|11\rangle) = \\ &= |a|^2\langle 0|M_A|0\rangle(\langle 0|0\rangle) + |b|^2\langle 1|M_A|1\rangle(\langle 1|1\rangle) = \\ &= |a|^2\langle 0|M_A|0\rangle + |b|^2\langle 1|M_A|1\rangle. \end{aligned}$$

Напомним, что конструкция $\langle n|\hat{M}|n\rangle$ называется матричным элементом оператора \hat{M} и обозначается M_{nn} . Таким образом, результат можно переписать в виде:

$${}_{AB}\langle\Psi|M_A \otimes I_B|\Psi\rangle_{AB} = |a|^2 \cdot M_{A,00} + |b|^2 \cdot M_{A,11}.$$

Мы видим, что диагональный элемент матрицы M_{nn} умножается на вероятность обнаружить кубит А в состоянии $|n\rangle_A$. Всё выглядит так, как будто мы перемножили две матрицы

$$\begin{pmatrix} M_{A,00} & M_{A,01} \\ M_{A,10} & M_{A,11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |a|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |a|^2 M_{A,00} & 0 \\ 0 & |b|^2 M_{A,11} \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

и нашли сумму диагональных элементов. . . Тогда можно записать окончательно результат в виде:

$$\langle M_A \rangle = {}_{AB} \langle \Psi | M_A \otimes I_B | \Psi \rangle_{AB} = \text{tr}(M_A \rho_A),$$

здесь $\langle M_A \rangle$ – наблюдаемое значение величины M у кубита A ; tr – обозначение следа (шпура (*Sp*), трека) матрицы, то есть суммы диагональных элементов. Первая матрица в (5.20) – это матричное представление оператора \hat{M}_A , а ρ_A – это так называемая **матрица, или оператор, плотности** кубита A . Запишем её в дираковских обозначениях:

$$\rho_A = \begin{pmatrix} |a|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{pmatrix} \equiv |a|^2 |0\rangle_{AA} \langle 0| + |b|^2 |1\rangle_{AA} \langle 1|. \quad (5.21)$$

Оператор плотности может быть записан и для системы с произвольным числом кубитов. Давайте запишем его для нашей системы. Матрицу плотности для системы, находящейся в состоянии $|\Psi\rangle_{AB}$ составляют по правилу:

$$\rho_{AB} = |\Psi\rangle_{ABAB} \langle \Psi|. \quad (5.22)$$

Для системы, находящейся в состоянии (5.19), оператор плотности будет иметь вид:

$$\begin{aligned} (a|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + b|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B)(a^*{}_A \langle 0| \otimes_B \langle 0| + b^*{}_A \langle 1| \otimes_B \langle 1|) = \\ = |a|^2 |00\rangle_{ABAB} \langle 00| + ab^* |00\rangle_{ABAB} \langle 11| + \\ + ba^* |11\rangle_{ABAB} \langle 00| + |b|^2 |11\rangle_{ABAB} \langle 11|. \end{aligned}$$

В матричном виде:

$$\rho_{AB} = \begin{pmatrix} {}_A \langle 0|_B \langle 0| & |0\rangle_A |0\rangle_B & |0\rangle_A |1\rangle_B & |1\rangle_A |0\rangle_B & |1\rangle_A |1\rangle_B \\ {}_A \langle 0|_B \langle 1| & |a|^2 & 0 & 0 & a^* b \\ {}_A \langle 1|_B \langle 0| & 0 & 0 & 0 & 0 \\ {}_A \langle 1|_B \langle 1| & ab^* & 0 & 0 & |b|^2 \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

Чтобы получить матрицу плотности подсистемы A , необходимо взять так называемый «частичный след» по состояниям B : для этого производится *свёртка* матрицы ρ_A , а именно, объединяются столбцы, имеющие одинаковое значение по состояниям кубита B :

$$\rho_A = \text{tr}_B \rho_{AB} = {}_B\langle 0 | \rho_{AB} | 0 \rangle_B + {}_B\langle 1 | \rho_{AB} | 1 \rangle_B. \quad (5.24)$$

Задание 5.16. Вычислите частичный след матрицы (5.23) согласно (5.24). Сравните полученный результат с (5.21).

Важно:

1. Если у нас есть две подсистемы A и B (необязательно однокубитовые), то составление матрицы плотности для них аналогично, размер этой матрицы может быть другим. Например, у вас система из трёх кубитов. Её можно разбить на две подсистемы: например, первые два кубита + третий. Какой размер будет у матрицы плотности?

Базисных состояний у первой подсистемы (два кубита) четыре.

Базисных состояний у второй подсистемы (один кубит) два.

Таким образом, получаем 8 различных базисных состояний для трёхкубитовой системы (у трёхкубитовой системы $2^3 = 8$ базисных состояний), следовательно, матрица плотности такой системы будет иметь размер 8×8 .

Задание 5.17. Постройте оператор плотности системы из трёх кубитов, находящейся в состоянии

$$|\Psi\rangle_{ABC} = a|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B \otimes |1\rangle_C + b|0\rangle_A \otimes |1\rangle_B \otimes |1\rangle_C + c|1\rangle_A \otimes |0\rangle_B \otimes |1\rangle_C.$$

Вы можете попробовать разбить эту систему на две подсистемы (AB - C или A - BC или даже B - AC) и построить три матрицы плотности. Посмотрите, будут ли они одинаковыми или же будут отличаться.

2. След **любой** матрицы плотности равен единице. Это условие – аналог условия нормировки вектора состояния.

3. Матрица плотности самосопряжённая: если транспонировать матрицу и заменить все её элементы на комплексно сопряжённые, то получится та же самая матрица. Обозначается это следующим образом: $\rho^\dagger = \rho$.

4. И, наконец, может возникнуть вопрос: а почему мы вообще вводим какую-то матрицу плотности, если у нас есть вектор состояния? Вспомним наше состояние изначальное для двухкубитовой системы (5.19): $|\Psi\rangle_{AB} = a|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + b|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B$. Мы задаём его вектором состояния.

А теперь вопрос: а каков вектор состояния кубита А, если вся система описывается указанным вектором? И вот тут нас ждёт разочарование: мы не напишем вектора состояния отдельно для кубита А. . . То же самое можно сказать и про кубит В. Что же получается? Мы имеем две отдельные квантовые системы, для каждой из которых волновой функции просто не существует. . . Итак, выясняется важное обстоятельство: описание состояния квантовой системы с помощью волновой функции не всегда возможно. Как в этом случае поступить? Приходится записывать матрицу плотности и работать с ней.

Итак:

1) в случае, когда мы можем записать для квантовой системы волновую функцию, говорят, что система находится в *чистом состоянии*;

2) в случае, когда мы не можем записать для квантовой системы волновую функцию, говорят, что система находится в *смешанном состоянии*.

Что в нашем примере? Вся система, состоящая из двух кубитов, описывается какой-то волновой функцией, значит, система в целом находится в чистом состоянии, но при этом, каждая из подсистем находится в смешанном состоянии, потому что мы не можем указать для состояний отдельных кубитов волновых функций.

Когда имеет место такая ситуация, как описано выше: вся система в чистом состоянии, а каждая, или какие-то из подсистем (у

вас может же быть многочастичная система) находятся в смешанном состоянии, говорят, что состояние всей системы *запутано*.

К чему приводит запутанность и откуда она берётся?

1. Запутанными состояния становятся при взаимодействии подсистем.

2. Мы вроде бы всё знаем о нашей системе в целом, но ничего не знаем о состоянии отдельных подсистем. Они находятся в «связке»: результат измерения на одной из подсистем приводит к потере информации о второй подсистеме. Чтобы убедиться в этом, вернитесь к нашим самым первым рассуждениям. В этом случае говорят, что после измерения происходит коллапс (или редукция) состояния подсистемы А. Часть ценной информации просто теряется безвозвратно. Тогда может возникнуть очевидный вопрос: а мы вообще что-нибудь знаем? Ну действительно, существует какая-то квантовая система, мы проводим измерения – получаем какой-то результат. . . но сколько при этом мы потеряли информации?

Ответ такой: да, мы не обладаем информацией об отдельных подсистемах, но состояние всей системы чистое, и мы можем с ним работать, по крайней мере, использовать скажем, в квантовых вычислениях. Таким образом, возникает парадоксальная ситуация: квантовый мир не позволяет нам узнать об отдельных своих составляющих, но, разрешая работать с целой системой, существенно ускоряет вычислительные процедуры за счёт квантового параллелизма.

Входным состоянием является чистое состояние многокубитовой системы – выходным состоянием также является чистое состояние той же системы – что происходит с каждой из её частей? – вопрос, но для практического использования не такой уж важный. С точки зрения же познания свойств Вселенной вопрос открыт до сих пор.

Вернёмся к обсуждению матрицы плотности. Как понять, является ли состояние рассматриваемого квантового объекта чистым или смешанным? Существуют различные способы провер-

ки. Мы рассмотрим один из них. Если для матрицы плотности квантовой системы выполняется условие $\rho^2 = \rho$, то последняя находится в чистом состоянии. В противном случае состояние системы смешанное.

Задания для самостоятельного решения

Задание 5.18. Проверьте указанное свойство для матриц (5.23) и (5.21). Сделайте вывод.

Задание 5.19. Запишите две любых волновых функции для однокубитовой системы, составьте матрицу плотности и проверьте условие $\rho^2 = \rho$.

Состояния Белла

Помимо базиса (5.17) широко используется базис состояний Белла⁵:

$$|00'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle); |01'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle); \quad (5.25)$$

$$|10'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle); |11'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle). \quad (5.26)$$

Задания для самостоятельного решения

Задание 5.20. Запишите матричный вид состояний (5.25) в базисе (5.17).

Задание 5.21. Покажите, что векторы (5.25) образуют ортонормированный базис.

Задание 5.22. Покажите, что каждый из векторов базиса Белла описывает запутанное состояние системы из двух кубитов.

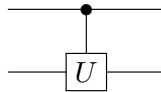
Задание 5.23. Определите «координаты» вектора $|00\rangle$ в базисе (5.25).

⁵ Джон Стюарт Белл (англ. *John Stewart Bell*) (1928 – 1990) – североирландский физик-теоретик.

Операции над двухкубитовыми системами

Выше были рассмотрены операции на одном кубите. Когда речь идёт о системе двух кубитов, в схеме уже два входа (верхний/нижний кубиты) и операции у нас двухкубитовые. В этом случае матрица преобразований будет уже иметь размер 4×4 .

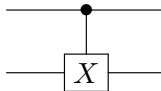
Контролируемое U . В случае с двухкубитовой системой возможна операция, в которой оба кубита задействованы одновременно, а именно действие над одним из кубитов (*контролируемым*) зависит от состояния другого кубита (*контролирующего*). Такие операции называют «контролируемыми». Обозначение на схеме:



В данном случае контролирующим кубитом является верхний. Правило, по которому действует данный гейт:

- 1) Если состояние контролирующего кубита $|0\rangle$, то состояние контролируемого кубита остаётся неизменным;
- 2) Если состояние контролирующего кубита $|1\rangle$, то состояние контролируемого кубита изменяется в соответствии с правилом действия гейта U .

Рассмотрим пример часто используемого гейта CNOT (*Controlled NOT*):



Как выглядит этот оператор в матричном виде? Для того чтобы понять это, можно выписать законы преобразования каждого базисного вектора:

$$CNOT|00\rangle = |00\rangle;$$

$$CNOT|01\rangle = |01\rangle;$$

$$CNOT|10\rangle = |11\rangle;$$

$$CNOT|11\rangle = |10\rangle.$$

Или, в матричном виде:

$$\begin{aligned} CNOT \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad CNOT \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \\ CNOT \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad CNOT \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Теперь, чтобы записать матричное представление оператора достаточно выписать подряд столбцы, отвечающие результатам действия оператора на каждый из базисных векторов состояния:

$$CNOT \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

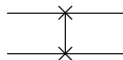
Или, можно написать эту матрицу, указав, как именно действует на «верхний» и «нижний» кубит схема:

$$CNOT \equiv \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & X \end{pmatrix}$$

Задание 5.24 Рассмотрите оператор CZ . По какому правилу он действует, какая матрица соответствует данному оператору?

Задание 5.25. Рассмотрите оператор $CNOT$, в котором нижний кубит является контролирующим. Получите его матричное представление.

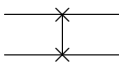
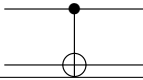
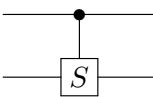
Задание 5.26. Гейт перестановки (обмена) P . Ещё один пример гейта, действующего одновременно на два кубита:



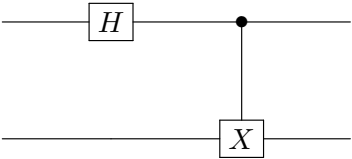
Его действие приводит к «обмену состояний» у кубитов. Получите его матричное представление.

Основные операции над двухкубитовыми системами, затрагивающие оба кубита одновременно, представлены в таблице 5.3.

Таблица 5.3
Операции над двумя кубитами

Название	Обозначение	Матрица
Обмен		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
Управляемый NOT		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$
Управляемый фазовый элемент		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{bmatrix}$

Пример 5.8. Рассмотрим схему:



Укажем, к чему приводит последовательное действие двух данных операторов на базисные состояния двухкубитовой системы.

Если на входе состояние двухкубитовой системы $|00\rangle$, то, после прохождения оператора Адамара верхним кубитом состояние системы станет $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle)$, а после прохождения CNOT:

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$. В матричном виде:

$$M \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Мы получили запутанное состояние – одно из состояний базиса Белла.

Проводя аналогичные рассуждения для трёх остальных базисных состояний (проведите вычисления самостоятельно), получим:

$$M \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad M \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}; \quad M \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

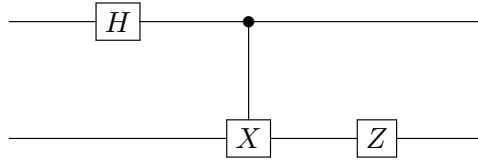
Поступая так же, как и в случае с получением матрицы CNOT, можем записать эквивалентную матрицу для указанного участка схемы:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Можно заметить, что действие данного участка схемы приводит к переходу от базиса (2.17) к базису Белла (5.25). Также получается, что если изначально на входе состояние двухкубитовой системы незапутано, то после прохождения схемы оно оказывается запутанным.

Задание 5.27. Покажите, что при действии на состояния Белла этого участка схемы на выходе получаются состояния базиса (2.17).

Пример 5.9. Рассмотрим подход к вычислению эквивалентной матрицы для схемы, представленной на рисунке ниже.



Необходимо определить, как работает эта схема и, если есть возможность, изобразить эквивалентную схему.

Решение. Приведём поясняющий рисунок (5.4).

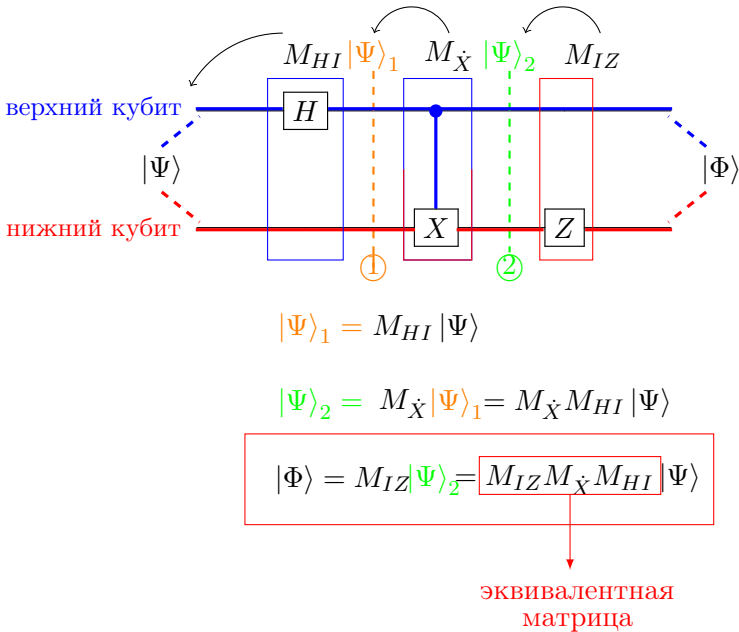


Рис. 5.4. Схема к Примеру 5.9.

Для начала нужно обсудить вот какой вопрос. Все матрицы здесь уже будут действовать в пространстве двухкубитовых векторов, а это означает что они будут иметь размер 4×4 . Как записать эту матрицу, если у нас есть, например, элементы, действующие, как видно и на схеме, только на один из кубитов системы?

Так же, как и в случае записи состояния двухкубитовой системы на основе состояний отдельных кубитов (если это возможно), аналогично записывается матрица оператора. А именно, состояние двухкубитовой системы, если состояния отдельных кубитов известны, строятся как тензорное произведение отдельных кубитов. То же самое и с операторами. Если с одним из кубитов в схеме ничего не происходит, это эквивалентно действию единичной матрицы.

Первое действие, совершаемое над системой (условно обозначено на рисунке M_{HI}), сводится к действию на верхний кубит оператора Адамара, при этом состояние нижнего кубита неизменно. Это означает, что матрица, соответствующая итоговому действию на двухкубитовое состояние будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} M_{HI} &= H \otimes I = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & I \\ I & -I \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Далее, оператор $CNOT$ действует на двухкубитовое состояние в целом. Вид этого оператора:

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

Наконец, последняя матрица:

$$\begin{aligned} M_{IZ} &= I \otimes Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Перемножаем полученные матрицы в обратном порядке (если судить по схеме):

$$\begin{aligned}
 M_{eq} &= M_{IZ} M_X M_{HI} = \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Зная данную матрицу, мы можем определить, что будет на выходе после прохождения всех логических элементов для любого входного состояния.

Пусть, например, на верхнем кубите у нас на входе $|0\rangle$, а на нижнем $|1\rangle$. Проанализируем, что будет происходить на каждом этапе, а потом удостоверимся, что матричным методом мы получим тоже самое.

Входное состояние двухкубитовой системы $|01\rangle$. Теперь:

- после прохождения оператора Адамара на верхнем кубите получаем первое промежуточное состояние двухкубитовой системы: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |11\rangle)$;

- после прохождения $CNOT$: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$;

- после прохождения Z на нижнем кубите:

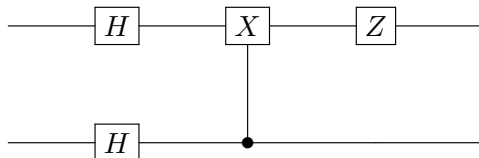
$$\frac{1}{\sqrt{2}}(-|01\rangle + |10\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle)$$

Проверим:

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Для остальных базисных состояний проверьте действие матрицы самостоятельно.

Пример 5.10. Третий пример рассмотрим кратко. Необходимо вычислить эквивалентную матрицу для схемы, представленной на рисунке ниже.



Решение. Приведём поясняющий рисунок (рис. 5.5).

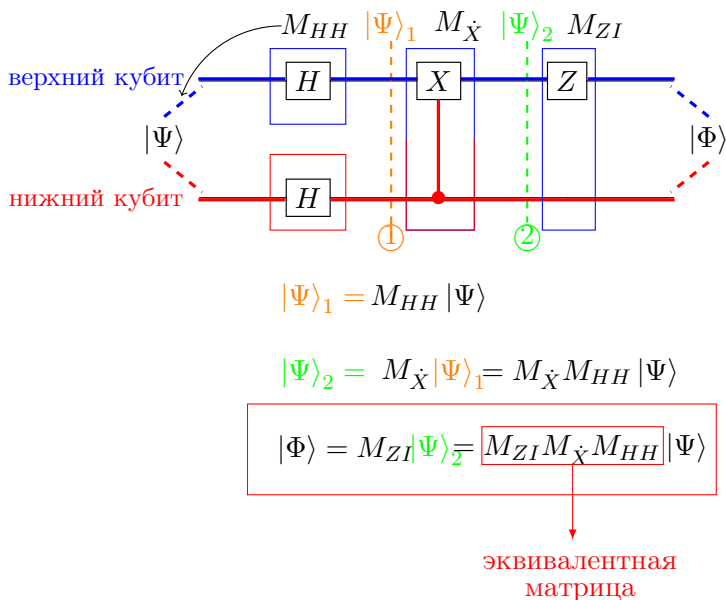


Рис. 5.5. Схема к Примеру 5.10.

В данной схеме есть элемент, с которым предлагалось выполнить упражнение перед примерами. Заметьте, что оператор

$CNOT$ здесь как «перевёрнутый», то есть нижний кубит является здесь контролирующим. Посмотрим, какая матрица соответствует этому оператору. Данный оператор действует следующим образом:

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle; |01\rangle \rightarrow |11\rangle; |10\rangle \rightarrow |10\rangle; |11\rangle \rightarrow |10\rangle.$$

Чтобы понять, как выглядит оператор, необходимо записать результирующие векторы состояния по столбцам подряд. Для нашего оператора это будет:

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

Записываем матрицы каждого оператора:

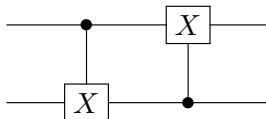
$$M_{HH} = H \otimes H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

$$M_{ZI} = Z \otimes I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Вычисляем эквивалентную матрицу:

$$\begin{aligned} M_{eq} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Пример 5.11. Найдем матричное представление следующей квантовой схемы:



Решение. Квантовая схема состоит из двух элементов $CNOT$, но только сначала контролирующим является верхний кубит, а затем – нижний.

Матрица элемента $CNOT$ имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

С учетом матричного представления $CNOT$ вычислим, каким образом произвольное состояние

$$|\Psi\rangle = (a_1|0\rangle + b_1|1\rangle)(a_2|0\rangle + b_2|1\rangle)$$

изменится после действия первого $CNOT$:

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ b_2 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (5.29)$$

Далее, обратим внимание, что следующий элемент $CNOT$ принимает входные состояния в порядке, обратном по отношению к первому элементу. В предыдущем примере мы уже данную операцию подробно рассмотрели. Таким образом, очередной этап эволюции квантовой системы описывается матрицей

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

Выполняем матричные вычисления:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ b_2 \\ a_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ b_2 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ b_1 \end{pmatrix}. \quad (5.31)$$

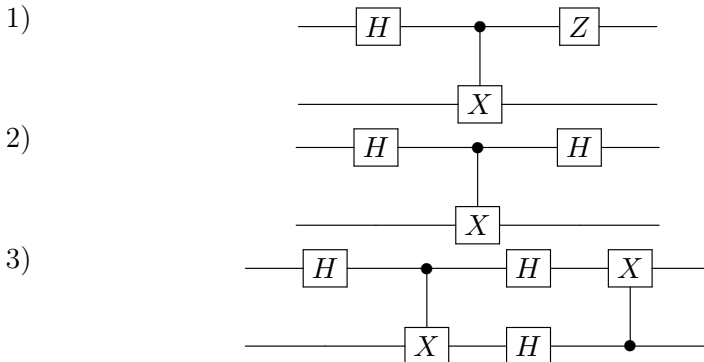
В результате, исходное состояние $|\Psi\rangle = [a_1, b_1, a_2, b_2]^T$ перейдет в $[a_1, a_2, b_2, b_1]^T$. Матричное представление анализируемой схемы можно получить, перемножив две матрицы, но (!) в обратном порядке:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.32)$$

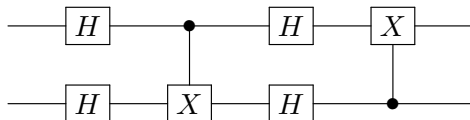
Задачи для самостоятельного решения

Задание 5.28. Подумайте, в каком случае порядок перемножения матриц: «слева-направо» или «справа-налево» оказывается неважным? Придумайте одно- или двухкубитовую схему и проверьте себя.

1. Для каждой из приведённых ниже схем получите эквивалентные матрицы. Там, где это возможно, нарисуйте эквивалентную схему:

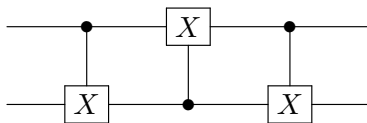


Задание 5.29. Напишите матрицу преобразований, соответствующую данной схеме:



Что будет на выходе этой схемы, если состояние двухкубитовой системы на входе: а) $|00\rangle$; б) $|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$?

Задание 5.30. Покажите, что квантовая схема



переводит состояние $|\psi_1\psi_2\rangle$ в состояние $|\psi_2\psi_1\rangle$, то есть её действие эквивалентно гейту P .

5.2 Простейшие квантовые алгоритмы

Как мы уже видели в случае двухкубитовой системы общее число базисных состояний равно $2^2 = 4$. В общем случае квантовое состояние N кубитов можно изобразить вектором в 2^N -мерном пространстве.

В качестве ортонормированного базиса в этом пространстве можно выбрать состояния, в которых каждый кубит имеет определённое значение $|0\rangle$ или $|1\rangle$. Их можно обозначать двоичными последовательностями вида $|100\dots 01\rangle$.

Произвольный нормированный (то есть для которого выполняется условие нормировки) вектор разлагается по данному базису:

$$\sum_{x=0}^{2^N-1} a_x |x\rangle,$$

где каждой двоичной последовательности сопоставляется номер, равный соответствующему ей числу в двоичной системе счисления и изменяющийся в пределах от 0 до $2^N - 1$. Например, для

системы двух кубитов x пробегает значения 0, 1, 2, 3. Они будут обозначать состояния двухкубитовой системы $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ соответственно.

Сумма квадратов модулей коэффициентов в разложении равна единице, а сами квадраты модулей коэффициентов $|a_x|^2$ дают вероятность того, что при измерении состояния мы получим результат $|x\rangle$.

Задание 5.32. Запишите все возможные $|x\rangle$ для трёхкубитовой системы.

Вот с такими многокубитовыми системами и оперирует *квантовый компьютер*. В общем случае его можно представить схемой:

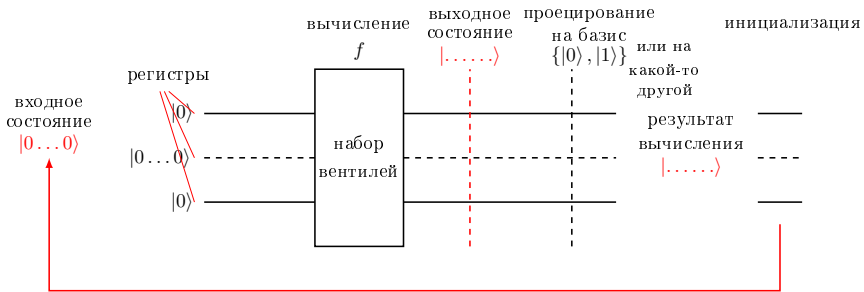


Рис. 5.6. Схема квантовых вычислений

1. В нашем распоряжении есть N -кубитовый регистр. Входное состояние системы в квантовых вычислениях обычно нулевое, то есть все кубиты в состоянии $|0\rangle$ и общее состояние $|000\dots 0\rangle$ ($x = 0$).

2. К этой системе применяется набор унитарных (обратимых) преобразований \hat{U} – набор вентиляей (на рисунке – блок вычисления функции f).

3. После прохождения всех вычислительных процедур наша квантовая система находится в некотором выходном состоянии. Обратите внимание на схему: выходное состояние – это совсем

не результат вычисления. Именно этот пункт существенным образом отличает квантовые вычисления от классических. Чтобы получить информацию о результате, мы должны «измерить» состояние, другими словами спроецировать его на некоторый N -кубитовый базис. Однако, как мы видели уже в примерах выше, данное проецирование приведёт к потере части информации, и тот результат, который мы получим, будет справедлив лишь с некоторой вероятностью. Таким образом, **реализованный квантовым компьютером алгоритм является вероятностным**. То есть мы можем выполнить одну и ту же операцию дважды и получить разные результаты. Фактически, квантовый алгоритм не даёт нам точного результата, он даёт **распределение вероятностей возможных результатов**.

Преимуществом квантового вычисления является то, что блок f работает сразу со всеми 2^N состояниями одновременно. Данное свойство квантовых вычислений называют *квантовым параллелизмом*. В связи с этим определённые трудные вычислительные задачи могут быть решены за гораздо более короткое время.

Итак, квантовый компьютер работает по каким-то другим физическим принципам в отличие от классического. Тем не менее, он не сможет сделать ничего сверх того, что может делать классический компьютер. Последний же может сколь угодно точно имитировать (моделировать) работу квантового компьютера. *Наше представление о том, что является вычислимым, не зависит от того, пользуемся мы классическим или квантовым компьютером*. Постановка задача для вычисления первична, и она не зависит от того, для какой машины мы её ставим. Один из важнейших выводов, лежащих в основе теории вычислений [8]:

Преимущество квантового компьютера не в том, КАКИЕ задачи он решает, а в том, СКОЛЬКО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ займёт решение задачи.

4. Можно задать вопрос: как же мы за один проход по схеме получим какой-то результат и как ему верить? Никак. Мы и не собираемся ему верить. Нужно конечно набрать статистику. В связи с этим последний этап – это *инициализация*. Он сводится к приготовлению начального «абсолютно нулевого» состояния. При проецировании на базис $|0\rangle, |1\rangle$ в итоге мы получаем, что какие-то кубиты уже в состоянии $|0\rangle$, а к тем, которые находятся в состоянии $|1\rangle$, применяется процедура инверсии. Далее вычисление можно повторить. Результатом с достаточно высокой вероятностью будет та же самая суперпозиция на выходе (ведь входное состояние и набор операций те же, хотя мы обязательно должны учитывать помехи и шумы), однако результат измерения может быть совершенно другим. Тем не менее, проведя несколько раз всю процедуру можно уже с помощью коррекции ошибок измерения и учёта шумов получить приемлемое решение вычислительной задачи.

Рассмотрим два важных примера.

5.2.1 Задача Дойча

В 1985 Дэвид Дойч⁶ ввёл понятие «квантового параллелизма», называя его главным преимуществом квантовых алгоритмов. Рассмотрим предлагаемую им задачу. Следуя Дойчу, представим чёрный ящик, вычисляющий функцию $f(x)$, которая преобразует один бит x в один бит $f(x)$ (то есть у нас однокубитовый регистр):

На входе один бит – действует функция f – на выходе бит.

Поясняющий пример. Элементарный пример функции $f(x)$ действующей на N -битовую комбинацию, например, инверсия. Скажем, у вас есть N -битовая комбинация на входе. Что будет на выходе? Вы все нули меняете на единицы и наоборот. . . Как записать

⁶ Дэвид Дойч (англ. *David Deutsch*) (род. в 1953 г.) – британский физик-теоретик. Один из пионеров в области квантовых вычислений.

действие этой функции? Например, для двухбитовой комбинации имеем:

$x = 0$ – это $|00\rangle$; $x = 1$ – это $|01\rangle$; $x = 2$ – это $|10\rangle$; $x = 3$ – это $|11\rangle$.

Что делает функция инверсии? Она из $|00\rangle$ делает $|11\rangle$, из $|01\rangle$ делает $|10\rangle$, из $|10\rangle$ делает $|01\rangle$ и из $|11\rangle$ делает $|00\rangle$. Это означает, что наша функция инверсии f действует по правилу:

$$f(0) = 3; f(1) = 2; f(2) = 1; f(3) = 0.$$

Таким образом, чтобы понять, что будет на выходе, необходимо знать нумерацию в N -битовой последовательности – каким номером какое состояние обозначается.

Для трёхкубитовой последовательности принята следующая нумерация:

$x = 0$ – это $|000\rangle$; $x = 1$ – это $|010\rangle$; $x = 2$ – это $|100\rangle$; $x = 3$ – это $|110\rangle$;

$x = 4$ – это $|001\rangle$; $x = 5$ – это $|011\rangle$; $x = 6$ – это $|101\rangle$; $x = 7$ – это $|111\rangle$.

Задание 5.32. Напишите правило действия функции отрицания f для трёхкубитовой системы.

Постановка задачи. Возвращаемся к задаче Дойча. У нас есть чёрный ящик, вычисляющий некую функцию, действующую на один бит и выдающую нам один бит. То есть у аргумента x только два значения 0 или 1, и, следовательно, и у функции то же только два значения.

Пусть вычисление занимает 24 часа (для примера). Это какая-то сложная вычислительная функция. . . Тем не менее, заранее известно, что если мы подадим 0, то будет либо 0 либо 1, а если подадим 1, то будет либо 1 либо 0. Если мы заранее не знаем, что у нас за функция, то необходимо будет провести минимум 2 измерения, чтобы знать правило действия. Таким образом, задача вычисления обоих значений займёт 48 часов. Нам так же достаточно было бы знать не сами значения функций, а то, выполняется ли у нас $f(0) \neq f(1)$ (в таком случае говорят, что мы имеем дело

со *сбалансированной функцией*) или $f(0) = f(1)$ (в таком случае говорят, что мы имеем дело с *постоянной функцией*). Почему это так? Ведь тогда нам будет достаточно провести одно вычисление и результат второго мы уже будем знать. Например, если вы знаете, что у нас $f(0) \neq f(1)$, то, определяя, что $f(0) = 1$, очевидно, что $f(1) = 0$. Или, если у нас $f(0) = f(1)$, то если $f(0) = 1$, то и $f(1) = 1$. Таким образом, функция будет определена.

Но данная проверка ($f(0) \neq f(1)$ или $f(0) = f(1)$) тоже займёт две операции и, как следствие, 48 часов.

Представим теперь, что у нас в ящике работает квантовый алгоритм, вычисляющий значение той же самой функции.

Первое требование, которое здесь обязательно: работа квантового компьютера обратима. К чему это приводит? К тому, что не получится работать тут с однокубитовыми системами. Придётся использовать минимум два кубита и составлять аналогичную операцию вычислительную, правда на выходе будет двухкубитовое состояние. Как будет выглядеть эта аналогичная операция?

$$U_f : |x\rangle|y\rangle \rightarrow |x\rangle|y \oplus f(x)\rangle. \quad (5.33)$$

Как мы поймём, чему равно значение функции? Если значение $f(x) = 0$, то на выходе мы будем иметь то же состояние, если же $f(x) = 1$, то состояние второго кубита инвертируется. Таким образом, если мы подаём на вход одно из состояний $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$, то понадобится два измерения так же при различных входных первого кубита, которые дадут нам ответ на вопрос – как действует функция $f(x)$.

Если чёрный ящик является квантовым компьютером, то у нас есть возможность подать на вход суперпозицию в качестве входного состояния (!) Вопрос: можно ли в этом случае сделать так, чтобы за одно измерение определить действие функции $f(x)$? Задача в такой постановке носит название **задача Дойча**.

Итак, что будет, если входное состояние нашей системы таково, что второй кубит приготовлен в виде суперпозиции $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. К чему приведёт унитарное преобразование?

Сумма по модулю два нуля и любого числа (0 или 1) – это всегда это же число, то есть

$$|0 \oplus f(x)\rangle = |f(x)\rangle.$$

Сумма по модулю два с единицей даёт нам либо 0 либо 1 в зависимости от значения функции. Причём, если $f(x) = 0$, то результатом сложения будет 1, а если $f(x) = 1$, то результатом сложения будет 0. Получаем:

1) Если $f(x) = 0$, то

$$U_f : |x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \rightarrow |x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle);$$

2) Если $f(x) = 1$, то

$$U_f : |x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \rightarrow |x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |0\rangle) = |x\rangle \frac{-1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle).$$

Обратите внимание, что значения на выходе отличаются только знаком, причём, если значение функции 0, то условно знак «+». Если значение функции 1, то условно знак «-». Как это записать в одну строчку?

$$U_f : |x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \rightarrow |x\rangle (-1)^{f(x)} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \quad (5.34)$$

Задание 5.33. Получите выходное состояние, если входное состояние второго кубита $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$.

Однако, пока задача не решена. Дело в том, что состояния, отличающиеся только фазовым множителем («+» или «-» перед скобкой между $|0\rangle$ и $|1\rangle$) физически не различимы. Посмотрим теперь, что получится, если на входе у обоих кубитов будет изначально суперпозиция. Скажем, первый кубит в $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, а второй – в $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$.

Согласно (5.34) вычисляем:

$$\begin{aligned}
 U_f &: \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \\
 &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle(-1)^{f(0)} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle(-1)^{f(1)} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \\
 &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}((-1)^{f(0)}|0\rangle + (-1)^{f(1)}|1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle).
 \end{aligned}$$

В чём преимущество здесь? Да в том, что у нас одновременно содержится информация с двумя значениями функции f . Теперь видно, что если $f(0) = f(1)$, то состояние системы изначально не изменится, а если $f(0) \neq f(1)$, то состояние первого кубита станет таким же, как и состояние второго, изменившись по сравнению с начальным на «противоположное». **Таким образом, в зависимости от того, является ли наша функция постоянной или сбалансированной, итоговое состояние первого кубита или $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ или $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$.**

Итак, **ответ на вопрос о том, является ли наша функция постоянной или сбалансированной мы получаем за ОДНО измерение.** Мы одновременно работаем и с нулевым и с первым состоянием ПАРАЛЛЕЛЬНО. Это возможно только в квантовом компьютере, и именно это является причиной выигрыша по сравнению с классическим. Собственно одновременное вычисление значений на разных состояниях суперпозиции и называется *квантовым параллелизмом*.

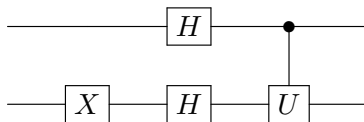
Схема, реализующая алгоритм Дойча. Исходя из вышеописанного предварительно можно указать:

- 1) схема работает с двухкубитовым регистром;
- 2) до вычисления значения функции непосредственно на вход должны поступить суперпозиции $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ и $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ на верхнем и нижнем кубитах соответственно;

3) унитарная операция U_f , которая применяется для ответа на вопрос, «как действует f », задаваемая (5.33);

4) необходимо чтобы состояние на выходе однозначно указывало нам: постоянна ли функция f или нет.

Итак, начальное состояние нашего двухкубитового регистра $|00\rangle$. Затем что-то должно произойти, чтобы получились суперпозиции, указанные в п.2. Мы знаем, что такой результат нам даст действие оператора Адамара. Единственное, на нижнем кубите должно быть на входе состояние $|1\rangle$. Для этого на нижний кубит необходимо подействовать сначала оператором инверсии (X). Далее следует унитарная операция, в которой контролирующим является верхний кубит. Таким образом, часть схемы, реализующая пп.1-3, имеет вид:

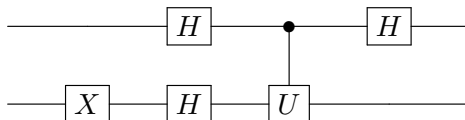


После прохождения этой части схемы промежуточная система будет находиться в состоянии (5.34).

Осталось описать действие, которое при проецировании на базис $|0\rangle, |1\rangle$ всегда будет приводить или к $|0\rangle$ или к $|1\rangle$. Чтобы понять, как именно поступить, обратим внимание на то, что у нас возможно только или $f(0) = f(1)$ или $f(0) \neq f(1)$. В первом случае в первой скобке получаем с точностью до знака $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$,

во втором с точностью до знака $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. Получается, если применить операцию Адамара к верхнему кубиту, то получится либо $|1\rangle$ либо $|0\rangle$ в зависимости от того, постоянна ли наша функция или нет.

Итак, решение задачи Дойча осуществляется действием вычислительной схемы:



Задание 5.34*. Получите эквивалентную матрицу действия данной схемы.

5.2.2 Преобразование Уолша-Адамара

В некоторых квантовых алгоритмах, действующих в многокубитовом регистре, часто изначально применяется операция Адамара ко всем (или почти всем) кубитам регистра. В связи с этим важно понять, что представляет собой состояние на выходе такой многокубитовой операции.

Интересующий нас участок изображён на рис. 5.7. В данном

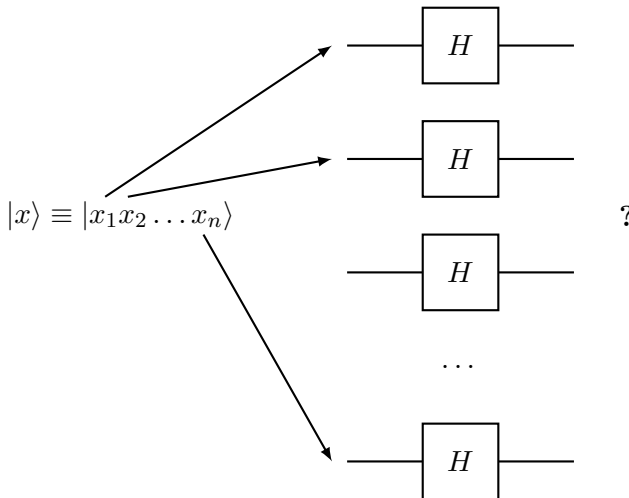


Рис. 5.7

случае рассматривается N -кубитовая система, её вектор состояния $|x\rangle$ представляет собой N нулей и единиц (в зависимости от того, что на входе).

Каждый из кубитов находится в состоянии $|0\rangle$ или $|1\rangle$, в общем случае будем обозначать это $|x_i\rangle$ (под x_i понимается одно из

базисных состояний – или $|0\rangle$ или $|1\rangle$, а не суперпозиция) Таким образом:

$$|x\rangle \equiv |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \dots \otimes |x_N\rangle.$$

Напомним, что общее число различных векторов $|x\rangle$ равно 2^N , и они нумеруются от 0 до $2^N - 1$.

1) Мы знаем, как действует оператор Адамара на один кубит:

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle); \quad H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \quad (5.35)$$

Возникает вопрос: можно ли данную процедуру записать в общем виде? Посмотрим:

1. Обозначим входное состояние кубита за $|x_1\rangle$ (проведём вычисления, например, для первого кубита), а выходное $|y_1\rangle$. При этом мы видим, что y_1 принимает как значение 0, так и 1, при любом входном состоянии. Отличие в знаке.

2. Обратим внимание на то, что знак меняется только при единице. Если мы посмотрим на (5.35), то увидим, что в трёх случаях знак «+» и в одном случае «-» (на выходе при единице, если на входе единица). Замечаем:

$$(-1)^{0 \cdot 0} = 1; \quad (-1)^{0 \cdot 1} = 1; \quad (-1)^{1 \cdot 0} = 1; \quad (-1)^{1 \cdot 1} = -1.$$

Получается, что знак определяется степенью «-1», где в показателе стоит произведение (побитовое) входного бита и соответствующего выходного. Теперь можно записать общую формулу:

$$H|x_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}((-1)^{x_1 \cdot 0}|0\rangle + (-1)^{x_1 \cdot 1}|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\{y_1=0,1\}} (-1)^{x_1 \cdot y_1} |y_1\rangle.$$

Конечно, если бы в квантовых схемах эта операция применялась только к одному или двум кубитам, то не нужно было обобщение, но, она используется и в N-кубитовых схемах, поэтому нужно получить общую формулу.

2) Прежде чем записать общую формулу запишем, что получится, если у нас двухкубитовая схема (рис. 5.8). Чтобы понять,

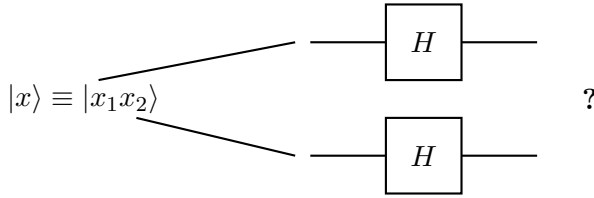


Рис. 5.8

Таблица 5.4

$ x_1x_2\rangle$	$ x_1\rangle$	$ x_2\rangle$	$\sqrt{2}H x_1\rangle$	$\sqrt{2}H x_2\rangle$	Выходное состояние
0 (00)	0	0	$ 0\rangle + 1\rangle$	$ 0\rangle + 1\rangle$	$0,5(00\rangle + 01\rangle + 10\rangle + 11\rangle)$
1 (01)	0	1	$ 0\rangle + 1\rangle$	$ 0\rangle - 1\rangle$	$0,5(00\rangle - 01\rangle + 10\rangle - 11\rangle)$
2 (10)	1	0	$ 0\rangle - 1\rangle$	$ 0\rangle + 1\rangle$	$0,5(00\rangle + 01\rangle - 10\rangle - 11\rangle)$
3 (11)	1	1	$ 0\rangle - 1\rangle$	$ 0\rangle - 1\rangle$	$0,5(00\rangle - 01\rangle - 10\rangle + 11\rangle)$

как будет выглядеть общая формула, выпишем таблицу.

Проанализируем знаки, получаемые в выходном состоянии. Заметим:

1) коэффициент при $|00\rangle$: $(-1)^{x_1 \cdot 0 + x_2 \cdot 0} = 1$ всегда, поэтому перед $|00\rangle$ во всех четырёх выходных состояниях знак «+»;

2) коэффициент при $|01\rangle$: $(-1)^{x_1 \cdot 0 + x_2 \cdot 1}$ равен «+1», если $x_2 = 0$ и «-1», если $x_2 = 1$;

3) коэффициент при $|10\rangle$: $(-1)^{x_1 \cdot 1 + x_2 \cdot 0}$ равен «+1», если $x_2 = 0$ и «-1», если $x_2 = 1$;

4) коэффициент при $|11\rangle$: $(-1)^{x_1 \cdot 1 + x_2 \cdot 1}$ равен «+1», если $x_1 + x_2 = 0 \bmod 2$ и «-1», если $x_1 + x_2 = 1 \bmod 2$.

Можно попробовать теперь записать общую формулу:

$$\begin{aligned}
 H \otimes H |x_1x_2\rangle &= \frac{1}{2} \left((-1)^{x_1 \cdot 0 + x_2 \cdot 0} |00\rangle + (-1)^{x_1 \cdot 0 + x_2 \cdot 1} |01\rangle + \right. \\
 &\quad \left. + (-1)^{x_1 \cdot 1 + x_2 \cdot 0} |10\rangle + (-1)^{x_1 \cdot 1 + x_2 \cdot 1} |11\rangle \right) = \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\{y_1, y_2=0,1\}} (-1)^{x_1 \cdot y_1 + x_2 \cdot y_2} |y_1y_2\rangle.
 \end{aligned}$$

Получаем четыре слагаемых (двойная сумма). Можно записать единую сумму для двухкубитовых состояний, обозначив $|y\rangle = |y_1 y_2\rangle$, и $xy = \sum_{i=1}^2 x_i y_i$. Отмечаем, что произведение соответствует здесь операции «И» («AND»), а сложение – прямое – то есть по модулю 2.

Так, если вы складываете $(1 \cdot 1 + 1 \cdot 1)$, то $(1 \cdot 1 + 1 \cdot 1) \bmod 2 = 0$.

Итак, можно записать:

$$H \otimes H|x\rangle = \frac{1}{2} \sum_{y=0}^3 (-1)^{xy} |y\rangle. \quad (5.36)$$

Здесь $y = 0$ соответствует $|00\rangle$; $y = 1$: $|01\rangle$; $y = 2$: $|10\rangle$; $y = 3$: $|11\rangle$.

Посмотрим пример. Пусть $|x\rangle = |10\rangle$ (базисное состояние 2). Здесь $x_1 = 1$, $x_2 = 0$. Согласно (5.36):

$$\begin{aligned} H \otimes H|10\rangle &= \frac{1}{2}((-1)^{1 \cdot 0 + 0 \cdot 0}|00\rangle + (-1)^{1 \cdot 0 + 0 \cdot 1}|01\rangle + \\ &\quad (-1)^{1 \cdot 1 + 0 \cdot 0}|10\rangle + (-1)^{1 \cdot 1 + 0 \cdot 1}|11\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle - |10\rangle - |11\rangle). \end{aligned}$$

3) Наконец, теперь можно записать общую формулу для случая, когда у нас N кубитов. Давайте посмотрим, что изменится в (5.36):

- коэффициент перед суммой. Он возникает из-за того, что в операторе Адамара присутствует коэффициент $\frac{1}{\sqrt{2}}$. В связи с этим, если у нас N кубитов, то коэффициент перед суммой будет равен $\frac{1}{(\sqrt{2})^N}$;

- в самой сумме будет $2^N - 1$ слагаемых по числу возможных векторов состояния N -кубитовой системы;

- под xy будет пониматься сумма N произведений. Если записать её по всем правилам модулярной арифметики, то будет она

выглядеть так:

$$xy = (x_1 \wedge y_1) \oplus (x_2 \wedge y_2) \oplus \dots \oplus (x_N \wedge y_N).$$

Как с этой формулой работать мы рассмотрели на примере выше.

Итак, окончательно:

$$H^{(N)}|x\rangle = \frac{1}{2^{N/2}} \sum_{y=0}^{2^N-1} (-1)^{xy} |y\rangle. \quad (5.37)$$

Сама обобщённая операция, указанная в (5.37), называется **преобразованием Уолша-Адамара**⁷.

Посмотрим, как будет выглядеть выходное состояние, если у нас N кубит, и они приведены к «абсолютно нулевому» состоянию:

$$|00 \dots 00\rangle.$$

Согласно (5.37) имеем:

$$H^{(N)}|00 \dots 00\rangle = \frac{1}{2^{N/2}} \sum_{y=0}^{2^N-1} (-1)^{0 \cdot y} |y\rangle = \frac{1}{2^{N/2}} \sum_{y=0}^{2^N-1} |y\rangle.$$

Задание 5.35. Запишите, как будет выглядеть выходное состояние после преобразования Уолша-Адамара, применённого к четырёхкубитовому состоянию $|0011\rangle$. Воспользуйтесь (5.37).

С помощью данного преобразования можно решать обобщённую задачу Дойча – уже не для двух, а для $(N + 1)$ -кубитового регистра.

⁷Джозеф Леонард Уолш (англ. *Joseph Leonard Walsh*) (1895 – 1973) – американский математик.

Литература

- [1] *Ахиезер Н. И., Глазман И. М.* Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве. — 2-е изд. — М.: Наука, 1966. — 544 с.
- [2] *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. В 3 т. Т. 1. Гипергеометрическая функция. Функции Лежандра. — М.: Наука, 1973. — 294 с.
- [3] *Борзунов С. В., Кургалин С. Д.* Алгебра и геометрия с примерами на Python. — Санкт-Петербург: Лань, 2020. — 444 стр.
- [4] *Давыдов, А. С.* Квантовая механика: учебное пособие / А. С. Давыдов. — СПб.: БХВ-Петербург, 2011. — 704 с.
- [5] *Запрягаев, С. А.* Введение в квантовые информационные системы : учебное пособие / С. А. Запрягаев. — Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2015. — (Учебник Воронежского государственного университета).
- [6] *Крюков, П. Г.* Лазеры ультракоротких импульсов и их применения / П. Г. Крюков. — М.: Интеллект, 2012. — 248 с.
- [7] *Ландау, Л. Д., Лифшиц, Е. М.* Курс теоретической физики: учебное пособие. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. — 800 с.

- [8] *Прескилл, Дж.* Квантовая информация и квантовые вычисления. Том 1/ Дж. Прескилл. — М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»; — Институт компьютерных исследований, 2008 — 464 с.
- [9] *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике. В 2 т. Т. I./ З. Флюгге. — М.: Мир, 1974. — 341 с.
- [10] *Billig, Y.* Quantum Computing for High School Students / Y. Billig. — 2018.
- [11] *Cover, T. M.* Elements of Information Theory / T. M. Cover, J. A. Thomas. — Second edition. — Wiley-Interscience, 2006.
- [12] *Nielsen, M. A.* Quantum Computation and Quantum Information / M. A. Nielsen, I. L. Chuang. — 10th anniversary edition. — Cambridge University Press, 2010.
- [13] *Steane, A.* Quantum computing / A. Steane // Reports on Progress in Physics, 1988. — Vol. 61, No. 2. — Pp. 117–173.
- [14] *Williams, C. P.* Explorations in Quantum Computing / C. P. Williams. — Second edition. — Springer, 2011. — xxii, 717 p. — (Texts in Computer Science).

Учебное издание

Стадная Надежда Павловна,
Киселёв Евгений Александрович,
Борзунов Сергей Викторович

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Учебно-методическое пособие

Издано в авторской редакции

Подписано в печать __.__.2020. Формат 60×84/16.
Усл. п. л. 9,4. Тираж 500. Заказ 276

Издательский дом ВГУ
394018 Воронеж, пл. Ленина, 10
Отпечатано в типографии Издательского дома ВГУ
394018 Воронеж, ул. Пушкинская, 3