



ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ. ЧАСТЬ 1

ПАРФЕНОВ
КОНСТАНТИН ВЛАДИМИРОВИЧ

ФИЗФАК МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН
СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ. РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ
СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ.
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ
НА [VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).

ЕСЛИ ВЫ ОБНАРУЖИЛИ
ОШИБКИ ИЛИ ОПЕЧАТКИ,
ТО СООБЩИТЕ ОБ ЭТОМ,
НАПИСАВ СООБЩЕСТВУ
[VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).



БЛАГОДАРИМ ЗА ПОДГОТОВКУ КОНСПЕКТА
СТУДЕНТКУ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ
СМОЛЬСКУЮ ДИАНУ ВЛАДИМИРОВНУ



Оглавление

Лекция 1. Квантовое поведение	7
Особенности квантовых объектов.....	7
Бомба Пенроуза.....	9
Аналог опыта Юнга для электронов.....	12
Концепция измерения.....	14
Аксиоматика канонического квантования.....	16
Аксиома 1. О пространстве состояний.....	21
Аксиома 2. Об измерениях.....	21
Лекция 2. Эрмитовы операторы	23
Эрмитово сопряжение.....	23
Свойства эрмитовых операторов.....	24
Следствия свойств эрмитовых операторов.....	29
Принцип соответствия.....	33
Аксиома 3. Аксиома соответствия.....	35
Полный набор наблюдаемых.....	38
Лекция 3. Теория представлений	40
Представления.....	40
Задача 1. Наблюдаемые для кубита.....	43
Задача 2. Наблюдаемые для системы из двух кубитов.....	46
Задача 3. Наблюдаемые для линейного гармонического осциллятора.....	49
Задача 4. Координатное и импульсное представления для частицы, совершающей одномерное движение.....	51
Связь волновых функций координатного и импульсного представления.....	56
Лекция 4. Эволюция стационарных систем	61
Эволюция в картине Шредингера.....	61
Эволюция в картине Гейзенберга.....	63
Эволюция в картине Дирака.....	68
Поиск законов сохранения системы.....	69
Задача 1. Схема решения задачи об эволюции в картине Шрёдингера.....	71
Задача 2. Схема решения задачи об эволюции одномерной точечной частицы в потенциальном поле в картине Гейзенберга.....	73
Теорема Нётера в нерелятивистской квантовой механике.....	75

Чистые и смешанные состояния.....	78
Лекция 5. Смешанные состояния.....	81
Определение матрицы плотности «в духе Ландау».....	81
Определение матрицы плотности «в духе Фоке»	85
Формально-математическое определение матрицы плотности	87
Задача 1. Матрица плотности для кубита.....	89
Задача 2. Матрица плотности для частицы, совершающей одномерное движение	91
«Переходы» между способами описания состояний на примере кубита	92
Лекция 6. Решение уравнения Шредингера для одномерных систем	98
Уравнение непрерывности для шредингеровской координатной волновой функции ..	98
Случаи одномерного движения частицы в квадратичном и более сложном поле	99
Решение уравнения Шредингера для разных случаев движения с учётом уравнения непрерывности	104
Коэффициенты отражения и прохождения для волны вероятности	109
Решения для потенциалов с сингулярностями	110
Лекция 7. Линейный гармонический осциллятор	115
Повышающий и понижающий операторы для линейного гармонического осциллятора	115
Спектр осциллятора через повышающий и понижающий операторы.....	117
Координатное представление для осциллятора	122
Эволюция осцилляторных состояний в шредингеровской картине.....	124
Лекция 8. Использование симметрии для решения задач	133
Приёмы для работы со сложными системами	133
Задача 1. Телепортация кубита с помощью квантовой запутанности.....	134
Использование симметрий	139
Задача 2. Сведение двухчастичной задачи к одномерной.....	142
Задача 3. Сведение трёхмерной задачи к одномерной.....	143
Лекция 9. Сферическая симметрия	149
Движение частицы в сферически симметричном потенциале.....	149
Особые случаи с вырождением	154
Задача. Падение частицы на центр.....	161
Пространство Паули	164
Лекция 10. Спин	167

Матрицы Паули	167
Проектирование спина на произвольное направление	172
Взаимодействие спина с внешним полем	177
Задача. Изменение направления спина электрона в однородном магнитном поле	183
Лекция 11. Другие спины и изоспин	186
Описание частиц со спином 12	186
Описание частиц с другими спинами	190
Задача 1. Операторы спина в пространстве спинорных трёхкомпонентных волновых функций	196
Другие наблюдаемые, не имеющие классического аналога	200
Сложение моментов	203
Лекция 12. Сложение моментов	207
Использование арифметики	207
Задача 1. Полный момент системы двух частиц в состоянии с определённым орбитальным моментом	209
Использование алгебры для подсчёта коэффициентов Клебша – Гордана	210
Задача 2. Сложение изоспинов и сечение рассеяния для рождения частиц	214
Сведение системы двух разных частиц, чувствительных к спину, к одночастичной	220
Лекция 13. Приближённые методы решения задач	223
Задача. Базис общих собственных функций наблюдаемых для нерелятивистского позитрония	223
Конкретные волновые функции для нерелятивистского позитрония	229
Приближённые методы	232
Лекция 14. Метод ВКБ	238
Решение уравнения Шредингера методом ВКБ	238
Сшивка решения в классически допустимой и недоступной областях	246
Задача. Спектр дискретных уровней частицы в односвязной яме	251
Лекция 15. Метод ВКБ – 2	253
Задача 1. Спектр дискретных уровней частицы в односвязной яме	253
Задача 2. Спектр для двумерного движения в плоскости в полярных координатах	259
Следствия для структуры спектра	263
Туннельный эффект	267
Задача 3. Коэффициент прохождения для прямоугольного барьера	269

Лекция 16. Стационарная теория возмущений	272
Метод теории возмущений в спектральной задаче для гамильтониана.....	272
Поправки в случае невырожденного спектра	274
Условие «быстрой» сходимости рядов теории возмущений	279
Поправки в случае вырожденного спектра	281
Лекция 17. Вариационный метод	288
Вариационный метод для основного состояния осциллятора	288
Вариационный метод для низшего возбуждённого состояния осциллятора	292
Концепции измерения.....	296
Парадокс ЭПР (Эйнштейна – Подольского – Розена) с координатами и импульсами	298
Парадокс ЭПР в версии Бома со спинами.....	300
Теорема и неравенство Белла	301
Пример неравенства Белла	304
Лекция 18. «Парадокс» GHZ и квантовая информатика.....	306
«Парадокс» GHZ (Гринбергера – Хорна – Цайлингера).....	306
Задача 1. Плотное кодирование на квантовых состояниях.....	315
Задача 2. Увеличение числа выигршей при использовании пары спутанных кубитов	318

>

Лекция 1. Квантовое поведение

Квантовая теория отличается от всех прочих разделов теоретической физики вероятностной интерпретацией. Как и всё в ней, это некая динамическая теория, но посвящённая описанию не динамики реальных событий или процессов, а динамики вероятностей.

Особенности квантовых объектов

Исторически, когда мы говорим о квантовом поведении, обычно указываем на следующие особенности, являющиеся прерогативой квантовых объектов.

1) Дискретность значений наблюдаемых. Наблюдаемая в квантовой теории – любая величина, которую можно измерить, для которой существует измерительная процедура. В теоретической физике первая задача – уметь корректно описывать результаты наблюдений и измерений, производимых над объектами мира, и в идеале правильно предсказывать из результат численно. Поэтому наблюдаемые очень важны.

В микромире спектр значений любой наблюдаемой для любого локализованного, то есть находящегося где-то в конкретной части пространства вселенной микрообъекта, всегда дискретен.

Это не изобретение конкретно квантовой теории. В курсе статистической физики в следующем семестре будет рассказываться про микростатистическое распределение Гиббса и вообще про то, как Гиббс стал строить статистическую физику как самостоятельный раздел теоретической. Одна из базовых идей состояла в том, чтобы ввести дискретный набор состояний частиц.

Мы применяем статистический подход к системам из очень большого числа микрочастиц, детального описания каждой из которых дать не можем. Но Гиббс исходил из классической ньютоновской механики, поэтому каждую частицу рассматривал примерно как материальную точку – некий маленький по размерам объект с массой, обладающий инертностью и умеющий двигаться в пространстве. Как всегда в классической механике Ньютона, состояние материальной точки задаётся, когда мы задаём начальную координату и скорость. Описания через них потом были обобщены до лагранжева формализма. Но лагранжев и гамильтонов формализмы – это другая математика, а представления о мире в них те же, что в ньютоновской механике, что он состоит из движущихся материальных точек, которые взаимодействуют между собой.

Гиббсу надо было ввести понятие статистической меры каждого состояния макроскопической системы. Он выдвинул идею, что каждое макросостояние системы из большого числа частиц можно реализовать разными способами из микросостояний, где каждую частицу мы поместили в какое-то конкретное состояние. Тогда состояния – точки фазового пространства, то есть шестимерного пространства для каждой частицы, где шесть координат – например, три координаты и три импульса. Но в таком случае число точек у любого конечного фазового объёма континуально велико. Получилось бы, что каждое макросостояние реализуется континуальным множеством микросостояний. Это

Гиббсу не нравилось, ведь идея была, что статистический вес каждого макросостояния – просто отношение числа микросостояний, с помощью которых оно реализуется, к общему возможному числу макросостояний. Для этого они скорее должны были быть конечными, чем бесконечными, континуально большими.

Так что Гиббс предположил, что есть конечное число микросостояний. Он не мог его вычислить, но постулировал, что оно пропорционально фазовому объёму. Мы берём распределение частиц по микросостояниям как распределение по клеточкам фазового объёма и в конце концов говорим, что существует клеточка, в которой помещается ровно одно микросостояние. Именно это мы потом найдём в квантовой теории, когда будем рассматривать квазиклассическое описание систем, составленных из большого числа микрочастиц. Но, в отличие от Гиббса, который не знал коэффициент пропорциональности между числом микросостояний и фазовым объёмом, у нас он будет конкретным и связанным с постоянной Планка, с которой так или иначе связано всё в квантовой теории. Гиббс ввёл микроканоническое распределение до появления квантовой теории и даже гипотезы кванта и в этом смысле опередил квантовую теорию в идеи дискретности значений наблюдаемых для микрочастиц.

2) Корпускулярно-волновой дуализм. Мы не будем уделять ему много внимания. Во-первых, о нём уже рассказывалось в курсе введения в квантовую теорию. А во-вторых, с точки зрения квантовой теории это некий исторически возникший язык «наивной» квантовой теории, который ещё не был в должной степени формализован.

Теоретики обнаружили, что для описания микрообъектов не подходит в чистом виде математика непрерывного, которая использовалась для описания волн. Ведь для полей в пространстве мы всегда исследуем какие-то континуальные распределения их наблюдаемых характеристик, например, \vec{E} или \vec{H} и \vec{B} для электромагнитного поля в вакууме. Также не подходили методы ньютоновской механики для частиц, где используется, по сути, дискретная система, дискретный набор материальных точек, и системы может и большого числа, но обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, в качестве динамической системы. В волновых теориях возникали уравнения в частных производных.

Первой идеей было синтезировать корпускулярное и волновое описание, чтобы описывать реальные микрообъекты. Хрусталёв сказал, что истинный смысл корпускулярно-волнового дуализма не в том, что квантовые объекты являются одновременно волнами и частицами, а в том, что они не являются ни тем, ни другим, но совершенно новой реальностью, для которой в какой-то момент для упрощения мы можем применить волновую схему описания, в какой-то корпускулярную. Но в любом случае это будет приближённое описание, потому что точное должно строиться на основании своей формальной схемы квантовой теории.

3) Вероятностная динамика. Теоретические уравнения будут описывать в качестве результата не то, какое событие случится в данной системе, а вероятность того, что случится то или иное событие.

Важно понимать, как вероятностный подход меняет восприятие. Именно здесь кроется причина, по которой физикам не удалось договориться о едином смысле физического понимания квантовой теории. Мы привыкли рассуждать о событиях, и нам гораздо сложнее думать в реальной системе категориями вероятностей событий. Всё равно остаётся ощущение, что вероятность нужна для оценки того, что может быть, потому что мы не можем просчитать это точно. А квантовая механика в принципе отвергает возможность точных предсказаний об исходе того или иного процесса, мы скажем только какие исходы возможны и с какой вероятностью.

Такая точка зрения была принята научным сообществом больше ста лет назад не без сопротивления. Например, Эйнштейн, который получил Нобелевскую премию именно за квантовое описание фотоэффекта, большую часть жизни боролся против вероятностной интерпретации квантовой теории. Все помнят его фразу «Бог не играет с миром в кости». Гораздо реже цитируется ответ Бора, где тот сказал, что Бог, конечно, не играет с миром в кости, но в великой благости своей может позволить нам не всегда решать бесчисленные дифференциальные уравнения, а иногда, с надеждой на успех, взять в руки игральные кости. По его замыслу получалось, что если вероятностная динамика позволяет добиться успеха, надо её использовать, если не можете предложить чего-то лучшего.

Некоторые вещи про квантовую теорию уже должны быть известны, поэтому какие-то предшествующие примеры мы будем приводить до того, как разберём формальную схему. Проиллюстрируем идею, что вероятностность динамики действительно меняет восприятие мира. Наиболее яркое её проявление состоялось, когда физики стали создавать то, что теперь называется квантовыми алгоритмами. У них есть и теоретическое описание, но чаще всего имеются в виду практически реализуемые алгоритмы действия, позволяющие решать задачи, не имеющие решения с точки зрения классической физики.

Бомба Пенроуза

Один из самых красивых и известных примеров был изобретён двумя математиками из Сколтеха, в интернете его проще всего найти как бомбу Пенроуза. Пенроуз получил Нобелевскую премию за расчёты, посвящённые общей теории относительности, и доказательства, посвящённые уравнениям Гильберта-Эйнштейна. А здесь его имя, потому что Пенроуз в нескольких местах подробно объяснил широкой публике смысл данного примера.

Задача была придумана математиками и изначально имела математическую постановку. Предположили, что можно создать несколько устройств. Центральным устройством задачи был однофотонный детонатор – некое зеркальце, которое может

почувствовать падение на него даже отдельного фотона. Этот фотон, отдавая зеркальцу импульс отдачи, приводит в действие однофотонный детонатор, и бомба, на которой детонатор установлен, взрывается.

Когда мы ставим детонаторы на бомбы, с вероятностью в 50% они ломаются. Мы не знаем, какие будут сломаны на выходе технологической линии. Нужно подобрать алгоритм, с помощью которого можно отдать заказчику только бомбы с исправными детонаторами. Узнать, работает детонатор или нет, можно единственным способом – направив на него фотон.

С классической точки зрения, если мы направим фотоны, все исправные бомбы взорвутся, останутся только неисправные, и отдавать будет нечего. Но предполагается, что у нас есть ещё несколько устройств, которые умеют работать с фотонами. Например, полупрозрачное зеркало-делитель, которое разлагает всякий фотон по базису двух поляризационных состояний. Если мы направим на это зеркало, например, фотон с циркулярной поляризацией, и будет базис двух линейных поляризаций A и B (рис. 1.1), часть фотона, которая будет в состоянии A , пройдёт через зеркало, а часть фотона в состоянии B от него отразится.

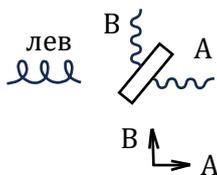


Рис. 1.1. Фотон налетает на полупрозрачное зеркало-делитель

Также у нас есть классическое зеркало. По сути, это то же самое, что и сломавшийся детонатор. Оно стопроцентно отражает фотон, не обмениваясь с ним импульсом и не меняя соответствующую волну вероятности.

Здесь мы начинаем говорить на языке неклассической квантовой теории. Каждый фотон не обязательно находится в определённом поляризационном состоянии или в состоянии с определённым набором таких чисел, как волновой вектор \vec{k} и какой-нибудь индекс поляризации. Он может находиться в чистом состоянии, являющемся произвольной суперпозицией разных поляризаций. Когда происходит отражение от классического зеркала, фаза волновой функции фотона этой волны вероятности просто сдвигается на π .

При этом не разрушаются другие спектрально-фазовые характеристики. Например, квантово-механическая когерентность двух волн, полученных на рис. 1.1, которые изначально были когерентны, потому что порождены одним фотоном. Вводя это понятие, мы подразумеваем, что волны вероятности могут быть когерентными, и может произойти потеря этой когерентности.

Дальше ставим на их пути два классических зеркала (рис. 1.2). Фотоны отражаются от них в тех же состояниях и приходят на финальное устройство –

полупрозрачное зеркало-синтезатор. Если на него падают фотоны с двумя ортогональными состояниями поляризации, вылетает фотон, который находится в состоянии, являющемся просто наложением этих двух волн вероятности.

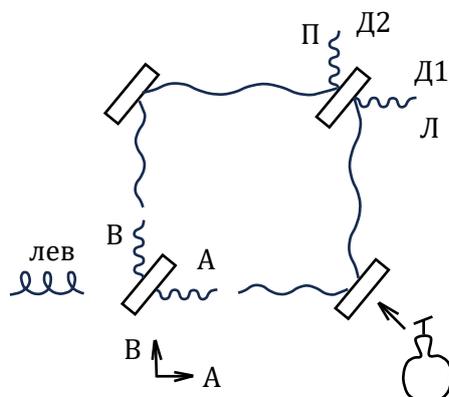


Рис. 1.2. Схема разделения фотона и получения исходного состояния

Поскольку каждая волна сдвинулась на π , на этом устройстве общая должна воспроизвести исходное состояние. Если исходно была, допустим, левая циркулярная поляризация, состояние выйдет в исходном направлении, а ортогональное к нему с правой циркулярной поляризацией должно было бы выйти вверх. Но в нашем случае его не возникает, потому что не произошло сдвига фазы и разрушения когерентности.

Таким образом, мы придумали схему, которая сначала делит фотон на две волны вероятности с взаимно ортогональными состояниями базиса, а потом из них опять собирает исходное состояние.

Ставим детектор №1 для фотона туда, куда он должен вылететь, и детектор №2 туда, куда не должен. Тогда, если мы пошлём фотоны с левой циркулярной поляризацией, всегда будет срабатывать детектор №1, который ловит именно такие.

Теперь возьмём бомбу с детонатором и поставим её на место одного из классических зеркал. На самом деле происходит разделение волны вероятности, и, если на месте зеркала стоит устройство, которое уже чувствует фотон, то есть может обменяться с ним энергией, изменить его состояние, оно, по сути, является прибором, производящим наблюдение над фотоном.

Всякое измерение, произведённое над фотоном, меняет его состояние, причём довольно неконтролируемо. У каждого измерительного прибора есть свой набор собственных состояний, в которые он загоняет микрочастицу с определённой вероятностью. Но оно уже не будет исходным состоянием.

Неисправный детонатор ничего не поменяет, у него такое же зеркало, как то, что стояло раньше, поэтому всё время будет срабатывать детектор №1, в который прилетают фотоны с левой циркулярной поляризацией. Но если мы поставим зеркало с исправным детонатором, взаимодействие с ним волны вероятности – это измерение, оно полностью изменит состояние. И когда отражённый фотон, отражённая волна полетит на финальное

зеркало, то, что получится при объединении с другим каналом, не будет исходной левой циркулярной поляризацией. Ведь сложатся уже не прежние половинки, а одна из прежних половинок волны вероятности с совершенно переделанной.

Поэтому соберётся новое состояние, которое разложится по базису «левый-правый» как-то по-другому. Будет ненулевая вероятность появления правого поляризованного фотона, который летит в детектор №2.

Изначально предсказать результат измерения нельзя. Мы решили, что вероятность попасть вправо и вверх после прохождения первого зеркала равна, то есть левая циркулярная поляризация – сумма двух разных перпендикулярных линейных поляризаций с равными амплитудами. Поэтому в реальности вероятность того, что фотон полетел по каналу *A* или *B* 50%. Так что с вероятностью в 50% бомба взорвётся, но бомб много. А если фотон полетел по каналу *B*, она не взорвётся, но появится ненулевая вероятность срабатывания детектора №2.

Так что просто ставим бомбу и пускаем фотоны. Если при запуске, например, десяти фотонов всё десять раз сработал, как и раньше, детектор №1, с огромной вероятностью детонатор не исправен. Если бомба взрывается, ставим новую. Но если вдруг сработал детектор №2, фотоны больше не посылаем, а бомбу считаем исправной.

Получается, что судьба фотона на финальном зеркале изменилась от того, что исправный детонатор был не там, где фотон реально прошёл, а там, где он мог бы пройти. Это следствие того, что наше уравнение настроено на описание динамики вероятности.

В данном примере мы убедились в существовании квантовых алгоритмов и обсудили много полезных вещей. Во-первых, узнали про квантовую когерентность, которую можно разрушить. Мы в этом уверены, потому что сталкивались с этим много раз, начиная с классического опыта, являющегося для волновой оптики аналогом опыта Юнга.

Аналог опыта Юнга для электронов

В этом опыте мы делаем поток микрочастиц, например, электронов, очень разреженным, чтобы взаимодействие между ними ничего не портило. Можно сделать поток электронов, которые находятся примерно в одинаковом начальном состоянии, то есть у которых маленький разброс импульса, так что будет почти плоская волна (рис. 1.3). Её описывает волна вероятности, отвечающая отдельному электрону. А где-то дальше стоит экран, на котором попавший электрон вызывает химическую реакцию. Например, окисляется атом серебра, в результате чего появляется чёрная точка. Пока предыдущий электрон не оставил свою точку на экране, мы следующий не отправляем, поэтому точно уверены, что каждый ставит одиночную точку где-то на фотопластинке.

На пути пучка ставим щель с маленьким отверстием, размеры которого вполне сопоставимы с дебройлевской длиной волны электрона. Поэтому мы увидим дифракцию его плоской волны вероятности. После этого поставим ещё один экран с двумя щелями так, чтобы обе находились внутри дифракционного конуса расходимости. Ситуация

повторится, и мы получим два дифракционных конуса волны вероятности. У них возникнет область перекрытия, в которой будет интерференция когерентных волн.

Это волны вероятности, так будет как для электронов, так и для фотонов. Проявив фотопластинку, мы обнаружим в области перекрытия интерференционную картину, которая сложилась из точек, оставленных электронами. Будет кривая почернения, чередование тёмных и светлых полос, и интенсивность будет убывать по мере выхода из зоны пучка, так как вероятность попасть в центр у электрона была больше, вследствие чего туда их больше и попало.

Дальше нужно было подглядеть за электронами и увидеть, как они делятся надвое. Электрон же вроде неделим, как и элементарный заряд, но, чтобы проинтерферировать, им надо было пройти через две щели. Классическое действие – поставить за вторым экраном источник света с длиной волны существенно меньше расстояния между щелями (рис. 1.3), чтобы можно было понять, что этот источник света рассеивается на электроне, пролетевшем через определённую щель. Ставим два детектора, которые регистрируют рассеянные фотоны, и по их регистрации понимаем, через какую щель пролетел электрон. Если он пролетит через две щели, сработают оба детектора, и можно будет сказать, что электрон можно разделить надвое.

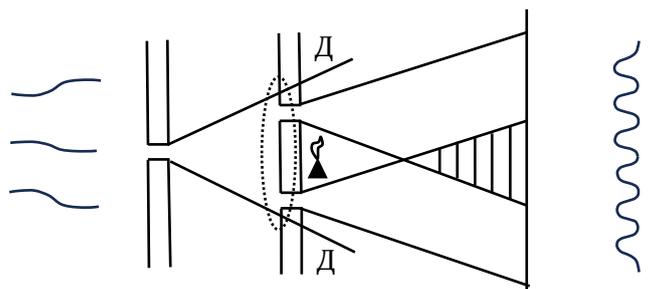


Рис. 1.3. Получение интерференции от прохождения электронов через две щели

В результате всегда срабатывал только один детектор, электрон не проходил через две щели, а интерференционная картина исчезла, волна вероятности не смогла проинтерферировать сама с собой. Традиционное объяснение состоит в том, что мы своим вмешательством разрушили квантовую когерентность волн вероятностей. Если длина волны источника света была много меньше расстояния между электронами, был большой импульс, и при рассеянии получилось довольно сильное влияние на электрон.

И вообще, при взаимодействии электрона с фотоном мы фактически произвели над ним измерение. Раньше у электрона вероятность нахождения в каких-то точках пространства была размазана по области дифракционного конуса, он мог оказаться в любой из них. А в момент взаимодействия с фотоном в пределах одной щели он оказался локализованным в пределах данной щели. Произошло то, что называют коллапсом волны вероятности: она мгновенно в момент измерения собралась к этому пространству. Ясно, что она неконтролируемо изменилась. Так что, когда статистика опять будет набрана, мы

получим обычное некогерентное наложение интенсивностей от двух щелей путём суммирования вероятностей, а не амплитуд этих волн, то есть их самих.

Концепция измерения

В итоге любое измерение для нас выглядит следующим образом. Есть объект в некоем начальном состоянии $|in\rangle$ и макроскопический прибор (рис. 1.4). Чтобы прибор что-то измерил у микрообъекта, мы включаем режим, в котором прибор с ним взаимодействует, чем-то с ним обменивается и выдаёт результат измерения. Если прибор измеряет некую наблюдаемую f , он выдаёт некое число f , которое является её значением. Мы говорим, что прибор в процессе взаимодействия загнал микрообъект в новое состояние $|f\rangle$ с определённым числом этой наблюдаемой f . У каждого прибора есть некий набор чисел $f_1, f_2, f_3 \dots$, измеренное f одно из них, и каждому из них соответствует определённое состояние нашего микрообъекта $|f_1\rangle, |f_2\rangle, |f_3\rangle \dots | \dots \rangle$ – дираковское обозначение для состояния в квантовой теории, дираковский вектор.

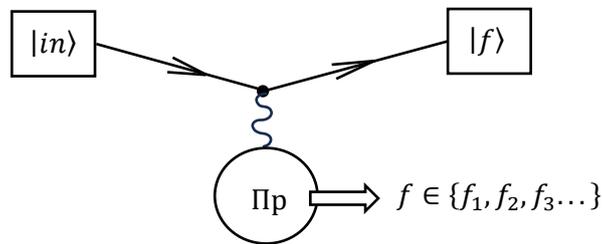


Рис. 1.4. Перевод микрообъекта прибором в новое состояние

После измерения микрообъект находится в новом состоянии, и прибор выдаёт нам отчёт о том, куда он его загнал. Исходное состояние объекта влияет на этот процесс, потому что оно по-разному разлагается по базису из векторов с определённым значением f . Если разложить $|in\rangle$ как сумму по всем возможным f , будет

$$|in\rangle = \sum_f c_f |f\rangle, \tag{1.1}$$

где коэффициент разложения c_f – это число, и его квадрат модуля

$$|c_f|^2 \equiv \omega_f(|in\rangle) \tag{1.2}$$

мы интерпретируем как вероятность того, что для микрообъекта в начальном состоянии $|in\rangle$ будет выдано значение f . Таким образом, от начального состояния зависит набор вероятностей реализации разных значений.

Поэтому, если теоретик попросит экспериментатора, который производит это измерение, дать побольше информации о начальном состоянии, всё, что тот сможет, – приготовить очень много микрообъектов в одинаковом состоянии $|in\rangle$, если есть их источник, все их измерить и выдать статистику, каким будет набор ω_f . То есть мы будем знать квадраты модулей коэффициентов разложения. Это не полная информация о состоянии $|in\rangle$, но уже что-то.

Если мы проведём разные интерференционные эксперименты, сможем научиться мерить даже относительные фазы разных интерференционных слагаемых. Но всё равно, чтобы восстановить информацию об исходном состоянии, нужно сделать очень много измерений. То есть набрать полную статистику, чтобы с ошибкой меньшей заданной восстановить амплитуды, а если получится, и фазы коэффициентов разложения.

Все эти коэффициенты разложения являются комплексными числами, но это наследуется от того, что мы работаем с объектом, имеющим волновые свойства. Каждую волну, даже для заданной конкретной частоты, мы характеризуем амплитудой и фазой, одного вещественного числа для её описания, как правило, недостаточно. Да и вообще в теории волн часто используют комплексное описание, метод комплексных амплитуд. Оказалось, что в квантовой теории при описании волн вероятности он тоже очень удобен. Более того, любые реализации, которые можно придумать на языке вещественных волн, катастрофические неудобны. Так что впредь мы будем пользоваться именно комплексным описанием волн вероятности.

Итак, мы поняли, какое физическое содержание должно быть заложено в квантовой теории и какие понятия нужны. Чтобы решать задачи теоретической физики, то есть что-то считать и выдавать предсказания в отношении результатов измерений, нужен математический аппарат. Когда мы строим теорию, должны принять систему аксиом, ввести основные объекты математического аппарата и объяснить связь между физикой, которую собираемся описывать, и этими объектами.

Дальше мы будем говорить о математическом аппарате квантовой теории. Это важно, потому что представление о том, как всё происходит в микромире, у разных исследователей может быть совершенно разным, что не мешает им работать вместе над квантовой физикой. А математический аппарат они, как правило, используют один и тот же. Из-за этого большинство исследователей, решающих практические задачи, работают с математическим аппаратом, делающим всё, что им нужно, не задумываясь над физическим смыслом. Квантовая теория, которая принципиально отрицает возможность точного предсказания результата процесса, является чемпионом по точности предсказаний среди всех областей человеческого знания.

В курсе атомной физике уже упоминалась такая величина как лэмбовский сдвиг в атоме водорода – различие между двумя подуровнями уровня с $n = 2$ с разными j . Оно возникает из-за того, что у электронов, находящихся в s -состоянии, больше вероятность присутствия вблизи ядра, где поле ядра большое. И там на энергиях электронов больше сказываются так называемые вакуумные флуктуации – взаимодействия электрона с флуктуациями вакуума электромагнитного поля, в котором он находится.

В середине прошлого века с помощью разработки специальных методов, включая методы перенормировки расходимостей, была построена квантовая электродинамика, в которой научились считать подобные величины с высокой точностью. И в конце 40-х годов данный лэмбовский сдвиг был рассчитан с точностью до девятой значащей цифры. Это произошло в результате объёмной работы теоретиков, суммирующих вклады

фейнмановских диаграмм до пятого порядка по константе электромагнитного взаимодействия. Там было много расходящихся диаграмм, которые надо было подвергать перенормировке. А экспериментаторы, в результате резкого усовершенствования методов радиочастотных измерений после войны, смогли померить эту величину с точностью до восьмой значащей цифры. Оба результата совпали, то есть теоретическое предсказание совпало с результатом эксперимента с точностью до миллионной доли процента.

Вообще в квантовой механике и электродинамике, особенно в приложениях к атомно-молекулярным объектам, очень точные предсказания, когда речь идёт о десятых, сотых и даже тысячных долях процента, не являются чем-то исключительным. Хотя для аномального магнитного момента совпало и семь значащих цифр. А ведь есть области знания, где предсказание по порядку величины уже считается хорошим.

Дальше мы будем изучать математический аппарат квантовой теории. В нерелятивистской квантовой теории это теория эрмитовых операторов гильбертова пространства. Эту же математику нужно заложить в основу аксиом – правил игры, которыми мы планируем пользоваться на протяжении этого семестра и части следующего.

Аксиоматика канонического квантования

Под квантованием мы будем понимать некую процедуру, полностью формализованную и в некоторой степени магическую, так как мы не будем объяснять, почему она такая. Будучи применённой к классической динамической теории, она приготовит из неё квантовую динамическую теорию аналогичной системы.

Нужно будет воспользоваться теорией эрмитовых операторов гильбертова пространства. Эти понятия были в курсе математики, но мы всё равно их вспомним. Разберёмся, что такое гильбертово пространство H , и почему мы решили воспользоваться именно им.

Математик скажет, что это бесконечномерное сепарабельное полное евклидово линейное пространство над полем комплексных чисел. Математические определения надо читать с конца. Линейное пространство над полем комплексных чисел \mathbb{C}^1 означает, что есть некий набор векторов $|\psi\rangle$, для каждого из которых определены операции сложения и умножения на комплексное число. То есть, если есть два вектора $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ из нашего набора и два произвольных комплексных числа α и β , должно быть установлено правило, согласно которому мы построим вектор

$$\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle \quad (1.3)$$

из нашего же пространства. И эта процедура должна удовлетворять аксиомам линейного пространства – перестановочности сложения, сочетательности по отношению к умножению на число, существованию нулевого вектора, такого, что при добавлении его к любому тот остаётся сам собой, умножения на единицу и т. д.

Линейное пространство $\{|\psi\rangle, \dots, \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle\}$ над полем \mathbb{C}^1 евклидово – то есть есть правило, согласно которому любой паре векторов сопоставляем величину, являющуюся комплексным числом и называемую скалярным произведением этих двух векторов

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}^1 \quad (1.4)$$

Из данного обозначения и выросли те, которыми мы сейчас пользуемся. В англоязычной математической литературе скалярное произведение записывали как (1.2) и называли «braket» – скобка. Дирак предложил распилить его пополам и ввёл ket-вектора $|\psi\rangle$ и сопряжённые им bra-вектора $\langle\psi|$. Каждому нормальному несопряжённому ket-вектору с помощью операции сопряжения можно построить сопряжённый bra-вектор, а потом из обоих построить конструкцию скалярного произведения, тоже удовлетворяющего аксиомам скалярного произведения.

Мы их перечислять не будем, только обратим внимание, что пространство комплексное, поэтому аксиома перестановочности не как в вещественных евклидовых пространствах, а

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*, \quad (1.5)$$

при перестановке сомножителей произведения получается комплексно-сопряжённое число со звёздочкой.

В евклидовых пространствах ещё важно, что мы через это скалярное произведение вводим норму – расстояние, длину вектора, определяя её как квадратный корень из его скалярного квадрата:

$$\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \quad (1.6)$$

В свойства скалярного произведения при этом входит идея, что скалярный квадрат любого вектора, кроме нулевого, положительное вещественное число, поэтому корень для него определён однозначно. А для нулевого вектора, разумеется, скалярный квадрат и норма должны равняться вещественному числу, равному нулю.

Математик бы сказал про полное пространство в смысле Коши. Данное пространство также полное в смысле Коши, то есть всякая фундаментальная последовательность его элементов должна сходиться к элементу этого же пространства.

Труднее вспомнить, что такое сепарабельность. Бесконечномерное сепарабельное пространство – то, в котором существует всюду плотное счётное множество. То есть существует такое счётное множество векторов, что для любого наперёд заданного сколь угодно маленького ε можно приблизить любой вектор пространства линейной комбинацией векторов из этого набора.

На самом деле это некое ограничение на бесконечномерность. В конечномерном пространстве есть конечный базис, и любой вектор этого пространства можно записать как его линейную комбинацию. С бесконечномерными, особенно с континуальными пространствами сложнее, но мы хотим, чтобы было также, чтобы свойства интегралов и

сумм в пространстве не различались. То есть чтобы в этом пространстве всегда существовали счётные полные ортонормированные базисы. Так что важна даже не сама сепарабельность, а её главное следствие. Как бы мы её ни вводили, в бесконечномерном пространстве из неё будет следовать существование счётного полного ортонормированного базиса, то есть такого набора векторов $\{|\psi_n\rangle\}$, что для любого вектора $|\psi\rangle$ из этого пространства H мы сможем записать его в виде соответствующей линейной комбинации

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi_n | \psi \rangle |\psi_n\rangle \quad (1.7)$$

То, что пространство евклидово, уже накладывает дополнительные ограничения, так что коэффициентами разложения будут скалярные произведения базисных векторов на раскладываемый.

Это не исключает того, что в определённом каким-то образом гильбертовом пространстве мы можем ввести несчётный базис, где получим интегрирование. Может случиться, что вектора несчётного базиса, по которому будем вести разложение, не будут принадлежать нашему пространству.

Яркий пример этого – известное из математики пространство квадратично-интегрируемых функций вещественной переменной L_2 . Мы вводим набор таких функций $\psi(x)$, что областью определения является вещественная ось или какой-то её отрезок (во втором случае придётся добавлять граничные условия):

$$\{\psi(x), x \in \mathbb{R}^1\} \quad (1.8)$$

Множество значений – комплексная плоскость, то есть это комплекснозначные функции естественной переменной:

$$\psi \in \mathbb{C}^1 \quad (1.9)$$

И они квадратично интегрируемы, интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 < \infty, \quad (1.10)$$

то есть всегда сходящийся.

Это пространство сепарабельно, потому что в нём существуют счётные базисы. Для функций одной переменной их даже проходили в курсе ММФ, например, базис из присоединённых функций Эрмита. По нему можно разложить любую такую функцию, это там доказывалось. Будет что-то вроде

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n!}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \quad (1.11)$$

где $H_n(x)$ – стандартный полином Эрмита. В ММФ доказывали, что для пространства L_2 n пробегает значения 0, 1, 2, 3., и оно образует полный ортонормированный базис.

С другой стороны, любую такую квадратично интегрируемую функцию можно разложить в интеграл Фурье. То есть можно считать, что есть ещё один базис

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (1.12)$$

Ясно, что функции (1.12) не принадлежат данному пространству \mathbb{C}^1 , потому что не удовлетворяют условию (1.10), там получается интеграл от константы от $-\infty$ до $+\infty$.

Возникает интересная с точки зрения математики ситуация, когда есть континуальный базис, но он принадлежит к некоему дополнению к нашему пространству, а не к нему самому, однако любую функцию данного пространства мы расписать можем.

А мы как раз хотели, чтобы функции, которыми будем описывать состояния квантовых объектов, можно было разлагать и по счётным, и по несчётным базисам. Потому что в итоге будем говорить, что каждый ортонормированный базис в нашем пространстве может быть связан с некой измерительной процедурой.

Идея состоит в том, что измерительной процедуре мы поставим в соответствие оператор, определённый в этом гильбертовом пространстве. Будем говорить, что у каждого оператора мы можем решить задачу на собственные значения и собственные функции. И воспользуемся теоремой, что для эрмитового оператора, то есть того, который при эрмитовом сопряжении переходит сам в себя, в данном пространстве всегда можно построить из его собственных векторов полный ортонормированный базис. Будем говорить, что этот базис из собственных векторов и есть базис из состояний, в которые прибор, реализующий процедуру, описываемую нашим оператором, загоняет частицу после измерения. А собственные значения – величины, которые он выдаёт в качестве отчёта.

То есть теперь мы говорим, что прибор в качестве отчёта выдаёт одно из своих собственных значений. И это означает, что он в результате взаимодействия с микрообъектом в процессе измерения загнал его в состояние, описываемое соответствующей собственной функцией.

У нас появятся дискретные счётные наборы собственных функций. Будем говорить, что это означает, что соответствующее множество собственных значений будет дискретным, то есть эта наблюдаемая с дискретным спектром.

Если же мы используем континуальный базис, являющийся дополнением к нашему пространству, станем говорить, что на самом деле таких величин не бывает, и у каждого локализованного объекта только дискретный спектр значений наблюдаемых. Но когда мы локализовали в какой-то очень большой области, может оказаться, что этот дискретный спектр настолько плотный, что его будет удобнее математически описывать как переход к некому пределу непрерывного спектра.

То есть мы при этом всегда говорим, что настоящие физические состояния, куда загоняет микрообъект любой реальный прибор с конечными размерами, всегда

описываются функциями дискретного спектра. Но иногда удобно воспользоваться непрерывным спектром в качестве предельного перехода от очень плотного дискретного.

Как раз поэтому мы вспоминали нормировочный коэффициент в (1.12). В полном ортонормированном базисе скалярное произведение двух векторов должно давать символ Кронекера:

$$\langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle = \delta_{nn'} \quad (1.13)$$

То есть каждый вектор должен быть нормирован на единицу, а разные вектора из базиса быть ортогональны друг другу, их скалярное произведение должно быть нулём.

Именно в этом случае, если был микрообъект в некоем состоянии $|in\rangle$, мы обнаружим, что вероятность выпадения собственного значения f_n , соответствующего ω_n , будет квадратом скалярного произведения

$$|\langle \psi_n | in \rangle|^2 \quad (1.14)$$

Как мы помним, квадрат модуля – это коэффициент разложения произвольного вектора по данному базису (1.7), эта формула работает именно для ортонормированных базисов.

Понятно, что сделать что-то подобное с функцией (1.12) мы не можем. Требование ортонормированности с точки зрения вероятностной интерпретации, по сути, имеет следующий смысл. Если мы посчитаем сумму всех вероятностей реализации для всех возможных значений, сложив сумму квадратов модулей координат вектора, получим норму этого вектора. Если вектор нормирован на единицу, мы получим единицу. Отсюда следует простой физический вывод, что вероятность того, что будет выведено какое-нибудь значение, равна единице, так как сумма вероятностей реализации всех возможных исходов должна быть единицей. А поскольку непрерывный спектр – это некое приближение, которое мы сами придумали, непонятно, что с ним делать. Вектор (1.12) нельзя отнормировать на единицу вообще, то есть умножить на нормировочный коэффициент так, чтобы интеграл от квадрата модуля равнялся единице, потому что этот интеграл расходится.

Рассмотрим, что тогда коэффициент $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Если мы вспомним интегральное определение дельта-функции, обнаружим, что нормировали функции (1.12) с индексом k , пробегающим непрерывный ряд значений, условием, что

$$\langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle = \delta(k - k') \quad (1.15)$$

δ – дираковская дельта-функция, которая равна нулю при $k \neq k'$, так что ортогональность как бы сохраняется. А нормировка нет, так как при $k \neq k'$ дельта-функция обращается в бесконечность.

С другой стороны, это приведёт к тому, что, когда мы разложим по базису (1.15) любой нормированный на единицу вектор, сумма квадратов модулей коэффициентов разложения всё равно останется единицей. То есть теперь мы уже подобрали коэффициент нормировки таким образом, чтобы обеспечить нормировку на дельта-

функцию. Дирак в своё время её и придумал для того, чтобы интеграл от неё по всем значениям был единицей, что входит в её определение.

Математики теперь скажут, что это обобщённая функция, ядро функционала. Потом был разработан целый язык, который касается подобных математических объектов. А Дирак просто хотел ввести нормальные условия нормировки для случая предела непрерывного спектра.

Зафиксируем рассказанное в качестве аксиом.

Аксиома 1. О пространстве состояний.

Чистым состояниям любой квантовой системы отвечают нормированные на единицу вектора гильбертова пространства:

$$|\psi\rangle \in H, \quad \|\psi\rangle\| = 1 \quad (1.16)$$

Данное пространство мы в дальнейшем так и будем называть пространством чистых состояний. Слово «чистым» потребует определения позже. В действительности это связано с идеей о существовании квантовой когерентности. То есть мы дальше будем говорить, что чистые состояния – это состояния, для которых возможно построение когерентной суперпозиции. Если есть состояния $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$, можно построить вектор (1.3) из нашего гильбертова пространства чистых состояний, подобрав α и β так, чтобы сохранилась полная нормировка на единицу. Тогда это тоже будет волной вероятности, являющейся когерентной смесью двух других волн вероятностей.

Из этого следует, что чистыми мы будем называть все состояния, которым, согласно данной аксиоме, отвечает некий нормированный на единицу вектор из гильбертова пространства. Что подразумевает, что позднее мы введём и другие состояния, которым нельзя будет сопоставить такой вектор.

Аксиома 2. Об измерениях

Измерению, то есть всякой измерительной процедуре наблюдаемой F , отвечает эрмитов оператор \hat{F} . Крышечка над буквой – это указание на операторную природу величины. Эрмитово сопряжённый оператор

$$\hat{F}^+ = \hat{F} \quad (1.17)$$

При этом результатом измерения является собственное значение, вещественное число $f \in \mathbb{R}^1$. В линейной алгебре доказывали, что у эрмитовых операторов все собственные значения обязательно вещественны, поэтому мы и выделили эти операторы как особый класс и ставим в соответствие измерительным процедурам, выдающим вещественные результаты измерений. А квантовая система в результате измерения переходит в состояние, описываемое собственным вектором оператора \hat{F} , которое будем обозначать $|\psi_f\rangle$, с вероятностью

$$\omega_f = |\langle \psi_n | \psi_{in} \rangle|^2, \quad (1.18)$$

где ψ_{in} – состояние квантовой системы до измерения. Тем самым мы ввели в аксиоматику вероятностную интерпретацию результатов вычислений и не сможем вернуться обратно.

Это не полная система аксиом канонического квантования, в ней не хватает двух вещей. Во-первых, мы поняли, что каждому измерению отвечает какой-то эрмитов оператор. Каждому эрмитову оператору можно придумать соответствующую процедуру измерения, но пока не понятно, как установить физический смысл конкретной наблюдаемой.

Для этого потребуется отдельная аксиома, которую мы будем называть аксиомой соответствия, так как для начала нужно будет разобраться, как писать операторы для величин, физический смысл которых мы уже знаем. Мы будем называть такие физические величины наблюдаемыми, имеющими классический аналог. И уже потом задумаемся над тем, могут ли у квантовой системы быть наблюдаемые, его не имеющие. Ответим на этот вопрос утвердительно и займёмся придумыванием операторов, описывающих их.

Также не хватает аксиомы об эволюции квантовой системы с течением времени, где мы договоримся, как будем описывать эволюционные изменения, которые происходят в реальных квантовых системах. Эти две аксиомы мы обсудим на следующей лекции.

Лекция 2. Эрмитовы операторы

Эта лекция будет одной из самых математических, потому что мы в прошлый раз начали формулировать систему аксиом, методы канонического квантования, и у нас сразу появился математический аппарат. Мы поняли, что таким аппаратом является теория эрмитовых операторов в гильбертовых пространствах. И нам важно чётко понимать, как он функционирует.

Сделаем за сегодняшнюю лекцию некий математический эрзац – напомним всё, что необходимо знать из курса математики. Мы будем рассматривать что-то и напоминать, откуда это должно быть известно, но практически никогда не будем проводить доказательства. Они тоже важны, но было бы логично некоторые ключевые потом вспомнить самим. Какие-то из них будем просить выполнить в качестве дополнительных задач.

Эрмитово сопряжение

Вспомним про операцию эрмитова сопряжения. Пусть есть оператор \hat{F} , определённый в гильбертовом пространстве H . Предлог «в», а не «на», потому что мы хотим определить оператор, который каждому вектору этого пространства ставит в соответствие вектор того же самого пространства. А если бы оператор отображал это пространство в какое-то другое, мы бы сказали, что он определен на нашем пространстве.

Если \hat{F} действует на некий вектор $|\psi\rangle$ из нашего пространства, он выдаёт некий вектор $|\tilde{\psi}\rangle$, принадлежащий тому же пространству:

$$\hat{F}|\psi\rangle = |\tilde{\psi}\rangle \quad (2.1)$$

При этом $|\psi\rangle$ часто называют прообразом, а $|\tilde{\psi}\rangle$ образом нашего вектора при действии оператора \hat{F} .

Тогда каждому такому оператору \hat{F} можно поставить в соответствие эрмитово сопряжённый оператор \hat{F}^+ по следующему правилу. В нашем пространстве определено скалярное произведение, это часть определения гильбертова пространства. Мы говорим, что для любых двух векторов $|\psi_{1,2}\rangle$ то, что получается из скалярного произведения \hat{F}_2 и образа $|\psi_1\rangle$ при действии оператора \hat{F} должно по определению совпадать с конструкцией с эрмитово сопряжённым оператором \hat{F}^+ :

$$\langle\psi_2|\hat{F}\psi_1\rangle \equiv \langle\psi_1|\hat{F}^+\psi_2\rangle^* \quad (2.2)$$

Это будет определительное свойство оператора \hat{F}^+ .

Вспомним, что скалярное произведение определено так, что при перестановке сомножителей превращается в своё комплексное сопряжённое. Поэтому формально (2.2) можно написать как

$$\langle\hat{F}^+\psi_2|\psi_1\rangle \quad (2.3)$$

То есть мы как бы можем с помощью конструкции эрмитова оператора перекинуть действие \hat{F} с одного вектора в скалярном произведении на другое.

Если мы определили эрмитово сопряжённый оператор, есть два класса особенных операторов по отношению к этой операции. Эрмитовы операторы – это те, у которых

$$\hat{F}^+ = \hat{F} \quad (2.4)$$

В старой советской литературе их часто называли самосопряженными.

Ещё есть унитарные операторы – такие операторы \hat{u} , у которых эрмитово сопряжённый оператор \hat{u}^+ совпадает с обратным, который мы будем обозначать \hat{u}^{-1}

$$\hat{u}^+ = \hat{u}^{-1} \quad (2.5)$$

Это подразумевает, что

$$\hat{u}\hat{u}^+ = \hat{u}^+\hat{u} = 1 \quad (2.6)$$

1, единичный оператор – тот, который действует на любой вектор, оставляя его самим собой. Поэтому будем писать его без крышечки, говоря, что это оператор, действие которого сводится к умножению на число 1. Мы будем воспринимать, что оператор обратный, если он обратный с обеих сторон, независимо от порядка произведения.

Теперь рассмотрим свойства эрмитовых операторов. Об унитарных поговорим отдельно.

Свойства эрмитовых операторов

Экскурс в математику не будет чисто математикой ещё и потому, что мы будем оглядываться на введённые аксиомы и обсуждать почти у всех математических результатов нечто, похожее на физический смысл, насколько он существует в квантовой теории.

Дальше будем писать \hat{F} , подразумевая, что верно (2.4), то есть что он эрмитов.

1) Все собственные значения эрмитова оператора \hat{F} вещественны. То есть если мы в нашем пространстве для нашего оператора решим задачу на собственные вектора и собственные значения

$$\hat{F}|\psi_f\rangle = f|\psi_f\rangle, \quad (2.7)$$

из этого гарантированно будет следовать, что f вещественное число, принадлежит полю \mathbb{R}^1 .

Мы знаем, что собственные значения не всегда невырождены, то есть не всегда есть взаимно однозначное соответствие между собственным значением и собственным вектором. Точнее, взаимно однозначного соответствия нет никогда, потому что для линейных эрмитовых операторов равенство (2.7) не испортится, если умножить собственный вектор $|\psi_f\rangle$ на любой постоянный множитель. Но если мы после этого потребуем, чтобы собственное значение f было нормированным на единицу, постоянные множители станут комплексными числами, по модулю равными единице. Все такие комплексные числа можно записать как $e^{i\varphi}$, где φ – вещественное число. Поскольку

такой множитель обычно называют фазовым в методе комплексных амплитуд, то, если у оператора невырожденный спектр, каждому его собственному значению отвечает единственный с точностью до фазового множителя нормированный на единицу собственный вектор.

Но вообще бывают ситуации, когда собственному значению отвечает несколько нормированных на единицу линейно независимых собственных векторов. В этом случае мы должны ввести второй индекс, который обозначим α . Его нет у собственного значения, но он есть у собственного вектора. Тогда (2.7) переписется как

$$\hat{F}|\psi_{f\alpha}\rangle = f|\psi_{f\alpha}\rangle, \quad (2.8)$$

$\alpha = 1, \dots, s_f$, мы нумеруем эти собственные вектора от 1 до максимального числа. У s индекс f , потому что у каждого собственного значения может быть своя кратность вырождения.

При этом количество таких линейно независимых собственных векторов для данного собственного значения мы называем кратностью вырождения для данного собственного значения,

$$\alpha = 1, \dots, s_f \equiv s(f) \quad (2.9)$$

Это свойство очень важно с точки зрения физики. Ведь, если вспомнить аксиому 1, собственные значения для оператора, который в математическом аппарате соответствует конкретной измерительной процедуре, оно выдаёт те числа, которые может выдать наш измерительный прибор. У него на стрелках или на окошечках с цифрами всегда вещественные числа. Комплексное число – это уже как бы измерение двух вещественных характеристик, технически мы можем такое придумать, но это будет уже что-то другое по физическому содержанию.

2) Собственные вектора, принадлежащие разным собственным значениям, ортогональны. То есть скалярное произведение

$$\langle \psi_{f\alpha} | \psi_{f'\beta} \rangle = 0 \quad (2.10)$$

при $f' \neq f$.

Из этого свойства следует, что, если у оператора невырожденный спектр, его система собственных векторов состоит из ортогональных друг другу векторов. И, отнормировав их на единицу, мы сразу получим ортонормированную систему векторов в нашем пространстве:

$$\langle \psi_f | \psi_{f'} \rangle = \delta_{ff'} \quad (2.11)$$

В этом случае не нужно вводить второй индекс как в (2.8), так как все собственные значения невырождены. И, например, для оператора с дискретным спектром

$$\langle \psi_{f\alpha} | \psi_{f'\beta} \rangle = \delta_{ff'} = \delta_{\alpha\beta} \quad (2.12)$$

$\delta_{ff'}$ – символ Кронекера, который равняется 1 при совпадающих индексах и 0 при несовпадающих.

Если же у оператора вырожденный спектр, вспоминая линейную алгебру, это всё равно не мешает получить ортонормированную систему из его собственных векторов в нашем гильбертовом пространстве. По крайней мере, при конечных кратностях вырождения всех собственных значений (2.9) все вектора, принадлежащие данному собственному значению, могут быть записаны как линейные комбинации s_f независимых собственных векторов. То есть они образуют линейное подпространство нашего пространства H размерностью s_f . И в нём мы всегда, если $s_f > 1$, можем провести процедуру ортогонализации, например, по Шмидту. То есть сначала берём первый вектор, нормируем его на единицу, потом из второго вектора выделяем часть, перпендикулярную первому, нормируем её на единицу, и т.д. Эта процедура позволяет получить такую же ортонормированную систему векторов

$$\langle \psi_{f\alpha} | \psi_{f'\beta} \rangle = \delta_{ff'} \delta_{\alpha\beta} \quad (2.13)$$

3) Система собственных векторов любого эрмитова оператора \hat{F} полна в H . То есть мы всегда можем любой вектор из H представить в виде линейной комбинации собственных векторов какого-то эрмитова оператора. А если соединить эту возможность со следствием из свойства 2), можно сделать вывод, что в H всегда существует полный ортонормированный базис, составленный из собственных векторов заданного эрмитового оператора \hat{F} .

Из этого следует, что для любого вектора $|\psi\rangle$ из нашего гильбертова пространства существует разложение по собственным векторам, нормированным на единицу и ортогонализированным, когда уже выполняется условие ортонормированности данной системы (2.11) или (2.12). При этом из-за того, что наше пространство евклидово, коэффициент разложения будет скалярным произведением $\langle \psi_{f\alpha} | \psi \rangle$. То есть

$$|\psi\rangle = \sum_{f\alpha} \langle \psi_{f\alpha} | \psi \rangle |\psi_{f\alpha}\rangle \quad (2.14)$$

А в соответствии с аксиомой 2, когда мы производим измерение над квантовым объектом в любом начальном состоянии $|\psi\rangle$, получаем в качестве результата измерения собственное значение с вероятностью, которая как раз квадрат модуля скалярного произведения $\langle \psi_{f\alpha} | \psi \rangle$.

Из этого мы сразу видим несколько результатов. Сумма вероятностей получить хоть одно какое-то значение – это сумма квадратов модулей выражений $\langle \psi_{f\alpha} | \psi \rangle$. Как всегда в евклидовых пространствах, сумма квадратов модулей координат в полном ортонормированном базисе даёт норму вектора $|\psi\rangle$. А по аксиоме 1 физически реализуемым состояниям квантовой системы отвечают нормированные на единицу собственные вектора гильбертова пространства. Поэтому для любого физически реализуемого состояния, в котором объект находился до измерений, сумма вероятностей реализации всех возможных результатов измерений равна единице. То есть

математический аппарат не противоречит естественной логике описания физических процессов.

И в целом, мы фактически приходим к выводу, что любой эрмитов оператор в H определяет какую-то процедуру измерения. Если \hat{F} определён, то, решив для него спектральную задачу, мы можем сказать, какие результаты в этой измерительной процедуре могут быть получены с какими вероятностями. И напротив, если определено, какие результаты могут быть получены с какими вероятностями, мы можем построить соответствующий эрмитов оператор, который эту процедуру описывает.

Тогда сформулируем второе следствие следующим образом. Напомним несколько определений. Мы на самом деле можем отобразить пространство наших кет-векторов $|\psi\rangle$ в некое пространство, которое будем называть пространством сопряжённых бра-векторов $\langle\psi|$. Будем по определению считать, что эти вектора связаны операцией эрмитова сопряжения

$$\langle\psi| \equiv (|\psi\rangle)^+ \quad (2.15)$$

Она не для операторов, как мы её раньше вводили. Хотя во многих практических реализациях увидим, что то, как мы производим эрмитово сопряжение объектов, отвечающих векторам, и объектов, отвечающих операторам, одно и то же.

Но пока мы говорим об общей конструкции, так что это, по сути, отдельное определение, которое можно ввести. И получается, что вектор $\langle\psi|$, сопряжённый к вектору $|\psi\rangle$, как раз используется для построения скалярного произведения в (2.14). Действительно, чтобы построить скалярное произведение, мы строим сопряжённый вектор $\langle\psi_{f\alpha}|$ и скалярно умножаем его на $|\psi\rangle$.

Тогда, если мы подействуем оператором \hat{F} , а мы пользуемся линейными операторами, на любой вектор $|\psi\rangle$ и подставим выражение (2.14), этот оператор пройдёт через сумму $\sum_{f\alpha}$, через число $\langle\psi_{f\alpha}|\psi\rangle$, подействует на свой собственный вектор и выдаст своё собственное значение. То есть мы получим

$$\hat{F}|\psi\rangle = \sum_{f\alpha} \langle\psi_{f\alpha}|\psi\rangle f|\psi_{f\alpha}\rangle \quad (2.16)$$

Если теперь вынести из этой суммы объект, не зависящий от $f\alpha$, то есть сам произвольный вектор $|\psi\rangle$, мы придём к записи

$$\left(\sum_{f\alpha} f|\psi_{f\alpha}\rangle\langle\psi_{f\alpha}| \right) |\psi\rangle, \quad (2.17)$$

В ней фактически возникает сумма по всем собственным векторам нашего эрмитова оператора, которая алгебраически есть сам оператор \hat{F} , потому что её действие на произвольный вектор $|\psi\rangle$ нашего гильбертова пространства неотличимо от его действия.

Соответственно, запись $|\psi_{f\alpha}\rangle\langle\psi_{f\alpha}|$ мы теперь воспринимаем как оператор, при действии которого на произвольный вектор сопряжённый оператор $\langle\psi_{f\alpha}|$ образует с ним скалярное произведение, и мы получаем это произведение, умноженное на наш базисный вектор $|\psi_{f\alpha}\rangle$. Это очень напоминает операцию проектирования в обычном координатном пространстве. Если мы хотим сформулировать вектор \vec{r} на ось x , возьмём в качестве координаты скалярное произведение $\vec{e}_x \cdot \vec{r}$ и умножим его на сам вектор \vec{e}_x :

$$(\vec{e}_x \cdot \vec{r})\vec{e}_x = \vec{r}_x \quad (2.18)$$

Так что $|\psi_{f\alpha}\rangle\langle\psi_{f\alpha}|$ в (2.17) логично назвать оператором проектирования на базисное состояние $\psi_{f\alpha}$. Далее будем его обозначать как

$$\hat{p}_{f\alpha} = |\psi_{f\alpha}\rangle\langle\psi_{f\alpha}| \quad (2.19)$$

Видно, что любой эрмитов оператор, не зная его самого, но зная, какие хотим у него видеть собственные вектора и собственные значения, мы немедленно восстановим, записав сумму (2.17). Это выражение называется спектральным представлением нашего оператора. Мы, как бы зная спектр, все собственные значения и вектора, так что они образуют некий полный ортонормированный базис, реконструируем оператор с помощью спектрального разложения.

И действительно приходим к мысли, что можем логично установить взаимно однозначное соответствие между измерительными процедурами и эрмитовыми операторами. То есть мы не зря так сформулировали аксиому 2, у нас не возникнет математических проблем, когда мы будем реализовывать описание измерительных процедур в соответствии с ней, если будем пользоваться этим математическим аппаратом.

4) Два эрмитовых оператора \hat{F} и \hat{G} имеют общую полную в гильбертовом пространстве H систему собственных векторов тогда и только тогда, когда их коммутатор

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0 \quad (2.20)$$

Напомним, что знакомое из линейной алгебры обозначение

$$[\hat{F}, \hat{G}] \equiv \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} \quad (2.21)$$

Когда мы перешли к этому свойству, как в линейной алгебре, подразумеваем, что определили произведение операторов. Мы говорим, что на произвольный вектор $|\psi\rangle$ можем подействовать произведением $\hat{F}\hat{G}$ и произведением $\hat{G}\hat{F}$. И знаем, что произведение операторов в линейных пространствах логично определяется как последовательное действие. То есть у нас $\hat{F}\hat{G}$ – оператор, в котором сначала \hat{G} действует на вектор, стоящий справа от него, а потом \hat{F} действует на то, что получилось. А для $\hat{G}\hat{F}$ наоборот:

$$(\hat{F} \cdot \hat{G})|\psi\rangle \equiv \hat{F}(\hat{G}|\psi\rangle) \quad (2.22)$$

Как мы знаем из линейной алгебры, такое произведение операторов вообще некоммутативно, то есть результат действия $\hat{F}\hat{G}$ не обязан совпадать с результатом действия $\hat{G}\hat{F}$. Поэтому логично вводится величина, являющаяся разностью произведения операторов в разных порядках.

Первой дополнительной задачей будет вспомнить доказательство утверждения (2.22). Оно легко доказывается в сторону того, что, если у операторов \hat{F} и \hat{G} существует общая полная система собственных векторов, то их коммутатор равен нулю. Достаточно просто ввести эту систему, сказать, что из неё можно построить некий полный ортонормированный базис, раз она полная в H и их можно ортогонализировать при совпадающих, если он там не единственный определённый этим требованием, что \hat{F} и \hat{G} , действуя на него, дают свои собственные значения, умноженные на тот же самый вектор.

А наоборот (2.22) легко доказывается, только если оба оператора с невырожденным спектром. Если есть вырождение, уже сложнее. Но надо будет доказать в общем случае, чтобы доказательство работало и для операторов \hat{F} и \hat{G} с вырожденными спектрами.

Если мы знаем свойство (2.21) и выполняется выражение (2.20), то существует полный ортонормированный базис из векторов, которые являются общими собственными векторами этих двух операторов. Мы будем обозначать его $\{|\psi_{fg}\rangle\}$.

В этом случае любой вектор можно записать как

$$|\psi\rangle = \sum_{fg} \langle\psi_{fg}|\psi\rangle |\psi_{fg}\rangle \quad (2.23)$$

Здесь мы подразумеваем, что действуем разумно. Например, если оказалось, что каждой паре fg отвечает всего один вектор, $|\psi_{fg}\rangle$, считаем, что суммирование идёт по любому из индексов, ведь тогда значение одного индекса однозначно определяет значение второго. (2.23) записано для общего случая.

Следствия свойств эрмитовых операторов

Начнем с предшествующего обсуждения. Если измерение наблюдаемой \hat{F} в состоянии $|\psi\rangle$ выдаёт некий набор собственных значений f с вероятностями ω_f , тогда при многократных измерениях происходит набор статистики. И можно вычислить математическое ожидание или среднее значение по ожидаемой статистике \hat{F} в заданном состоянии. Если мы много раз готовим состояние $|\psi\rangle$ и много раз производим измерения, частоты реализации в соответствии с предельными теоремами должны стремиться к этим вероятностям. Тогда среднее по статистике измерений, когда статистика достаточная, должно стремиться к математическому ожиданию, которое будет естественным образом записываться как

$$\bar{F}_\psi = \sum_f \omega_f f \quad (2.24)$$

С другой стороны, можно вспомнить, что ω_f – квадрат модуля соответствующего скалярного произведения $\langle \psi_f | \psi \rangle$ из (2.16). Квадрат модуля можно всегда записать как произведение сопряжённого комплексного числа на само число, а сопряжённое скалярное произведение – как скалярное произведение с переставленными сомножителями. Тогда из (2.23) получим

$$\sum_{f\alpha} f \langle \psi | \psi_{f\alpha} \rangle \langle \psi_{f\alpha} | \psi \rangle, \quad (2.25)$$

Здесь будет уже сумма по $f\alpha$, так как ω_f мы будем писать как сумму для всех состояний, вероятностей выпадения каждого состояния, принадлежащего данному собственному значению.

Можно опять вынести за знак суммы элементы конструкции, которые не зависят от $f\alpha$. То, что останется в середине, будет в точности спектральное разложение оператора \hat{F} . То есть среднее значение (2.24) вычисляется через скалярное произведение

$$\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \quad (2.26)$$

Реально это скалярное произведение $\langle \psi |$ на то, что получается из действия оператора \hat{F} на $|\psi\rangle$. Но тем, что мы написали \hat{F} отдельно бра- и кет- вектора, подчёркиваем, что здесь данная величина не зависит от перестановки этих одинаковых векторов. Опять же, оператор \hat{F} эрмитов, так что перебрасывание его действия справа налево тоже ничего в такой конструкции не изменит.

Раз мы умеем считать среднее, можно определить и дисперсию. Дисперсия – это центральный момент второго порядка, то есть среднее значение квадрата отклонения от среднего. Вообще можно определить центральный момент любого порядка n как среднее значение n -й степени отклонения от среднего. В разделе математической статистики говорилось, что набор центральных моментов распределения полностью определяет само распределение. Таким образом, производя измерение и набрав достаточную статистику, то есть с нужной точностью определив среднее значение, дисперсию и необходимое количество центральных моментов распределения, можно восстановить его само по результатам эксперимента.

Чаще всего мы будем пользоваться этими соотношениями напрямую, то есть по заданному вектору состояния и оператору определять среднее значение, дисперсии и т. д. В частности, можно определить дисперсию оператора \hat{F} в состоянии ψ через усреднение по данному состоянию квадрата разности \hat{F} и \bar{F}_ψ . Или как разность среднего значения от квадрата наблюдаемой и квадрата среднего по нему же. То есть

$$D_\psi F \equiv \overline{(\hat{F} - \bar{F}_\psi)^2}_\psi = \overline{F^2}_\psi - \bar{F}_\psi^2, \quad (2.27)$$

где первое выражение – определение дисперсии, а второе – формула, по которой её часто удобно считать.

После введения этого возникает интересный физический результат. Пусть есть два эрмитовых оператора \hat{F} и \hat{G} , и их коммутатор

$$[\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{C}, \quad (2.28)$$

где \hat{C} – некий оператор. Случай, когда они коммутируют, то есть $\hat{C} = 0$, частный для данного рассмотрения, так что не придётся отдельно рассматривать случаи с коммутирующими и некоммутирующими операторами.

Мы здесь выделили множитель i , так как в линейной алгебре доказывали, что коммутатор двух эрмитовых операторов является антиэрмитовым оператором, то есть при эрмитовом сопряжении переходит в минус самого себя. i это просто число, оператор, кратный единичному, который при эрмитовом сопряжении переходит сам в себя. Но эрмитово сопряжение, как мы видели, содержит комплексное сопряжение, поэтому при комплексном сопряжении множителя i выскочит $-i$. Поэтому то, что при эрмитовом сопряжении $[\hat{F}, \hat{G}]$ получается минус то же самое, как раз означает, что оператор \hat{C} будет эрмитов,

$$\hat{C}^+ = \hat{C} \quad (2.29)$$

Если бы мы не выделили множителя i , было бы $\hat{C}^+ = -\hat{C}$.

Определим в гильбертовом пространстве H новый оператор, который обозначим \hat{L} . Он зависит от выбранного вектора $|\psi\rangle$. Для любого вектора из нашего гильбертова пространства его можно определить как

$$\hat{L} = (\hat{F} - \bar{F}_\psi) + iz(\hat{G} - \bar{G}_\psi), \quad (2.30)$$

где $z \in \mathbb{R}^1$, то есть произвольное вещественное число. Для этого оператора можно посчитать \hat{L}^+ . Поскольку \hat{F} и \hat{G} эрмитовы операторы, а их средние \bar{F}_ψ и \bar{G}_ψ вещественные числа, как мы убедились, эрмитово сопряжение сведётся к изменению i на $-i$, и будет

$$\hat{L}^+ = (\hat{F} - \bar{F}_\psi) - iz(\hat{G} - \bar{G}_\psi) \quad (2.31)$$

И тогда можно вычислить оператор, являющийся произведением $\hat{L}^+\hat{L}$. При iz , так как числа \hat{F}_ψ и \hat{G}_ψ являются вещественными и при сопряжении не меняются, $\bar{F}_\psi\bar{G}_\psi - \bar{G}_\psi\bar{F}_\psi$ всегда 0, числа коммутируют. Более того, линейные по операторам \hat{F} и \hat{G} конструкции при таком вычитании тоже все сократятся. Не сократится только $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$, а это и есть нам коммутатор, который равен по условию (2.28) $i\hat{C}$. Тогда

$$\hat{L}^+\hat{L} = (\hat{F} - \bar{F}_\psi)^2 + z^2(\hat{G} - \bar{G}_\psi)^2 + iz[\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}] = (\hat{F} - \bar{F}_\psi)^2 + z^2(\hat{G} - \bar{G}_\psi)^2 - z\hat{C} \quad (2.32)$$

Для второго слагаемого из (2.32) среднее от $(\hat{G} - \bar{G}_\psi)^2$ – это дисперсия наблюдаемой G в состоянии ψ . Для \hat{C} из третьего мы получим среднее значение наблюдаемой C – это эрмитов оператор, значит, тоже какая-то наблюдаемая, в состоянии ψ . А среднее от первого слагаемого выдаст дисперсию в состоянии ψ наблюдаемой F . То есть конструкция $\langle\psi|\hat{L}^+\hat{L}|\psi\rangle$ записывается через дисперсии и средние операторов, с которыми мы работали, как

$$\langle \psi | \hat{L}^+ \hat{L} | \psi \rangle = z^2 \cdot D_\psi G - z \hat{C}_y + D_\psi F \quad (2.33)$$

При этом мы знаем, что её можно построить как скалярное произведение вектора самого на себя $\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle \geq 0$, если будем воспринимать $|\tilde{\psi}\rangle$ как образ вектора $|\psi\rangle$ при действии оператора \hat{L}

$$|\tilde{\psi}\rangle \equiv \hat{L}|\psi\rangle \quad (2.34)$$

Ведь $\langle \psi | \hat{L}^+$ – в точности сопряжённый вектор к $|\tilde{\psi}\rangle$. А скалярный квадрат любого вектора в евклидовом пространстве ≥ 0 , причём равен нулю только если $|\tilde{\psi}\rangle$ нулевой вектор. Поэтому конструкция (2.28) тоже ≥ 0 и равна нулю только когда

$$\hat{L}|\psi\rangle = 0, \quad (2.35)$$

то есть $|\psi\rangle$ выбран так, что, как говорят математики, уничтожается оператором \hat{L} . Это означает, что, когда мы подействовали данным оператором на этот вектор, он превратился в нулевой. А во всех остальных случаях выражение (2.33) положительное.

С другой стороны, это условие выполняется при любых $z \in \mathbb{R}^1$, а в (2.28) стоит квадратный трёхчлен с явно положительным коэффициентом при z^2 , дисперсия не бывает отрицательной. Поэтому это парабола ветвями вверх, и она целиком лежит выше оси абсцисс, только если дискриминант соответствующего квадратного уравнения неотрицателен. Ещё есть случай равенства нулю, так что дискриминант

$$\{C_\psi\}^2 - 4D_\psi F \cdot D_\psi \cdot G \leq 0 \quad (2.36)$$

Иными словами, мы обнаруживаем, что для двух наблюдаемых \hat{F} и \hat{G} , коммутирующих, согласно (2.28), на $i\hat{C}$, где C – новая наблюдаемая, являющаяся их коммутатором, из которой вытасчен множитель i , произведение дисперсий для любого состояния ψ

$$D_\psi \hat{F} \cdot D_\psi \hat{G} \geq \frac{|\bar{C}_\psi|^2}{4} \quad (2.37)$$

(2.37) – общая конструкция соотношения неопределённостей. Мы приходим к выводу, что, если коммутатор двух операторов отличен от нуля, в любом состоянии, которое не уничтожается оператором \hat{L} , то есть у которого $\bar{C}_\psi \neq 0$, произведение дисперсий ограничено снизу положительным числом. То есть ни одна из дисперсий никогда не обратится в ноль.

Но ведь могут быть состояния, у которых дисперсия данной наблюдаемой точно равна нулю. Такое состояние описывалось собственным вектором, для него \bar{F}_ψ^2 будет \bar{F}_ψ^2 , и $D_\psi \hat{F} \equiv 0$. Но это означает, что, если мы попытаемся записать дисперсии для собственного вектора одного из операторов \hat{F} и \hat{G} , дисперсия другого должна стать неограниченно большой, стремиться к бесконечности. То есть в этом случае с собственными векторами второго оператора что-то не так. Чаще всего будет оказываться,

что они не нормированы на единицу и не являются физически реализуемыми состояниями нашей системы.

Эту ситуацию можно описать на языке физики, говоря, что наблюдаемые \hat{F} и \hat{G} , которые между собой не коммутируют, одновременно неизмеримы. Если мы произвели измерение наблюдаемой \hat{F} , загнали квантовую систему в состояние, описываемое собственным вектором этой наблюдаемой, то ничего не знаем про возможные результаты измерения оператора \hat{G} в этом состоянии наблюдаемой \hat{G} . Если же мы произведём такое измерение, то загоним систему уже в состояние, описываемое собственным вектором оператора \hat{G} , и полностью уничтожим информацию о предыдущем измерении наблюдаемой \hat{F} . То есть мы действительно приходим к физической ситуации, которую называют одновременной неизмеримостью двух наблюдаемых.

И, напротив, мы обнаруживаем, что если два оператора коммутируют, то есть если их коммутатор равен нулю, такого ограничения нет. При конечной дисперсии одной наблюдаемой дисперсия другой вполне может равняться нулю. И в целом у них существует полный ортонормированный базис из общих собственных векторов, то есть есть состояния, в которых мы можем определить обе наблюдаемые. При этом измерение G не испортит то, что мы уже загнали систему в собственный вектор оператора \hat{F} . Смысл утверждения, что обе наблюдаемые одновременно измеримы, и состоит в том, что существует состояние, где они одновременно имеют нулевую дисперсию и, соответственно, определённое значение.

Таким образом, из математических свойств, связанных с нашими операторами, мы вывели целый ряд физических следствий.

Принцип соответствия

Вспомним снова о системе аксиом. Пока мы ввели только две, хотя всего их должно быть четыре. Третья будет аксиомой соответствия, которая позволит нам строить конкретные операторы для величин, имеющих классический аналог. То есть таких, у которых мы уже знаем физическое содержание на примере классической системы. По традиционному замыслу теоретиков квантование, в частности каноническое – это процедура, позволяющая из классической версии некоторой динамической системы построить её квантовую версию. Поэтому мы подразумеваем, что у аналогичной классической системы уже построили некое классическое описание.

Мы будем более конкретно считать, что построили для неё гамильтоново описание. Вспомним классическую гамильтонову динамику. Для каждой классической системы введён набор величин x_α, p_β , которые описывают нашу квантовую систему. При этом p_β являются обобщёнными импульсами, канонически сопряжёнными обобщённым координатам x_α . Соответственно, если мы, например, запишем для них скобки Пуассона, получим

$$\{x_\alpha, p_\beta\} = \delta_{\alpha\beta} \quad (2.38)$$

В гамильтоновой динамике все классические наблюдаемые записываются через обобщённые координаты, обобщённые импульсы и время, как

$$F(x_\alpha, p_\beta, t) \quad (2.39)$$

Функция Гамильтона, которая характеризует гамильтонову динамику, то есть наблюдаемая энергия, выделена только тем, что через неё в гамильтоновой динамике записываются уравнения движения, то есть выражения для производных координат и импульсов.

Мы хотим это сохранить, чтобы была связь между построенной квантовой теорией и старой классической и работал методологический принцип соответствия, сформулированный в своё время Бором, что более общая теория в некотором предельном случае должна переходить в менее частную. То есть, если мы правильно построили квантовую теорию, когда применим её к классическим системам, где квантовые эффекты слабы и поведение практически классическое, должны получить воспроизведение предсказаний классической динамики. Принцип соответствия – это явное требование согласования разных наших теорий, описывающих одни и те же реальные объекты.

Решающий шаг мешает сделать то, что наблюдаемые в квантовой теории являются не числовыми функциями числовых переменных, а операторами. А поскольку мы строим операторы наблюдаемых именно как линейные эрмитовы в гильбертовых пространствах, то для любого набора операторов можем строить их линейные комбинации. Такая линейная комбинация снова есть оператор в том же гильбертовом пространстве, естественным образом определённый. Поскольку в самом пространстве мы умеем складывать вектора и умножать на комплексные числа, нам не понадобится ничего придумывать заново.

Мы ввели перемножение двух операторов как последовательное действие, теперь определим функции от них. Если мы умеем перемножать два оператора, то можем определить квадрат оператора, а дальше умножив квадрат на этот оператор ещё раз, получить его куб и далее по индукции определить любую его степень:

$$\hat{A}^n = \hat{A} \cdot \hat{A}^{n-1}, \quad (2.40)$$

где по определению процедура

$$\hat{A}^2 \equiv \hat{A} \cdot \hat{A}, \quad (2.41)$$

которая была определена ранее.

Более-менее нормальные функции, по крайней мере те, которые можно дифференцировать сколько угодно раз, можно представить в виде ряда Тейлора в разложение по степеням аргумента. Для любой числовой функции $f(x)$, разложимой в ряд Тейлора в окрестности нуля, то есть для которой можно написать

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) x^n, \quad (2.42)$$

мы определяем эту функцию от оператора \hat{A} как

$$f(\hat{A}) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) \hat{A}^n \quad (2.43)$$

Разница в том, что, как мы помним из математического анализа, разложимость функции в ряд Тейлора есть её свойство, устанавливаемое на основании конкретных математических признаков. У нас есть теоремы, которые говорят, какие функции можно в него разложить. Если функция обладает необходимым набором свойств, ряд Тейлора (2.42) для неё не постулируется, а является математическим результатом, который получается вследствие вычислений.

А для функции от оператора мы постулировали, что он определяется как (2.43). Например,

$$e^{\hat{A}} \equiv 1 + \hat{A} + \frac{1}{2} \hat{A}^2 + \frac{1}{6} \hat{A}^3 + \dots, \quad (2.44)$$

и это не свойство данной функции от оператора, а её определение, мы только так и понимаем $e^{\hat{A}}$.

Впрочем, если существует оператор, обратный к данному, который мы определили как \hat{A}^{-1} , если его выдаёт определение и мы можем его построить в нашем гильбертовом пространстве, его честно можно воспринять как минус первую степень нашего оператора. И соответственно, определить перемножением минус вторую, третью и т. д. степени. Тогда можно расширить это определение на все функции, разложимые в ряд Лорана в окрестности нуля. Функций, неразложимых в него, в физических приложениях появляется очень мало. Так что в принципе можно определить функции от операторов в достаточно широком круге функций.

Теперь можно сформулировать аксиому 3 нашей системы аксиом канонического квантования.

Аксиома 3. Аксиома соответствия

Наблюдаемой \hat{F} , которая имеет классический аналог, то есть которую в классической физике можно написать как функцию от координат, импульсов и времени

$$F_{\text{кл}} = F_{\text{кл}}(x_{\alpha}, p_{\beta}, t), \quad (2.45)$$

в квантовой теории, которую мы строим на базе данной системы аксиом, отвечает оператор, равный той же классической функции, но от операторов координат, импульсов и времени

$$\hat{F} = F_{\text{кл}}(\hat{x}_{\alpha}, \hat{p}_{\beta}, t), \quad (2.46)$$

где $\hat{x}_{\alpha}, \hat{p}_{\beta}$ – линейные эрмитовы операторы в H , удовлетворяющие каноническим коммутационным соотношениям. Термин «канонический», который дал название всей процедуре квантования, взялся именно отсюда.

Коммутатор

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}, \quad (2.47)$$

\hbar связано с h соотношением

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (2.48)$$

И ту, и другую величину называют постоянной Планка. Исторически Планк в своей первой работе назвал этим термином именно константу \hbar . Теоретики её любят больше, чем h , за то, что у неё во многих случаях более интересный физический смысл. Мы будем часто встречать ситуации, где \hbar будет играть роль физически осмысленной величины в конкретных задачах. Экспериментаторы же любят \hbar больше, чем h , за её значение. Если $h \approx 6,6... \cdot 10^{-34}$ в единицах системы СИ, то $\hbar \approx 1,05... \cdot 10^{-34}$, множитель почти единица, и надо запоминать только степень, да и подставлять её в оценочные результаты гораздо удобнее. Но h тоже имеет свои преимущества, поэтому сохранились обе константы.

Мы сделали важный шаг (2.47), где задали операторы их коммутационным соотношением. С точки зрения математика, очень нетривиальный вопрос, насколько однозначно определены эти два оператора координаты и импульса. Мы здесь ничего доказывать не будем, но заметим, что в любом конкретном пространстве, то есть в любой конкретной реализации гильбертова пространства, естественным образом можно определить один из этих операторов, тогда второй будет определяться из системы коммутационных соотношений практически однозначно. В дальнейшем мы будем использовать общепринятый термин «представление гильбертова пространства» как некое конкретное математическое пространство, например, определённое функциональное или алгебраическое с конкретными элементами. Когда мы хотим реализовать абстрактное гильбертово пространство в виде такого конкретного, будем говорить, что выбрали представление нашего гильбертова пространства, необходимое в этом случае.

«Практически» означает, что, если мы действительно требуем линейности оператора, эрмитовости, он выстраивается однозначно. Математиков довольно долго интересовал вопрос, можно ли придумать какие-то другие реализации, например, если уберём свойство линейности и будем строить нелинейные. Можно ли предположить другую реализацию у алгебры операторов – а коммутационные соотношения, как говорят математики, как раз определяют их алгебру. Они активно исследовали эти нелинейные реализации, но физики не очень прониклись данной идеей. В большинстве физических исследований работают именно с линейными реализациями, и тут в любом конкретном представлении гильбертова пространства упомянутые операторы всегда выстроятся однозначно. Но теория представлений будет одной из основных тем следующей лекции, и там мы об этом поговорим чуть подробнее. А пока просто сообщаем, что в

действительности в нашей системе аксиом эта встраивается без противоречий, и мы всегда можем построить реализацию (2.47).

Есть ещё одно следствие из данной аксиомы. Если мы посмотрим на общее соотношение неопределённостей, обнаружим, что коммутатор операторов координаты и импульса, относящихся к одной степени свободы, когда $\beta = \alpha$,

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha] = i\hbar, \quad (2.49)$$

то есть оператор, кратный единичному.

То есть здесь оператор \hat{C} – просто постоянная Планка, умноженная на единичный оператор. Понятно, что её среднее значение в любом состоянии будет давать как раз постоянную Планка. У единичного оператора среднее значение в любом состоянии единица, это легко проверить.

И тогда произведение дисперсии координаты и дисперсии соответствующего импульса для любого состояния ψ

$$D_\psi x_\alpha \cdot D_\psi p_\beta \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.50)$$

Это одно из соотношений неопределённости Гайзенберга, неопределённости координаты и импульса. Оно напрямую указывает, что состояние с определённой координатой у микрочастицы, как и состояние с определённой проекцией импульса, физически нереализуемо, потому что в этом случае одна из дисперсий ноль, а другая бесконечность. Получается ненормируемое состояние.

Предположим, что существует измерительная процедура, которая позволяет точно измерить проекцию импульса p_x некой квантовой частицы. Если мы построили такой прибор и произвели над частицей измерение, он должен загнать её в состояние с определённой проекцией импульса p_x , то есть с нулевой дисперсией $D_\psi p_x$. То есть в состоянии, в котором дисперсия координаты бесконечно велика. С точки зрения физика это означает, что частица равномерно размазана по всей физической Вселенной. Тогда с точки зрения экспериментатора она исчезла, потому что вероятность, что он померит у неё что-то ещё каким-нибудь другим прибором, порядка отношения объёма прибора к объёму Вселенной и в пределе неограниченной Вселенной стремится к нулю. Такие рассуждения заставляют нас заявить, что на самом деле координата и импульс не являются наблюдаемыми, которые можно точно измерить у любой реально существующей квантовой частицы.

То же самое получается, если мы предположим, что существует процедура, которая позволяет измерить координату. Этой процедурой мы локализуем частицу в точке, но при этом неопределённость импульса будет бесконечно велика, и спустя бесконечно малое время мы вообще не будем знать, где частица окажется.

Из этого следует вывод, что есть наблюдаемые, которые с точки зрения физики вообще являются нормальными физическими характеристиками системы, но с точки

зрения нашей аксиоматики не отвечают никаким практически реализуемым измерительным процедурам. Запомним этот момент, ведь когда мы будем изучать теорию представлений, сразу увидим, с чем такая неопределённость в их описании связана. Отталкиваясь от этого, мы выясним особенности подобной наблюдаемой вообще.

Полный набор наблюдаемых

Осталось таким образом ввести ещё одно интересное определение. Среди свойств эрмитовых операторов мы написали, что два оператора имеют общую полную систему собственных векторов тогда и только тогда, когда они коммутируют. А что будет, если мы захотим построить три оператора наблюдаемых, имеющих общую полную систему собственных векторов, или четыре, или N ? Всегда ли можно построить нужное число таких операторов наблюдаемых?

Математик скажет, что да. $\hat{F}, \hat{F}^2, \hat{F}^3, \dots, \hat{F}^{N-1}$ – это N наблюдаемых, имеющих общую полную систему собственных векторов, потому что это полная система собственных векторов самого оператора \hat{F} . Но вот построить N функционально независимых наблюдаемых, у которых есть общая полная система собственных векторов, уже возможно не всегда.

Можно догадаться, что, если есть две одновременно измеримые наблюдаемые, и они функционально независимы, то есть каждое измерение приносит состоянию новую информацию, рано или поздно случится ситуация, когда мы зафиксируем состояние однозначно, соберём о нём всю информацию.

То есть для пространства чистых состояний, гильбертова пространства H конкретной системы, число N операторов функционально независимых наблюдающих, имеющих общую полную систему собственных векторов, зависит от конструкции пространства. Максимально возможное N , которое обозначим как S , как часто делают в динамике, определяется тем, что, когда мы берём эти S операторов $\hat{F}_1 \dots \hat{F}_S$ и строим их общую полную систему собственных функций, а потом процедурой ортогонализации строим из неё полный ортонормированный базис, набор векторов $\{|\psi_{f_1 \dots f_S}\rangle\}$, нумеруемых собственными значениями наших операторов, оказывается, что все базисные элементы этого базиса определены однозначно с точностью до фазового множителя $e^{i\varphi}$. Переопределение начальной фазы базисного состояния не меняет физического содержания базиса. Это вектора состояний, в которые можно загнать нашу систему одновременным измерением всех S наблюдаемых.

Получается, что, если мы измерили эти S наблюдаемых, то знаем вектор состояния нашей системы с точностью до фазового множителя. Это единственный с точностью до фазового множителя общий вектор этих S наблюдаемых, отвечающий данному набору собственных значений.

Возникает некий способ идентификации состояний, когда S естественно назвать числом степеней свободы нашей квантовой системы. Мы будем называть такой набор

наблюдаемых $\{\hat{F}_1 \dots \hat{F}_S\}$, если он существует для данной системы, полным набором наблюдаемых (ПНН) для квантовой системы, пространство чистых состояний которой мы сконструировали.

Это работает и наоборот. Если есть квантовая система с S степенями свободы, нужно конструировать её пространство чистых состояний так, чтобы в нём можно было определить полный набор наблюдаемых из S операторов.

И второе замечание, поскольку все наблюдаемые одновременно измеримы, все их операторы должны попарно коммутировать. То есть для любых i, j в полном наборе наблюдаемых

$$[\hat{F}_i \cdot \hat{F}_j] = 0 \quad (2.51)$$

Математик скажет, что это избыточная информация, она следует из данного определения. А напротив, если мы определим полный набор наблюдаемых как максимально широкий набор попарно коммутирующих функционально независимых наблюдаемых, мы определим то же самое. И получим такой набор наблюдаемых, у которого каждому набору его собственных значений отвечает только один с точностью до фазового множителя их собственный вектор.

В функциональных пространствах, которые изучались в курсе математики, векторами как раз будут являться функции, поэтому термины собственный вектор и собственная функция обозначают одно и то же. Но когда мы говорим про собственный вектор, ведём речь о произвольном пространстве, а когда про собственную функцию, то о конкретном представлении нашего пространства в виде какого-то функционального.

К понятию полного набора наблюдаемых мы будем обращаться почти всегда, оно не будет нужно только при рассмотрении самых простых квантовых систем с одной степенью свободы. Там полный набор наблюдаемых состоит из одной наблюдаемой, одного эрмитова оператора. А для квантовых систем с несколькими степенями свободы без этого понятия будет невозможно строить реальные физические описания эффектов.

Лекция 3. Теория представлений

В прошлый раз мы познакомились с формальной структурой математического аппарата, а сегодня будем продолжать нагружать его физическим смыслом.

Представления

Говоря «представление», мы будем стараться всегда иметь в виду некий конкретный способ реализации абстрактного гильбертова пространства. Вообще любую геометрическую задачу можно решать на базе своего геометрического воображения, и даже в квантовой теории такие вещи иногда возможны. И в принципе такие регулярные способы решения подобных задач обычно идут через метод координат.

В гильбертовых пространствах его тоже можно эффективно использовать. И когда мы хотим построить конкретное математическое пространство, которое будет реализацией абстрактного гильбертова, нужного нам как пространство чистых состояний заданной квантовой системы, по сути, будем пользоваться именно им.

У нас есть понятие «полный набор наблюдаемых» (ПНН). Для системы с S степенями свободы это набор S операторов $\hat{F}_1.. \hat{F}_S$, которые попарно коммутируют и функционально независимы, причём максимально широкий. И, как следствие, для каждого набора собственных значений этих операторов существует только один их общий собственный вектор с точностью до выбора постоянного фазового множителя. То есть данному полному набору наблюдаемых в гильбертовом пространстве H отвечает построенный единственным образом с точностью до переопределения начальных фаз полный ортонормированный базис $\{|\psi_{f_1..f_S}\rangle\}$ из состояний, которые мы как раз нумеруем данными собственными значениями операторов.

Мы можем взять любой вектор $|\psi\rangle$ из нашего гильбертова пространства и разложить по этому базису. Коэффициентами разложения будут скалярные произведения базисных элементов на исследуемый вектор, и оно будет иметь вид

$$|\psi\rangle = \sum_{f_1..f_S} \langle \psi_{f_1..f_S} | \psi \rangle |\psi_{f_1..f_S}\rangle \quad (3.1)$$

Видно, что данное соотношение устанавливает взаимно однозначное соответствие между векторами гильбертова пространства и набором координат разложения по заданному базису. Набор координат разложения $f_1..f_S$ – вещественные числа, скалярное произведение – комплексное число. Поэтому выражение (3.1) на самом деле определяет комплекснозначную функцию вещественных переменных

$$\Psi(f_1..f_S), \quad (3.2)$$

где $\Psi \in \mathbb{C}$, а $f_1..f_S$ – это пространство вещественных чисел с размерностью S , \mathbb{R}^S .

Мы будем называть эту функцию волновой функцией (ВФ) состояния $|\psi\rangle$ в $f_1..f_S$ -представлении, $|\psi\rangle$ – нормированный на единицу вектор гильбертова пространства. S

данным термином мы уже сталкивались, когда изучали введение в квантовую теорию, например, с волновыми функциями в координатном представлении. Возможно, тогда их назвали просто координатными волновыми функциями. Нам известно о существовании и других волновых функций, например, импульсных.

А сейчас мы ввели общее определение для всех возможных случаев и квантовых систем. Мы всегда строим некое пространство, которое будет как бы изображением нашего гильбертова пространства в силу взаимно однозначного соответствия (3.1). Причём это соответствие будет ещё и правильно передавать метрику. Скалярное произведение двух любых векторов можно посчитать через волновые функции. Получится хорошо знакомая запись через координаты, но с поправкой на то, что пространство над полем комплексных чисел. Поэтому будет

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \sum_{f_1 \dots f_S} \psi_1^*(f_1 \dots f_S) \psi_2(f_1 \dots f_S) \quad (3.3)$$

Чтобы понимать, как конкретно устроены эти пространства, мы должны чётко различать два случая. Спектр наших наблюдаемых может быть различным. Мы говорили, что на самом деле спектр любых физически измеримых величин, то есть наблюдаемых для локализованной в пространстве квантовой системы, всегда дискретен. Поэтому писать в (3.3) сумму по $f_1 \dots f_S$ разумно, ведь мы предполагаем, что в этой записи действительно есть некий дискретный набор квантовых чисел. И тогда то, что мы назвали волновыми функциями (3.2) в действительности тоже некий дискретный набор, последовательность, занумерованная S индексами.

Поскольку базис счётный, эту последовательность всегда можно изобразить в какой-то матричной форме, возможно, даже в виде одного столбика. В любом случае, это некая дискретная структура. Но мы часто изучаем и наблюдаемые с непрерывным спектром. Они появляются в описании довольно естественным образом, потому что мы рассматриваем всякие предельные переходы, когда дискретность считается настолько плотной, что мы переходим к пределу непрерывного спектра.

Действительно, пусть мы имеем некую теорию точечной квантовой частицы, то есть предполагаем, что такой объект существует. Говоря «точечный», мы фактически полагаем, что можно пренебречь его размерами и считать, что его положение в пространстве однозначно описывается координатами некоторой точки. Если предположить, что у нас существует прибор, измеряющий эти координаты в пространстве, то у этого прибора должен быть непрерывный спектр, если мы считаем само пространство, в котором всё происходит, непрерывным. То есть если там нет минимального возможного расстояния или, как выражаются физики-теоретики, математики некой фундаментальной длины, кванта пространства.

Да, можно встать на точку зрения, что пространство тоже квантованное, и тогда будет немного непривычная, но вполне цельная картина с дискретным спектром оператора координаты. Например, в классической динамике мы привыкли считать

координату непрерывной, и во многих квантовых задачах вполне разумно перейти по ней к пределу непрерывного спектра. Мы часто будем так делать, считая, что у нас существуют точечные частицы, а пространство делимо до бесконечности. Как только мы это сказали, спектр оператора координаты будем считать непрерывным.

Итак, спектр $\hat{F}_1 \dots \hat{F}_S$ может быть дискретным, и это приведёт к тому, что волновые функции – матричные конструкции, матрицы или даже столбцы, которые тоже разновидность матричной конструкции. А может быть непрерывным, и тогда волновые функции – просто настоящие функции, которые могут быть непрерывными, дифференцируемыми и т. д. И для них можно вводить обычные свойства. То есть мы будем иметь дело уже с некоторым функциональным пространством.

Ясно, что в последнем случае, например, в (3.3) суммирование предполагает, по сути, интегрирование. Когда $f_1 \dots f_S$ пробегает непрерывный ряд значений, надо будет записывать в функциональном пространстве то же самое скалярное произведение как интеграл по всем возможным значениям $df_1 \dots df_S$, как

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int df_1 \dots df_S \psi_1^*(f_1 \dots f_S) \psi_2(f_1 \dots f_S) \quad (3.4)$$

То есть мы можем работать как с настоящими дискретными суммами, так и с интегралами. Здесь мы сразу сталкиваемся с тем, насколько удобно то, что мы выбрали гильбертово пространство. Эти пространства сепарабельные, из чего фактически следует замечательная вещь, что свойства интегралов, которые определяются как пределы интегральных сумм, и просто сумм одинаковы. Нет радикального различия по тому, какие операции мы с ними можем производить.

Поэтому в квантовой теории довольно часто используется некое соглашение об обобщённом суммировании. Мы будем считать, что символ интеграла и суммы совершенно одинаковый. И в дальнейшем будем стараться всегда писать сумму, а интеграл только в случае, если уже очень будет явно, что мы работаем с интегралами. Соглашение будет выглядеть так, что, если индекс, по которому ведётся записанное суммирование, дискретный, это, несомненно, сумма. А если индекс, по которому ведётся суммирование, в том числе и с использованием соглашения о сокращённом суммировании, когда оно идёт повторяющемуся индексу, пробегает непрерывные значения, то есть описывает непрерывный спектр, будем считать это интегралом по всем возможным значениям данного индекса, то есть по всей области определения подынтегральной функции.

Ещё одно следствие такого подхода будет заключаться в том, что тогда в возникшем пространстве волновых функций, которое в дальнейшем будет конкретной реализацией нашего абстрактного гильбертова пространства, условие ортонормированности базиса естественным образом будет иметь разный вид в зависимости от того, является индекс дискретным или непрерывным.

Ортонормированность базиса заключается в том, что скалярное произведение для дискретного базиса

$$\langle \psi_{f_1..f_S} | \psi_{f'_1..f'_S} \rangle = \delta_{f_1 f'_1} \dots \delta_{f_S f'_S} \quad (3.5)$$

А для непрерывного оно будет записано через дельта-функции Дирака, которые для этого были исторически им придуманы:

$$\langle \psi_{f_1..f_S} | \psi_{f'_1..f'_S} \rangle = \delta(f_1 - f'_1) \dots \delta(f_S - f'_S) \quad (3.6)$$

Обе записи будут работать одинаково, дельта-функции и символы Кронекера будут схожим образом действовать в суммах и интегралах. Символ Кронекера снимает суммирование по дискретному индексу, то есть суммирование по этому индексу исчезает, и во всех выражениях под суммой штрихованные значения индекса заменяются нештрихованными. И точно также в выражениях с интегрированием дельта-функция будет снимать интеграл по соответствующей переменной. Он будет исчезать, и в подынтегральном выражении все штрихованные переменные будут заменяться на нештрихованные.

На самом деле выстраивание конкретного представления производится для конкретной квантовой системы. Мы отталкиваемся либо от каких-то физических представлений о ней, либо от формальных свойств, которые сами задаём. Поэтому построим для этого некоторые конкретные примеры.

Начнём с примера, который был более-менее детально разобран одним из первых. И тем не менее, вроде как будучи полностью исследованным на заре развития квантовой теории, в последнее время приобрёл чрезвычайно большое значение. То, что в ранних задачах квантовой теории называли двухуровневой системой, сейчас обычно называют кубитом. И он стал уже объектом не столько, например, квантовой механики, сколько квантовой информатики для некоего особого направления, связанного с информационными технологиями. Но мы пока будем с ним работать как с объектом квантовой механики.

Задача 1. Наблюдаемые для кубита

Определим его как некую квантовую систему, у которой полный набор наблюдаемых состоит из одной наблюдаемой, имеющей всего два собственных значения. То есть для данного кубита есть оператор \hat{F} , у которого два собственных значения f_1, f_2 , не равные друг другу, и им отвечают два собственных вектора $|f_1\rangle, |f_2\rangle$.

Если мы говорим, что измерение этой наблюдаемой даёт полную информацию о состоянии нашей системы, то сразу приходим к выводу, что пространство состояний конечномерно. Каждому вектору состояния будут отвечать всего два коэффициента разложения, и данное пространство можно выбрать просто как пространство двухкомпонентных столбцов. То есть, если мы любой вектор $|\psi\rangle$ записываем как

$$|\psi\rangle = c_1 |f_1\rangle + c_2 |f_2\rangle, \quad (3.7)$$

можно поставить им в соответствие двухкомпонентные столбики

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Сейчас их обычно называют двухкомпонентными спинорами. Мы доберёмся до физического смысла этой терминологии чуть позже, когда вспомним про существование у квантовых частиц не имеющей классического аналога наблюдаемой, спина.

По условию норма вектора $|\psi\rangle$, описывающего физически реализуемые состояния этого кубита, должна равняться единице, то есть

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad (3.9)$$

Из этого следует ограничение на комплексные числа c_1 и c_2 , что сумма квадратов их модулей

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (3.10)$$

Так как у нас всегда есть некий произвол в выборе начальной фазы базисного элемента, можно договориться, что, например, c_1 всегда будет вещественным и неотрицательным. То есть если он ноль, то это обычный вещественный ноль. Если мы обозначим такой c_1 как α , общее выражение для нашего спинора будет

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \cdot e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

где φ – разность фаз наших комплексных чисел. При этом

$$\beta = \sqrt{1 - \alpha^2} \quad (3.12)$$

Таким образом, через два вещественных числа α и φ , можно записать любой вектор. И мы получим полное описание пространства состояний через базисные спиноры (3.8).

Рассмотрим, как в этом пространстве строить наблюдаемые. Наблюдаемая – это эрмитов оператор, который в данном пространстве будет представляться матрицей 2×2 . Вообще говоря, матрица 2×2 в таком пространстве над полем комплексных чисел задаётся четырьмя комплексными числами, которые мы называем обычно матричными элементами в выбранном базисе:

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} \\ F_{21} & F_{22} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

Условие эрмитовости, что

$$\hat{F}^+ = \hat{F}, \quad (3.14)$$

убирает ровно половину независимых переменных, которые здесь могут быть. Потому что F_{11} и F_{22} оказываются вещественными, то есть $\{F_{11}, F_{22}\} \subset \mathbb{R}^1$, а

$$F_{21} = F_{12}^* \quad (3.15)$$

В данном случае мы видим, что знакомое нам из линейной алгебры понятие эрмитова сопряжения матрицы полностью переносится на матрицы операторов, так как в любом базисе матрица эрмитово сопряжённого оператора есть эрмитово сопряжённая матрица. И мы будем просто иметь конструкцию, которая описывается четырьмя

вещественными числами: F_{11} , F_{22} , а F_{12} всегда можно записать через два вещественных числа как $a + ib$, через его вещественную и мнимую часть.

Также мы видим, что удобно ввести в пространстве матриц 2×2 какой-нибудь такой базис и разложить по нему любую эрмитову матрицу вида (3.13). Лучше, чтобы базис тоже состоял из эрмитовых операторов, тогда коэффициенты разложения эрмитова оператора по нему тоже будут просто вещественными.

Помимо естественной записи (3.13) довольно часто удобно записать эту матрицу через четыре вещественных числа как

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} \\ F_{21} & F_{22} \end{pmatrix} = f_0 \hat{I}_2 + \vec{f} \hat{\sigma} \quad (3.16)$$

Мы написали крышечки над \hat{I}_2 и $\hat{\sigma}$, чтобы отметить, что это операторы в нашем пространстве, матрицы 2×2 . Символом \hat{I}_2 здесь естественным образом обозначена единичная вещественная матрица 2×2 :

$$\hat{I}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

А матрица $\hat{\sigma}$ – то, что называют матрицей Паули. Данное пространство не зря называют пространством двухкомпонентных спиноров, именно его использовал Паули для построения теории нерелятивистских частиц со спином. Поэтому здесь мы часто встречаем именно его фамилию, в том числе и в описании математических конструкций.

Действительно, $\hat{\sigma}$ – это три бесследовые линейно независимые матрицы, выбранные Паули определённым образом, так, что нам потом окажется очень удобно использовать их для описания динамики спина. Формально видно, что во втором слагаемом (3.16) стоит как бы трёхмерный вектор, то есть у $\hat{\sigma}$ есть компоненты σ_x , σ_y , σ_z , и три вещественных числа f_x , f_y , f_z – компоненты вещественного вектора \vec{f} . Ну и f_0 , как мы заметили, тоже вещественно.

При этом матрица σ_x антидиагональна и вещественна:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

Матрица σ_y мнимая и записывается как

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

Нетрудно заметить, что она, тем не менее, эрмитова. Эрмитово сопряжение и транспонирование переводит её саму в себя.

А σ_z – единственная диагональная матрица из этих трёх,

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

Если бы были две диагональных матрицы, мы бы быстро доказали, что все эти три матрицы не могут быть тем, чем нужно, тремя бесследовыми линейно независимыми

матрицами. Так что диагональной может быть не более одной матрицы в подобном наборе.

Это классическое определение. Мы позже разберёмся, почему так и что можно использовать вместо этого. Но пока видим, что можно ввести такие матрицы как (3.17–3.20). Они линейно независимы и эрмитовы. Поэтому, хотя вообще любую матрицу можно разложить по базису (3.16), если мы раскладываем эрмитовы матрицы, все коэффициенты разложения будут вещественны.

Итак, мы можем записать любую наблюдаемую через матрицы σ_x , σ_y , σ_z , то есть охарактеризовать набором из четырёх чисел. При этом мы можем, например, решить задачу на собственные вектора и собственные значения, и посмотреть, как они выглядят. Это очень полезная математическая работа, и в качестве очередной дополнительной задачи будет предложено доказать некий набор свойств такого представления наблюдаемых в пространстве состояний кубита. Те, кто её выполнят, более подробно познакомятся с данным математическим аппаратом. Но мы будет разбирать его и потом, пусть, может, не так подробно, когда будем строить теорию спина.

А сейчас просто хотелось обратить внимание, что в принципе можно реализовать конечномерный аналог гильбертова пространства, здесь всего-навсего двумерный, в виде пространства двухкомпонентных столбиков, нормированных на единицу. Пока ограничимся данными свойствами этого примера, но чуть-чуть его продолжим.

Задача 2. Наблюдаемые для системы из двух кубитов

Разберёмся, как построить пространство квантовых состояний для системы, у которой два кубита будут её элементами, некими её подсистемами. Когда мы будем впредь рассматривать любую квантовую теорию, состоящую из нескольких подсистем, для каждой из которых можем построить гильбертово пространство чистых состояний, будем заявлять, что пространство состояний более широкой системы может быть построено как прямое произведение пространств состояний подсистем.

То есть в этом случае запишем

$$H^{(2)} = H^{(1)} \times H^{(1)}, \quad (3.21)$$

сказав, что каждое из пространств $H^{(1)}$ и $H^{(1)}$ – пространство двухкомпонентных спиноров, которое мы только что изучили. Но они разные – одинаково устроены, но относятся к разным элементам.

Вспоминая линейную алгебру, прямое произведение двух пространств – это пространство, базисные элементы которого являются упорядоченными произведениями базисных элементов перемножаемых пространств. Базисными элементами пространства $H^{(1)}$ являются двухкомпонентные спиноры $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$, а базисными элементами $H^{(1)}$ – спиноры $\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \end{pmatrix}$. Соответственно, базисный элемент нашего пространства $H^{(2)}$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

Смысл упорядоченности в том, что мы договариваемся, что спинор, написанный первым, описывает состояние первого кубита, а написанный вторым – второго.

Мы сказали, что наш кубит был определён тем, что у него существует некая такая наблюдаемая, что

$$\hat{F}|f_{1,2}\rangle = f_{1,2}|f_{1,2}\rangle \quad (3.23)$$

В этом случае естественный базис в нашем пространстве двухкомпонентных спиноров будет создан, если в качестве первого базисного элемента возьмём спинор, собственный вектор оператора \hat{F}

$$|f_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

И точно также в качестве второго удобного базисного элемента в пространстве спиноров из 0 и 1 выберем

$$|f_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Тогда запись $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ будет иметь тот самый смысл, который мы ей придали. Этот спинор есть комбинация спиноров $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ с коэффициентами c_1 и c_2 .

Поэтому, например, если мы, учитывая, что первые числа в столбцах договорились делать вещественными, напишем состояние

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ i \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ \sqrt{3} \\ 2 \end{pmatrix}, \quad (3.26)$$

сразу скажем, что это состояние нашей системы из двух кубитов. И если мы измеряем наблюдаемую \hat{F} у первого кубита, можем получить либо f_1 , либо f_2 с вероятностями $\frac{1}{2}$, исходя из соотношения чисел в первом столбце в (3.26), потому что квадраты модулей коэффициентов разложения – те самые вероятности.

А если мы измеряем наблюдаемую \hat{F} у второго кубита, можем получить f_1 с вероятностью $\frac{1}{4}$, а f_2 с вероятностью $\frac{3}{4}$. То есть здесь уже возникает отличие. И когда мы пишем наблюдаемую \hat{F} , нужно индексом указывать, у какого кубита измерение этой величины данная наблюдаемая производит. То есть теперь мы будем различать наблюдаемые $\hat{F}_{1,2}$, и в конструкции нашего пространства (3.22) будет записано, что наблюдаемая \hat{F}_1 как оператор всегда действует на первый спинор в этом произведении (3.26), а наблюдаемая \hat{F}_2 на второй. Разумеется, если оператор записан в виде своей

матрицы в данном базисе, действие (3.26) будет производиться по правилам матричного умножения.

Мы как бы вводим у наблюдаемой \hat{F} коэффициент i , который пробегает значения $i = 1, 2$ и указывает, к какому из двух кубитов в нашей системе это измерение относится. Говоря про измерение, мы подразумеваем, что как бы создали некий измерительный прибор, который взаимодействует с кубитом. Наблюдаемую \hat{F}_1 описывает прибор, взаимодействующий с первым кубитом, а наблюдаемую \hat{F}_2 – такой же прибор, но взаимодействующий со вторым.

При этом мы подразумеваем важную, вещь, что можем создать прибор, который знает, какой из этих двух кубитов первый или второй и взаимодействует именно с ним. Это совсем неочевидная в микромире способность. Более того, почти весь следующий семестр мы посвятим изучению работы системы, в которой такой возможности принципиально нет. Некоторые квантовые объекты мы там будем считать принципиально неразличимыми, например, два электрона. То есть будем прямо говорить, что не существует измерительной процедуры, прибора, который знает схему взаимодействия с первой и второй из этих двух частиц.

Важное отличие первого и второго семестров в курсе квантовой теории состоит в том, что в первом мы будем в основном изучать методы работы с одночастичными нерелятивистскими квантовыми системами. То есть чаще всего будем говорить, что у нас есть одна квантовая частица, помещённая в какие-то внешние условия. Изредка мы станем рассматривать системы из двух и более частиц, но при этом сразу будем сводить эту задачу к одночастичной и подразумевать, что в данной конкретной системе это возможно.

«Нерелятивистские» означает, что мы будем изучать только те объекты, которые движутся со скоростями, много меньшими скорости света. Понятно, что скорость не всегда, скорее очень редко будет удобной для измерения в микромире наблюдаемой. Но тем не менее мы можем вводить такой оператор скорости и смотреть его среднее значение в заданном состоянии. И характерные величины средних значений и дисперсий должны отвечать нерелятивистскому приближению, где они малы по сравнению со скоростями света.

А когда мы дойдём до изучения эволюции, дополнительно ограничим себя на первый семестр, заявив, что пока будем изучать в основном стационарные квантовые системы. Вспоминая аксиому соответствия, наблюдаемая, имеющая классический аналог, в данном случае энергия, записывается через импульсы, координаты и время. У стационарных систем слово «и время» произносить не надо, их гамильтонианы являются функциями координат и импульсов, явная зависимость от времени там отсутствует. Это сразу приведёт к значительному упрощению многих задач.

А второй семестр курса в этом смысле будет посвящён последовательному отказу от всех перечисленных ограничений. Мы откажемся от нерелятивизма и посмотрим, что

из этого выйдет, откажемся от одночастичности и будем рассматривать многочастичные задачи. И тогда станет очень важным, что делать с принципиально неразличимыми частицами. А ещё мы займёмся нестационарными квантовыми задачами, где операторы энергии, которые в квантовой теории называются гамильтонианами и имеют особый статус, будут явно зависеть от времени.

Задача 3. Наблюдаемые для линейного гармонического осциллятора

Здесь речь пойдёт об одной из любимых систем теоретической физики вообще, линейном гармоническом осцилляторе. Поскольку она крайне важна, будет интересно построить её анализ по-настоящему, предположив некое физическое содержание модели и выстроив все наблюдаемые, которые там могут быть. Мы посвятим этому отдельную лекцию и даже, скорее всего, семинар.

А сейчас мы поступим формально и просто скажем, что линейный гармонический осциллятор – это такая замечательная система, у которой существует наблюдаемая энергии с оператором \hat{H} , у которой собственные значения E_n могут быть записаны через фундаментальную константу, постоянную Планка, и единственную константу, которая будет характеризовать спектр осциллятора, ω , имеющую размерность частоты, которую мы так и будем называть частотой осциллятора, как

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (3.27)$$

где квантовое число, то есть индекс $n = 0, 1, \dots$, то есть 0 и положительные натуральные числа.

Этот спектр невырожденный, из чего следует, что каждому E_n однозначно соответствует вектор, которому просто можно приписать тот же номер n . Если он отнормирован на единицу, то зафиксирован с точностью до фазового множителя.

Для невырожденного спектра все собственные вектора, занумерованные номером n , взаимно ортогональны, и мы их отнормировали на единицу. Значит, они образуют полный ортонормированный базис $\{|n\rangle\}$ в нужном нам гильбертовом пространстве чистых состояний. Тогда любой вектор $|\psi\rangle$ из этого пространства может быть записан в виде

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \quad (3.28)$$

Таким образом, данное соотношение ставит взаимно однозначное соответствие между векторами $|\psi\rangle$ и произвольным вектором пространства, который можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_1 \\ \dots \end{pmatrix}, \quad (3.29)$$

то есть в виде последовательности комплексных чисел. А физически реализуемые состояния подчинены условию нормировки, которое при этом приобретает вид, что

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \tag{3.30}$$

Данное пространство изучалось в линейной алгебре и математическом анализе, там его называли пространством l_2 – квадратично суммируемых последовательностей комплексных чисел. Это такое пространство последовательностей (3.28), у которых сумма квадратов модулей – обязательно сходящийся ряд. И в нём, разумеется, роль базиса

играют сами вектора $|n\rangle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}$ и т. д. В c_n -м векторе единица стоит на n -м месте в

столбике, а на остальных нули. Очевидно, что любую нормированную на единицу последовательность можно записать в виде линейной комбинации таких элементов, где коэффициентами разложения будут как раз сами элементы последовательности c_0, c_1, c_2 .

То есть сразу возникает некое понятное пространство состояний, оно уже бесконечномерное. Но в силу построения этого базиса, мы сразу понимаем, что он счётный полный ортонормированный.

По сути, это пространство набора таких комплексных чисел $\{c_n\}$, что $n = 0, 1, \dots$, а $c_n \in \mathbb{C}^1$, то есть комплексное число. И при этом

$$\sum_n |c_n|^2 < \infty \tag{3.31}$$

Это официальное определение пространства l_2 в математике, и из него легко доказать, что оно является гильбертовым, то есть что все свойства, которые мы требовали от гильбертова пространства, здесь выполнены. То есть что l_2 сепарабельное, полное, евклидово линейное пространство над полем комплексных чисел.

И мы видим, что это пространство замечательно подходит в качестве пространства чистых состояний для линейного гармонического осциллятора. Правда, сейчас мы пока готовы предъявить только один оператор наблюдаемой, оператор энергии \hat{H} . В базисе из своих собственных векторов его матрица, как у любого оператора в таком базисе, будет диагональна, и на диагонали будут как раз стоять собственные значения, а на остальных местах будут нули. То есть получится

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\omega}{2} & 0 & 0 & & \\ 0 & \frac{3\hbar\omega}{2} & 0 & \dots & \\ 0 & 0 & \frac{5\hbar\omega}{2} & & \\ & & \dots & & \end{pmatrix} \tag{3.32}$$

А с операторами остальных наблюдаемых, которые естественно ввести для линейного гармонического осциллятора, например, с операторами координаты и импульса, в этом представлении его пространства чистых состояний надо разбираться. Ведь мы пока заложили в физическую модель только одно свойство – свойство наблюдаемой энергии. Как видно, этого хватает для построения пространства чистых состояний, но не хватит для полномасштабного изучения физики. Некоторые задачи решать можно, но надо развивать теорию.

Система важная, так что мы ей посвятим потом ещё много времени. Но данный пример пока на этом закончим. Нам хотелось просто обратить внимание на пространство l_2 , которое здесь естественным образом появилось как пространство чистых состояний. Это довольно частый пример конкретного представления гильбертова пространства. Данные рассуждения и пространство естественным образом подойдут для любой системы, у которой полный набор наблюдаемых может состоять из одной наблюдаемой, имеющей дискретный спектр.

Все примеры, которые мы пока разбирали, относились к наблюдаемым с дискретным спектром. Теперь рассмотрим непрерывный.

Задача 4. Координатное и импульсное представления для частицы, совершающей одномерное движение

Пусть точечная частица совершает одномерное движение. Все предыдущие примеры носили скорее формальный характер, мы демонстрировали, как что можно сделать. А тут впервые у нас есть чёткая физическая модель. Мы предполагаем, что пространство бесконечно делимое и в нём существует точечная частица. И хотим построить квантовую теорию такой одномерной системы, совершающей одномерное движение.

Уже из физики данной системы можно сказать, что измерение координаты x должно однозначно фиксировать состояние частицы. Так что полный набор наблюдаемых может состоять из одной наблюдаемой \hat{x} . При этом понятно, что когда мы решаем для \hat{x} спектральную задачу

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad (3.33)$$

если частица совершает одномерное движение по всей Вселенной, и x меняется от $-\infty$ до $+\infty$, то спектр у физической модели оказывается непрерывный, и это любое вещественное число, $x \in \mathbb{R}^1$. То есть у нас должна быть наблюдаемая, собственными значениями которой может являться любое вещественное число.

Тогда, если $|\psi\rangle$ произвольный вектор абстрактного гильбертова пространства, вспоминая общее определение волновой функции, раз \hat{x} полный набор наблюдаемых, значит, набор векторов в (3.33) образует непрерывный полный ортонормированный базис, то данный вектор можно записать в виде разложения

$$|\psi\rangle = \sum_x \langle x|\psi\rangle |x\rangle \quad (3.34)$$

Напомним про соглашение, мы в данном случае под (3.34) имеем в виду

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) |x\rangle, \quad (3.35)$$

где $\psi(x)$ – конструкция $\langle x|\psi\rangle$ из (3.34), имеющая комплексные значения для каждого значения координаты x . То есть это и будет волновая функция состояния $|\psi\rangle$ в координатном представлении, мы рассматриваем такие функции.

При этом условие нормировки для произвольного вектора состояния, что норма равняется единице, получается как

$$\langle \psi|\psi\rangle = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)\psi(x) \quad (3.36)$$

$\psi^*(x)\psi(x)$ – то же самое, что и квадрат модуля комплекснозначной функции $\psi(x)$, поэтому (3.36) равно

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 \quad (3.37)$$

Пространство, которое мы получили, тоже изучалось в курсе математического анализа в третьем семестре. Как только там появились элементы функционального анализа, первым же функциональным пространством, с которым начали работать, скорее всего и было L_2 , пространство квадратично интегрируемых комплекснозначных функций вещественной переменной. То есть таких $\psi(x)$, у которых область определения вещественная ось, множество значений комплексная плоскость, и при этом интеграл (3.37) по всем значениям x всегда сходится.

Это пространство используется для любых систем, где мы изучаем точечные частицы, совершающие одномерное движение, в качестве естественного пространства чистых состояний в координатном представлении. Особенности того, что спектр непрерывный, сразу проявляются.

Пусть мы взяли само состояние $|x'\rangle$ и хотим написать его волновую функцию в x -представлении, как функцию x . По определению (3.34) мы должны взять скалярное произведение, $\langle x|x'\rangle$. А это фактически скалярное произведение двух функций нашего базиса, и для непрерывных базисов, как мы сказали, его нужно определять через дельта-функцию. Получится

$$x'(x) = \langle x|x'\rangle \equiv \delta(x - x') = \delta(x' - x), \quad (3.38)$$

так как эти функции симметричны по определению.

Это обобщённая функция Дирака, она не является непрерывной, она явно сингулярная и разрывная. Её можно построить как предел несингулярных функций, но он будет сам по себе сингулярен и разрывен. И уж точно квадрат функции (3.38) не

является нормально интегрируемой функцией. С ним надо отдельно разбираться, его надо доопределять, естественным образом сам по себе он не определится.

Поэтому, хотя формально можно работать в координатном представлении и считать оператор координаты естественным полным набором наблюдаемых для таких систем, нужно обратить внимание, что само состояние с определённым значением координаты точечной частицы физически нереализуемо. Мы видим это уже из самой конструкции нашего базиса, из конструкции определения этих координатных волновых функций.

Это вполне естественно, ведь когда мы говорим о физической модели, кроме координаты должны определять и другие наблюдаемые. В первую очередь, как мы помним из аксиомы соответствия, нам понадобится оператор импульса. Получается, что мы можем естественным образом перенести в пространство координатных волновых функций сам оператор координаты следующим образом. Если он, действуя на любой вектор гильбертова пространства, в качестве своего образа выдаёт некий вектор $|\tilde{\psi}\rangle$:

$$\hat{x}|\psi\rangle = |\tilde{\psi}\rangle, \quad (3.39)$$

и мы хотим посмотреть, как выглядит координатная волновая функция состояния $|\tilde{\psi}\rangle$, то говорим, что $\tilde{\psi}(x)$ – по определению скалярное произведение

$$\tilde{\psi}(x) \equiv \langle x|\tilde{\psi}\rangle \quad (3.40)$$

С другой стороны, мы понимаем, что в соответствии с формулой (3.39) $|\tilde{\psi}\rangle$ можно записать как оператор \hat{x} , действующий на $|\psi\rangle$, то есть (3.40) равно

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle \quad (3.41)$$

Но, поскольку оператор \hat{x} является эрмитовым оператором, над ним легко можно нарисовать стрелку влево, то есть подействовать им налево. Туда он действует на свой собственный вектор и по естественному правилу выдаёт тот же самый вектор, умноженный на собственное значение x , которое вещественно. Поэтому получается

$$x\langle x|\psi\rangle \quad (3.42)$$

Или, опять вспоминая определение, обнаруживаем, что

$$\tilde{\psi}(x) = x\psi(x) \quad (3.43)$$

Так мы как бы естественным образом перенесли оператор координаты в функциональное пространство, являющееся координатным представлением нашего гильбертова пространства чистых состояний. То есть теперь можно писать, что оператор \hat{x} действует на координатную волновую функцию произвольного состояния $\psi(x)$ как оператор умножения на аргумент функции для любой координатной функции:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \quad (3.44)$$

Более того, посмотрев на выкладку (3.44), можно сказать, что так допустимо сделать для любого оператора, в чьём представлении мы работаем. Каждый оператор, если мы взяли в качестве координат вектора в гильбертовом пространстве его координаты

в базисе из его собственных векторов, это оператор умножения на аргумент в пространстве своих волновых функций. То есть мы сразу приходим к тому, что (3.44) – естественный вид оператора координаты.

Чтобы уметь написать оператор любой наблюдаемой, нужно уметь строить ещё оператор импульса. Потому что мы потом для всех наблюдаемых, имеющих классический аналог, воспользуемся аксиомой 3, аксиомой соответствия. Соответствующий оператор импульса \hat{p}_x возьмём из той же аксиомы, потому что там не сказано, что операторы $\hat{p}_x \hat{x}$ должны удовлетворять каноническому коммутационному соотношению. Чтобы определить \hat{p}_x в нашем функциональном пространстве L_2 , составленном из координатных волновых функций, нужно вспомнить, что $\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}$ должен действовать на произвольную функцию $\psi(x)$ как оператор, кратный единичному:

$$(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\psi(x) = i\hbar\psi(x) \quad (3.45)$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.46)$$

Действие оператора \hat{x} нам известно. В частности, в (3.45) в слагаемом $\hat{p}_x\hat{x}$, где он стоит крайним справа, он подействует на $\psi(x)$ просто как умножение на свой аргумент. С первым слагаемым $\hat{x}\hat{p}_x$ сложнее, там надо действовать \hat{p}_x . В общем, мы понимаем, что перед нами операторное уравнение на оператор \hat{p}_x . Мы говорили, что тут могут быть проблемы, если мы начнём придумывать всякие нелинейные реализации.

С линейными же всё достаточно просто. Решение (3.45) нам известно, но мы можем при желании проверить, что, если определим \hat{p}_x как оператор, связанный с оператором дифференцирования по координате x в пространстве координатных волновых функций, то соотношение (3.45) будет тождественно выполняться. Ведь во втором слагаемом (3.45) мы будем дифференцировать \hat{p}_x функцию $\hat{x}\psi(x)$, она распадётся на результат дифференцирования по \hat{x} , который даст саму функцию $\psi(x)$, и результат $\hat{x} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$. А первое слагаемое как раз $\hat{x} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$, поэтому их разность выдаст только саму функцию \hat{p}_x , то есть только то, что осталось от дифференцирования \hat{x} по $\frac{\partial}{\partial x}$. И поскольку в (3.45) в скобке знак минус, и в (3.46) тоже, мы получим точь-в-точь результат справа от знака равно в (3.45). То есть прямой проверкой мы убеждаемся, что этот оператор (3.46) подходит, он удовлетворяет каноническому коммутационному соотношению (3.45).

Единственный нерешённый вопрос – не существует ли других способов задать оператор \hat{p}_x . Но мы уже сказали, что в эту сторону не пойдём. Там можно найти много интересного, но в решении реальных практических задач это пока не используется.

Так что мы говорим, что у нас есть оператор импульса (3.46) в координатном представлении. Теперь любой другой оператор, имеющий классический аналог, мы запишем как функцию от операторов умножения на аргумент, оператора дифференцирования, умноженного на $-\hbar$, и времени. Это теперь будет произвольная наблюдаемая, мы её всегда можем построить.

Но является ли это естественное координатное представление в теории точечной частицы единственно возможным? Конечно нет, раз мы ввели оператор импульса, то можем в том числе определить базис состояний с определённым импульсом. То есть можно сказать, что у нас есть и другой вариант той же самой физической теории, ведь если существует оператор \hat{p}_x , то можно взять базис из его собственных векторов:

$$\hat{p}_x |p\rangle = p|p\rangle \quad (3.47)$$

И тогда мы можем для любого вектора $|\psi\rangle$ из нашего гильбертова пространства записать то же, что и в (3.34), то есть

$$|\psi\rangle = \sum_p \langle p|\psi\rangle |p\rangle \quad (3.48)$$

Теперь мы видим, что у нас есть взаимно однозначное соответствие между векторами $|\psi\rangle$ гильбертова пространства и волновыми функциями, которые сейчас уже естественно называть волновыми функциями $\tilde{\psi}(p)$ в импульсном представлении, где

$$\tilde{\psi}(p) \equiv \langle p|\psi\rangle \quad (3.49)$$

И понимаем, что здесь столкнёмся с неким аналогом того, что построили перед этим. В самом деле, если мы воспользуемся уже построенным координатным представлением, и решим спектральную задачу (3.47) в нём, получим

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_p}{\partial x} = p\psi_p, \quad (3.50)$$

где $\psi_p(x)$ – волновая функция состояния $|p\rangle$ в координатном представлении.

Это очень простое дифференциальное уравнение для функции одного переменного x . Тут даже не обязательно писать частную производную, мы сохранили её для общности, а в действительности здесь получается обыкновенное дифференциальное уравнение для частицы, совершающей одномерное движение. Его решением являются экспоненты, $\psi_p(x)$ надо писать как

$$\psi_p(x) = C e^{\frac{i}{\hbar} p x}, \quad (3.51)$$

C – нормировочная константа.

Если мы попробуем подчинить волновую функцию (3.51) условию нормировки на единицу, сразу обнаружим, что из этого ничего не выйдет, потому что интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_p(x)|^2 dx$ – это интеграл от $|C|^2$, который константа, по нашему предположению явно не нулевая, более того, положительная. Если она ноль, то функция тождественно равна нулю и тоже не нормируется на единицу.

То есть здесь нормированных на единицу собственных функций не существует, а значит, единственный способ отнормировать (3.51) – сделать это на дельта-функцию. Подчинить $\psi_p(x)$ условию

$$\langle \psi_p | \psi_{p'} \rangle = \delta_{pp'} \quad (3.52)$$

мы не можем в принципе, потому что таких C не существует, мы получаем уравнение типа $|C|^2 \cdot \infty = 1$. А условию нормировки

$$\langle \psi_p | \psi_{p'} \rangle = \delta(p - p') \quad (3.53)$$

мы подчинить её можем. Будет

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px} \quad (3.54)$$

Вспоминая интегральное представление дельта-функции, можно легко проверить, что функции (3.54) подчиняются условию нормировки (3.53). Это условие нормировки для непрерывного спектра. И мы приходим к выводу, что в пространстве состояний точечных частиц, раз уж мы предположили, что пространство делимо до бесконечности и существует точечные частицы, состояния с определённым импульсом у них тоже физически нереализуемы. Хотя соответствующий базис (3.48) можно использовать для разложения, в пространстве импульсного представления можно работать. В этом случае получится некая $\tilde{\psi}(p)$.

Волновые функции обоих представлений даже можно связать между собой. Если есть взаимно однозначное соответствие векторов состояний $|\psi\rangle$ с волновыми функциями $\psi(x)$ и взаимно однозначное соответствие с волновыми функциями $\tilde{\psi}(p)$, значит, можно установить соответствие между самими волновыми функциями координатного и импульсного представления.

Связь волновых функций координатного и импульсного представления

По определению,

$$\psi(x) \equiv \langle x | \psi \rangle \quad (3.55)$$

С другой стороны, у нас есть базис из состояний с определённым значением импульса. Можно считать, что здесь он является замкнутым несмотря на то, что он несчётный, поскольку индекс p пробегает вещественную ось. И сами вектора этого базиса, как мы заметили, не относятся к квадратично интегрируемым волновым функциям, то есть не принадлежат пространству L_2 . Но любую функцию из пространства L_2 можно разложить по этой системе функций. И для неё можно доказать условие замкнутости, что единичный оператор можно разложить в сумму проекторов, как мы раньше писали. То есть в (3.55) между вектором $\langle x |$ и вектором $|\psi\rangle$ можно вставить единичный оператор в форме суммы по всем p проекторов на состояние $|p\rangle$, и будет

$$\langle x | \sum_p |p\rangle \langle p| | \psi \rangle \quad (3.56)$$

$\sum_p |p\rangle\langle p|$ – спектральное разложение единичного оператора по собственным векторам оператора $|p\rangle$.

Заметим, что после вынесения суммы по p остаётся произведение $\langle x|$ на $|p\rangle$, а это волновая функция состояния $|p\rangle$ в координатном представлении $\psi_p(x)$, недавно построенная нами. А дальше $\langle p|$ на $|\psi\rangle$ – это $\tilde{\psi}(p)$. Тогда из (3.57) получается

$$\sum_p \psi_p(x) \tilde{\psi}(p) \quad (3.57)$$

Цепочкой выражений (3.55) – (3.57) и выражается связь между $\psi(x)$ и $\psi_p(x)$, а в (3.57) стоит конкретная функция (3.54). Чтобы было ещё удобнее это воспринимать, вспомним, что в (3.57) суммирование по непрерывному индексу можно явно записать в виде интегрирования. И тогда связь $\psi(x)$ и $\tilde{\psi}(p)$ – хорошо знакомое интегральное преобразование Фурье

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar} px} \tilde{\psi}(p) \quad (3.58)$$

То, что в нём помимо привычного $\sqrt{2\pi}$ появился ещё и $\sqrt{\hbar}$, просто связано с размерностью. Под интегралом стоит безразмерная переменная интегрирования p , и её размерность отличается от размерности x . $\frac{px}{\hbar}$ – безразмерная величина, так что размерность произведения px как раз размерность постоянной Планка.

После обнаружения преобразования Фурье уже без дополнительных доказательств можно записать обратное преобразование

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} px} \psi(x) \quad (3.59)$$

Построенные прямое и обратное преобразования Фурье и осуществляют переход между волновыми функциями подобной точечной частицы, совершающей одномерное движение, в координатном и импульсном представлениях. Такие преобразования существуют всегда. Более того, вспоминая линейную алгебру, переход от одного базиса к другому в евклидовых пространствах – это всегда унитарное преобразование. То есть в действительности формулы (3.58) и (3.59) реализуют некое унитарное преобразование базисных элементов в нашем пространстве L_2 .

Когда в математике изучалась теория преобразований Фурье, и нам доказывали всякие леммы Парсеваля и т. д., можно было обратить внимание, что математики при этом стараются определить его на классе функций, принадлежащих какому-то функциональному пространству, чаще всего L_2 . Для любой функции из него такое преобразование замечательно существует, интеграл из (3.58) и (3.59) является хорошо определённым, и мы действительно построим для каждой функции импульсного представления, нормально описывающей физически реализуемое состояние, волновую функцию координатного, описывающую то же физически реализуемое состояние. Ведь

преобразование Фурье норму функции не меняет, на то оно и унитарное. При желании это можно легко доказать самостоятельно в рамках тех же выкладок, которые делали сегодня, на том же уровне математической строгости.

Итак, мы получили замечательный аппарат, который позволяет изучать наше пространство состояний одномерной частицы. И можем записать любой оператор, определённый, например, для того же гармонического осциллятора, который тоже можно интерпретировать как точечную частицу, совершающую одномерное движение. Пример такой задачи – грузик на пружинке. Его энергия, если мы возьмём функцию Гамильтона в гамильтоновой динамике линейного гармонического осциллятора как функцию координат, импульсов в времени, будет

$$H(\hat{x}, \hat{p}_x, t) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \equiv \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (3.60)$$

с учётом того, что является частотой гармонических колебаний для такого осциллятора.

Сейчас впервые можно оценить, что такое метод канонического квантования. Мы записали классическую функцию Гамильтона и говорим, что нам надо проквантовать эту систему. У нас есть классическая теория линейного гармонического осциллятора, нужно получить её квантовый аналог. Процедура в таком случае будет сводиться к расстановке крышечек над x и p . Получается

$$\hat{H}(\hat{x}, \hat{p}_x, t) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{k\hat{x}^2}{2} \equiv \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \quad (3.61)$$

Теперь можно рассматривать оператор Гамильтона \hat{H} как оператор в пространстве координатных волновых функций $\psi(x)$. Там этот оператор энергии линейного гармонического осциллятора оказывается оператором

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (3.62)$$

x лишился крышечки, потому что в координатном представлении действие оператора \hat{x} сводится к умножению на аргумент функции, на которую он действует. А \hat{p}_x превратился в оператор дифференцирования $-\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

С полученным оператором (3.62) можно дальше работать. Теперь можно решать данную задачу, увидев, что спектральная задача для этого оператора

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (3.63)$$

превратится в обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка с не сложными, на взгляд, коэффициентами. С одной стороны, мы знаем, что за девятнадцатый век математики научились решать любые обыкновенные дифференциальные уравнения второго порядка и, разумеется, это тоже. С другой стороны, даже при всей внешней простоте соответствующие собственные функции будут

присоединёнными функциями Эрмита, про которые мы уже знаем, что это $e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$, умноженные на полином Эрмита H_n от безразмерной переменной координат.

То есть собственные функции оператора (3.62) можно построить, и они будут выражаться через известные по курсу ММФ функции. Так что вроде бы задача решена, хотя нельзя сказать, что она элементарная. Но тем не менее, мы с этими функциями обязательно познакомимся чуть подробнее на лекции, которая будет посвящена линейному гармоническому осциллятору.

Обратим внимание, что мы можем строить самые разнообразные операторы \hat{x} и \hat{p}_x и получать самые разные уравнения, те же самые на собственные значения и функции этих разных наблюдаемых. И, разумеется, у нас помимо дифференциальных операторов могут быть более сложные. Например, для нелокальной переменной, наблюдаемой, точно может возникнуть какой-то интеграл по координате.

Пусть есть, например, поле, которое не только чувствительно к координате частицы, но и чувствует присутствие частицы в некоторой области конечного ненулевого размера. Тогда потенциальную энергию мы будем писать как интеграл по этой области, а не как функцию от координаты точки, и соответствующий оператор просто станет интегральным. Математически всё усложнится, но сама схема описания от этого совсем не поменяется, и мы всё равно сможем со всем этим замечательно работать.

Вспомним ещё одну вещь по поводу волновых функций координатного и импульсного представления. Из канонического коммутационного соотношения

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad (3.64)$$

как мы знаем, следует соотношение неопределённостей координата-импульс. Для любого состояния $|\psi\rangle$ произведение дисперсии координаты на дисперсию импульса в этом же состоянии

$$D_\psi x \cdot D_\psi p_x \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (3.65)$$

Это важная деталь для понимания, почему состояния с определёнными значениями координаты и импульса оказались физически нереализуемыми. Дисперсия координаты в собственном состоянии оператора координаты в этом случае, естественно, должна быть

$$D_\psi x = 0, \quad (3.66)$$

точно также как и дисперсия импульса в состоянии с определённым значением импульса \hat{p}_x .

Видно, что в любом случае соотношение (3.64) говорит, что дисперсия парной наблюдаемой, не коммутирующей с ней и одновременно не измеримой, при этом должна обратиться в бесконечность. И мы тут же догадываемся, что это нельзя реализовать как состояние локализованной частицы. Если дисперсия координаты бесконечна, значит, как мы говорили в прошлый раз, частица равномерно размазана по всей физической

Вселенной. И тогда вероятность, что она провзаимодействует с нашим измерительным прибором, если мы захотим изучать это состояние посредством измерений, будет очень маленькой, порядка отношения объёма прибора к объёму физической вселенной.

Итак, мы сразу приходим к пониманию того, как происходит классификация всех состояний. По-настоящему у нас все полные наборы наблюдаемых состоят из величин, имеющих дискретный спектр. И на самом деле у нас нет интегралов, всегда суммирование. Но в очень многих задачах нам удобно перейти к пределу непрерывного спектра. То есть, когда мы считаем спектр дискретным и настолько плотным, что уже перестаём различать в нём отдельные уровни и рассматриваем его как предельную реализацию, непрерывный спектр.

С таким случаем мы тоже можем работать, и достаточно продуктивно. Более того, задачи по квантовой теории, которые мы решали до сих пор, например, в атомной физике, в большинстве случаев, скорее всего, работали в координатном представлении, с координатными волновыми функциями, если только это был не гармонический осциллятор. Мы будем упорно убеждать, что при решении задач про него не нужно пользоваться координатным или импульсным представлением, кроме случаев, когда заданный вопрос предполагает их использование. Например, если спрашивают, с какой вероятностью осциллятор в этом состоянии можно найти в интервале значений координат от x_1 до x_2 , нужно будет построить координатную волновую функцию и проинтегрировать её.

Ещё одно важное отличие базисов из физически реализуемых состояний, то есть дискретных, от непрерывных, состоит в следующем. Квадрат модуля коэффициента разложения в любом дискретном базисе – это вероятность. А в непрерывном, как можно было заметить в данном примере, это плотность вероятности. То есть вероятность при этом оказывается интегралом от квадрата модуля коэффициента разложения в тех пределах значений наблюдаемой с непрерывным спектром, в которых мы хотим обнаружить частицу. Потому что вероятность точно попасть в изолированное значение в непрерывном спектре бесконечно мала, и там конечные вероятности всё равно относятся к конечным интервалам значений измеряемой наблюдаемой.

Но при этом и в дискретных, и в непрерывных базисах можно и нужно работать, выбирая тот базис, где удобнее. В нашем гильбертовом пространстве преобразование одного базиса к другому исключительно унитарное преобразование. Соответственно, два любых представления унитарно эквивалентны, то есть все вычисления, которые мы произвели в координатном представлении, можно перевести на язык импульсного без особых проблем. Но исходно решать задачу, наверное, удобнее в каком-то конкретном представлении.

Лекция 4. Эволюция стационарных систем

Сегодня мы будем изучать описание эволюции квантовых систем, то есть изменения, происходящие в них с течением времени. В прошлый раз мы уже сделали первый шаг.

Этот семестр будет посвящён в основном изучению динамики стационарных квантовых систем, тех, у которых оператор энергии, гамильтониан, явно не зависит от времени:

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \equiv 0 \quad (4.1)$$

Практически все нормальные нестационарные системы, как правило, требуют иного подхода и анализируются значительно сложнее, чем стационарные. Поэтому нестационарные разделы квантовой динамики, которые обычно называют теорией переходов и теорией рассеяния, мы будем изучать в следующем семестре.

Эволюция в картине Шредингера

В прошлый раз мы вспомнили эвристический вывод уравнения Шредингера. Но теперь уже можем, пользуясь аксиоматикой, описать соотношение картины Шредингера на языке абстрактного гильбертова пространства.

Итак, у нас есть первый вариант описания, который будем называть картиной Шредингера. В литературе часто встречается название представление Шредингера, но это не очень хорошо, потому что получается, что термин «представление» приобретает два разных значения. Мы его будем использовать именно для координатного, импульсного представления и т. д.

В картине Шредингера эволюционируют вектора состояний. А операторы наблюдаемых нет, то есть у них зависимость от времени может быть только явная. Шредингеровский оператор наблюдаемой есть некая функция от шредингеровских операторов импульса и координаты и, в принципе, может зависеть от времени t :

$$\hat{F}_s = F(\hat{x}_s, \hat{p}_s, t) \quad (4.2)$$

То есть нельзя говорить, что наблюдаемые в картине Шредингера обязательно постоянные операторы. А вот входящие в их аргументы операторы координаты и импульса в шредингеровской картине являются постоянными операторами, то есть \hat{x}_s и \hat{p}_s – операторные константы.

Вектор состояния эволюционирует в соответствии с уравнением Шредингера, которое даёт, как обычно, дифференциальную задачу для зависящего от времени эволюционирующего шредингерова вектора состояния. Динамика системы определяется, как и в классической механике в гамильтоновом подходе, именно структурой гамильтониана, то есть структурой оператора энергии нашей теории:

$$\frac{\partial |\psi_s\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi_s\rangle \quad (4.3)$$

К уравнению первого порядка нужно добавить начальное условие. Мы всегда будем говорить, что шредингеровский вектор в начальный момент времени t_0 есть некое начальное состояние $\psi^{(0)}$:

$$|\psi_s(t_0)\rangle = |\psi^{(0)}\rangle \quad (4.4)$$

Задача из уравнений (4.3) и (4.4) корректная, при нормальном виде оператора Гамильтона решение существует и единственное. Соответственно, решая задачу, мы и находим шредингеров вектор эволюции $|\psi_s(t)\rangle$. Нам известно из общей теории дифференциальных уравнений, что, если оператор \hat{H} эрмитов и самосопряжённый, норма вектора состояния сохраняется в процессе эволюции. То есть если мы задали начальное состояние (4.4) физически реализуемым, то есть отнормированным на единицу, то и в процессе эволюции все состояния будут физически реализуемыми $|\psi_s(t)\rangle$, то есть будут описываться нормированными на единицу векторами гильбертова пространства.

Сразу можно отметить, что эволюционирующий вектор состояния $|\psi_s(t)\rangle$ имеет такую же норму, как и начальный $|\psi^{(0)}\rangle$. Поэтому на самом деле существует некий унитарный оператор, явно зависящий от t , – унитарные операторы как раз сохраняют норму, – который переводит начальный вектор в вектор состояния системы в момент времени t .

То есть можно ввести некий оператор \hat{u}_s , зависящий и от начального момента времени t_0 , и от момента времени t , поскольку он переделывает вектор состояния в момент t_0 в вектор состояния в момент t :

$$|\psi_s(t)\rangle = \hat{u}_s(t, t_0)|\psi^{(0)}\rangle \quad (4.5)$$

Такой оператор называют двухточечным, ведь у него два временных аргумента, оператором эволюции в шредингеровой картине. Или шредингеровым двухточечным оператором эволюции. Он унитарен,

$$\hat{u}_s^\dagger \hat{u}_s = \hat{u}_s \hat{u}_s^\dagger = 1 \quad (4.6)$$

В соответствии с нашей аксиоматикой, все предсказания про систему в момент времени t , которые мы можем сделать, то есть статистика результатов измерений, например, в виде предсказаний среднего, дисперсии, центральных моментов более высоких порядков или в виде вычисления вероятностей, вычисляются через скалярные произведения.

Мы будем организовывать все физические предсказания по отношению к нашей системе через матричные элементы операторов наблюдаемых, то есть это главное, что нужно вычислять при анализе поведения системы. При вычислении любого матричного элемента любого оператора наблюдаемой, если мы воспользуемся унитарным оператором эволюции, обнаружим, что его можно формально переписать как

$$\langle \psi_s(t) | \hat{F}_s | \psi_s(t) \rangle = \langle \psi^{(0)} | \hat{u}_s^\dagger \hat{F}_s \hat{u}_s | \psi^{(0)} \rangle \quad (4.7)$$

Аргументы справа от знака равенства мы не писали, но помним, что \hat{u} и \hat{u}^+ зависят от времени.

Эволюция в картине Гайзенберга

Те же самые предсказания про эволюцию нашей системы можно делать, если мы используем в качестве вектора состояния вектор $|\psi^{(0)}\rangle$, то есть если считаем начальный вектор состояния не эволюционирующим, а являющимся представителем всех последующих состояний нашей квантовой системы. А вместо шредингера оператора наблюдаемой будем использовать оператор $\hat{u}^+ \hat{F}_s \hat{u}$, который будем называть гайзенберговым оператором данной наблюдаемой \hat{F}_H .

Таким образом, мы обнаруживаем, что есть совершенно эквивалентный с точки зрения описания поведения системы подход, когда мы переносим все эволюционные изменения с векторов состояний на операторы наблюдаемых. То есть видим, что те же самые матричные элементы можно вычислить в картине Гайзенберга:

$$\langle \psi_s | \hat{F}_s | \psi_s \rangle \equiv \langle \psi_H | \hat{F}_H | \psi_H \rangle, \quad (4.8)$$

в которой вектора состояний не эволюционируют, то есть тождественно совпадают с выбранным начальным состоянием, и, более того, по сути, являются константами, постоянными векторами нашего гильбертова пространства:

$$|\psi_H\rangle \equiv |\psi^{(0)}\rangle = const \quad (4.9)$$

А все изменения, происходящие с течением времени, высчитываются изменением операторов наблюдаемых, закон мы видели. При этом операторы наблюдаемых, как мы заметили,

$$\hat{F}_H = \hat{u}_s^+ \hat{F}_s \hat{u}_s \quad (4.10)$$

Правда, данная формулировка отличается от того, что предложил сам Гайзенберг, поэтому это не совсем хорошо называть картиной Гайзенберга. Чтобы превратить её в настоящую картину Гайзенберга, нужно немного переделать определение гайзенбергов операторов. Сейчас получается, что для определения такого оператора мы должны сначала решить задачу в шредингеровой картине. А зачем тогда переходить в гайзенбергову, если задача уже решена?

Значит, хорошо бы иметь независимые эволюционные уравнения относительно гайзенбергов операторов. Для этого надо продифференцировать наш гайзенбергов оператор (4.10) по времени и превратить это соотношение в дифференциальное уравнение на данный оператор:

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{d}{dt} (\hat{u}_s^+ \hat{F}_s \hat{u}_s) \quad (4.11)$$

Правила дифференцирования обычные, ведь хоть в (4.10) и операторнозначные функции, но всё-таки от обычных вещественных переменных. Здесь нас интересует в

основном вещественная переменная t . Мы дифференцируем по очереди каждое выражение.

Начнём с оператора \hat{u} . Надо взять известное нам уравнение эволюции в шрёдингеровой картине

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_s\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi_s\rangle \quad (4.12)$$

и подставить туда выражение ψ_s через оператор \hat{u} , то есть $\hat{u}|\psi^{(0)}\rangle$. Тогда там, где стоит $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$, возникнет как раз производная от оператора \hat{u} , ведь мы на место $\psi(t)$ подставим $\hat{u}|\psi^{(0)}\rangle$. $|\psi^{(0)}\rangle$ при этом окажется постоянным вектором, одинаковым в этом выражении справа и слева. И это уравнение должно работать для любого $|\psi^{(0)}\rangle$, поэтому его можно записать непосредственно как уравнение оператора \hat{u} .

Тогда останется

$$i\hbar \frac{\partial \hat{u}}{\partial t} = \hat{u} \hat{H} \quad (4.13)$$

$|\psi^{(0)}\rangle$, который стоял слева и справа после $\frac{\partial \hat{u}}{\partial t}$ и \hat{u} , мы убрали, говоря, что это произвольный вектор, а уравнение должно работать для любого заданного начального состояния нашей системы.

А чтобы узнать, как дифференцировать \hat{u}^+ , надо просто эрмитово сопрячь (4.10). Тогда получим

$$-i\hbar \frac{\partial \hat{u}}{\partial t} = \hat{u}^+ \hat{H} \quad (4.14)$$

У \hat{H} мы крест не ставим, потому что предполагаем, что у нашей стационарной системы гамильтониан обязательно эрмитов.

Важно сделать замечание. Мы сказали, что эрмитовость гамильтониана, с одной стороны, естественна, потому что гамильтониан это наблюдаемая, его собственные значения должны быть вещественны. Но она гарантируется сохранением нормы состояния. Поэтому, если мы добавим в гамильтониан неэрмитову часть, ведь любой оператор мы можем разбить на эрмитову часть и антиэрмитову, которая меняет знак, то собственные значения такого гамильтониана станут комплексными, у них появится мнимая часть.

Вроде бы это неправильно, но ведь у нас обычная плоская волна, с которой мы работали, а там $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$. Если мы на место E ставим, например, $e^{-\frac{\gamma}{2}}$, где E – вещественная часть собственного значения гамильтониана, а $\frac{\gamma}{2}$, $-\frac{\gamma}{2}$ мнимая, то обнаруживаем, что эволюция волновой функции, помимо привычной волновой части $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, будет содержать $e^{-\frac{\gamma}{2}t}$. То есть в этом случае норма начнёт экспоненциально убывать с течением времени.

В микромире бывают такие процессы, например, распад какого-то состояния, тот же радиоактивный. То есть совсем отказываться от возможности добавлять в гамильтониан антиэрмитову часть мы не будем, но понимаем, что реально это понадобится в нестационарных задачах, в следующем семестре.

А сейчас у нас пока стационарные задачи, гамильтониан эрмитов и явно от времени не зависит. Когда мы будем дифференцировать \hat{u}_s^+ из (4.11), у нас выскочит конструкция с $\hat{u}^+ \hat{H}$ из (4.14), когда будем дифференцировать \hat{u}_s , выскочит конструкция с $\hat{u} \hat{H}$ из (4.13) Знак у них будет разный, ведь если мы будем выражать из (4.13) $\frac{\partial \hat{u}}{\partial t}$, можем написать справа в этом выражении $-\frac{i}{\hbar}$. А в (4.14), соответственно, $+\frac{i}{\hbar}$.

Ещё будет слагаемое с дифференцированием \hat{F} , причём здесь мы должны будем дифференцировать не гайзенбергов \hat{F} , а шрёдингеров \hat{F}_s . А шредингеровский оператор наблюдаемой зависит от времени только явно, эволюционной зависимости у него нет. Поэтому реально нужно будет просто продифференцировать явную зависимость \hat{F}_s по времени. В этом случае мы используем символ частной производной, у нас получится слагаемое $\hat{u}_s^+ \frac{\partial \hat{F}_s}{\partial t} \hat{u}_s$. А во всех следующих слагаемых \hat{u}_s^+ , который можно будет вынести из этой конструкции налево, и \hat{u}_s , который можно будет вынести направо. Внутри этой конструкции останется $\frac{i}{\hbar}$, умноженное на скобку, где при подстановке (4.13) и (4.14) обнаруживается некий коммутатор. Получается

$$\hat{u}_s^+ \frac{\partial \hat{F}_s}{\partial t} \hat{u}_s + \hat{u}_s^+ \left\{ \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{F}_s - \hat{F}_s \hat{H}) \right\} \hat{u}_s \quad (4.15)$$

Более того, в каждом произведении операторов всегда можно вставить между ними единицу в виде $\hat{u} \hat{u}^+$, так что у нас всегда получится, что все операторы стоят в обкладках $\hat{u} \hat{u}^+$. Поэтому \hat{F}_s мы легко переделаем в гайзенбергов оператор. \hat{H} при этом тоже переделается в гайзенбергов оператор, но для стационарных систем мы понимаем, что гайзенбергов оператор гамильтона не будет явно зависеть от времени, не будет эволюционировать. Ведь если мы на место \hat{F}_s поставим сам оператор гамильтона, в скобках во втором слагаемом (4.15) образуется ноль, и в первом тоже, из-за того, что он явно не зависит от времени. Поэтому для оператора гамильтона в стационарных задачах гайзенбергов оператор есть просто \hat{H} .

В результате во втором слагаемом (4.15) будет коммутатор \hat{H} , у которого можно не ставить индексы, с \hat{F}_H . Первое слагаемое дальше будем писать как $\frac{\partial \hat{F}_H}{\partial t}$. Мы в выражении для \hat{F}_H , которое получается, если внести под знак частного дифференцирования \hat{u}_s^+ и \hat{u}_s , дифференцируем именно явную зависимость от времени в аргументе \hat{F}_H . Частная производная $\frac{\partial \hat{F}_H}{\partial t}$ понимается как дифференцирование по букве t , стоящей в аргументе оператора \hat{F}_H , при котором мы не обращаем внимания ни на какую эволюцию. Тогда из (4.15) получается

$$\frac{\partial \hat{F}_H}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H] \quad (4.16)$$

Раз все эволюционные изменения связаны с наблюдаемыми, мы получили гайзенберговское уравнение эволюции. На самом деле мы для картины Гайзенберга в дальнейшем заменим определение гайзенбергова оператора (4.10), которое написали перед этим через шредингеров, чтобы картины не перемешивались и каждая была независимой. Мы постулируем гайзенбергов оператор как решение уравнения

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{\partial \hat{F}_H}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H], \quad (4.17)$$

в котором мы теперь знаем смысл всех величин и которое и будем называть уравнением Гайзенберга.

Как у всякого дифференциального уравнения первого порядка, для фиксации однозначного решения к (4.17) надо добавить начальное условие.

$$\hat{F}_H(t_0) = \hat{F}_0 \quad (4.18)$$

И из решения эволюционной задачи, состоящей из системы уравнений (4.9), (4.17) и (4.18), мы и должны находить $\hat{F}_H(t)$, который эволюционирует и может зависеть от t и явно, и эволюционно.

На первый взгляд, картина Гайзенбера может представляться менее удобной, чем шредингеровская. Ведь в картине Шредингера есть одно эволюционное уравнение, одна эволюционная задача для вектора состояния. А в картине Гайзенберга может показаться, что для каждой наблюдаемой заново нужно решать уравнение Гайзенберга. Например, когда хотим проанализировать поведение импульса, решаем уравнение для импульса, а когда поведение момента импульса – решаем для него.

На самом деле это не так, по крайней мере для всех наблюдаемых, имеющих классический аналог, с которыми мы пока работаем. Потому что мы помним, что все операторы, имеющие классический аналог, будут известными функциями от операторов координат, импульсов и времени. При этом шредингеровы операторы координат и импульсов явно от времени не зависят, то есть для них частная производная в (4.17) будет нулём.

Для простоты будем писать уравнения для координат и импульсов для одномерной системы, но их можно легко распространить на произвольное число степеней свободы:

$$\frac{\partial \hat{x}_H}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}_H] \quad (4.19)$$

$$\frac{d\hat{p}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_H] \quad (4.20)$$

Оказывается, что если мы решим систему уравнений (4.19) и (4.20), которые будем называть фундаментальными уравнениями Гайзенберга, уравнения для операторов \hat{x}_H и \hat{p}_H , снабдив их начальными условиями

$$\hat{x}_H(t_0) = \hat{x}_0 \quad (4.21)$$

$$\hat{p}_H(t_0) = \hat{p}_0, \quad (4.22)$$

то получим задачу, из которой найдём эволюционирующие гайзенбергов операторы координаты и импульса. В качестве начальных значений для данных операторов, \hat{x}_0 и \hat{p}_0 , нужно выбрать любые два линейных эрмитовых оператора, подчиняющихся каноническому коммутационному соотношению. Разные выборы равноправны для дальнейшего использования. Но как правило выбирают шредингеров операторы, постоянные в том пространстве волновых функций, в котором дальше собираемся работать.

А после этого уже не надо решать новые уравнения Гайзенберга для новых наблюдаемых. Решив задачу (4.19–4.22), мы обнаружим, что гайзенбергов оператор $\hat{F}_H(t)$ будет той самой классической функцией $F_{\text{кл}}(\hat{x}_H, \hat{p}_H, t)$, которая нам известна, только от гайзенбергов операторов координаты, импульса и времени.

То есть по схеме решение задачи эволюции в картине Гайзенберга на самом деле сводится к решению фундаментальных уравнений Гайзенберга для координат и импульсов. А после этого мы смотрим, как эволюционируют все остальные интересные нам наблюдаемые, имеющие классический аналог.

Картины Шредингера и Гайзенберга как бы две крайние. В одной мы все эволюционные изменения связали с векторами состояния, в другой все эволюционные изменения с операторами наблюдаемых. По построению эти две картины унитарно эквивалентны.

А исторически они сначала были написаны как два независимых способа описания эволюции. Гайзенберг изначально писал не операторы в гильбертовых пространствах, такое оформление математического аппарата квантовой теории появилось чуть позже. Он использовал пространство столбиков, брал матричные конструкции, поэтому операторы у него были квадратными матрицами в пространстве этих столбиков. Фактически Гайзенберг использовал в качестве пространства чистых состояний пространство l_2 , которое мы уже вспоминали.

Шредингер тоже изначально писал своё уравнение не относительно векторов абстрактного гильбертова пространства, а относительно волновых функций, которые явно определял как элементы функционального пространства L_2 .

С точки зрения нашей современной картины, которая появилась через несколько лет после статей Шредингера и Гайзенберга, они просто взяли разные представления, реализации пространства чистых состояний. Но поначалу даже была дискуссия, какой подход более правильный. А фон Нейман доказал их унитарную эквивалентность, и после этого появилась идея ввести абстрактное гильбертово пространство, в котором мы можем работать и в общем виде, и выбирая при желании любое удобное нам представление. Тогда уже сложился современный аппарат, которым мы собираемся пользоваться.

Эволюция в картине Дирака

В действительности картин существует бесконечно много. Мы сразу понимаем по логике, что, если можем связать эволюционные изменения и с вектором состояния, и с оператором наблюдаемой, никто не мешает поделить их на две части и связать одну с векторами состояний, а другую с операторами наблюдаемых. Сначала может быть непонятно, зачем это нужно, но математически сразу ясно, что это возможно. Мы будем активно использовать это в следующем семестре, в решении нестационарных задач.

В нестационарных задачах можно разбить произвольный зависящий от времени явно нестационарный гамильтониана на часть \hat{H}_0 , которая явно от времени не зависит, то есть стационарную часть гамильтониана, и некий оператор $V(t)$, куда мы отправим всю явную зависимость от времени:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + V(t) \quad (4.23)$$

Его в этом случае обычно называют нестационарным возмущением. Тогда возникает картина, когда эволюционные изменения, связанные со свободной эволюцией, стационарной эволюцией системы, можно связать, как обычно делают, с операторами наблюдаемых. А влияние нестационарного возмущения мы изучаем по его влиянию на эволюцию векторов состояния.

Это обычно и называют картиной Дирака. Также в литературе встречается название представление взаимодействия, которое совершенно синонимично. В ней эволюционирует и вектор состояния, и оператор наблюдаемой. Закон эволюции вектора состояния оказывается

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_D\rangle}{\partial t} = \hat{V}(t) |\psi_D\rangle, \quad (4.24)$$

и мы тоже задаём некое начальное состояние

$$|\psi_D(t_0)\rangle = |\psi^{(0)}\rangle \quad (4.25)$$

Задача (4.24) и (4.25) определяет эволюционирующий, зависящий от времени вектор состояния в картине Дирака $|\psi_D(t)\rangle$. И точно также операторы наблюдаемых

$$\frac{\partial \hat{F}_D}{\partial t} = \frac{\partial \hat{F}_D}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_D, \hat{F}_D] \quad (4.26)$$

Мы опять понимаем под частной производной дифференцирование явной зависимости, с начальным условием

$$\hat{F}_D(t_0) = \hat{F}_D \quad (4.27)$$

Решение (4.26) и (4.27) выдаёт эволюционирующий дираковский оператор наблюдаемой $\hat{F}_D(t)$.

Разумеется, довольно легко понять и при желании в явном виде доказать, что эта картина унитарно эквивалентна картинам Шредингера и Гейзенберга. Само разбиение (4.23) возможно на любую пару, мы всегда можем разбить гамильтониан на две части. Но

с точки зрения физики это имеет смысл, только если данные части чем-то явно различаются. Самое явное различие, когда одна часть гамильтониана не зависит явно от времени и является стационарной, тогда её эволюцию обычно легко анализировать, а вторая является нестационарной и требует более вдумчивого и аккуратного анализа.

Тем самым мы фактически упрощаем задачу (4.24–4.25), потому что задачу (4.26–4.27) мы легко решим, и все сложности с решением перейдут в первую. То есть мы выделяем всю сложную часть задачи в одну более компактную постановку.

Мы привели здесь картину Дирака, потому что потом будем ей активно пользоваться, а также чтобы лучше понять, что выбор картины описания эволюции, как и выбор представления нашего абстрактного гильбертова пространства, это исключительно вопрос удобства решения данной конкретной задачи.

На практике, если посмотреть научные статьи, почти все, кому важно изучить эволюцию конкретных физических систем и потом их для чего-то приспособить, предпочитают картину Шредингера. Наверное, человеку легче представлять себе эволюцию волновой функции, волны вероятности, чем переопределение операторов наблюдаемых в каждый момент времени. В этом физичность чувствуется в большей степени.

Картину Гайзенберга предпочитают теоретики, особенно люди, занимающиеся аксиоматической квантовой теорией. То есть изучением общих свойств квантовой теории, когда мы вообще не обращаемся к конкретным системам, в лучшем случае выделяем классы конкретных систем и выясняем свойства данного класса. В этом смысле гайзенбергова картина более удобна, потому что математически и логически более однородна. Для нас вектора состояний в ней – просто некий фон. Мы задали каждую эволюционную линию каким-то представителем и забыли про пространство чистых состояний, а работаем только с операторами.

Поиск законов сохранения системы

Есть один вопрос, при ответе на который абсолютно все пользуются картиной Гайзенберга. Это случается, когда мы хотим изучить некую физическую систему и ищем, есть ли у неё законы сохранения, которые могут помочь анализировать её поведение.

Мы уже коротко упоминали, почему так происходит. Сохраняющаяся величина в квантовой теории не как в классике, когда время идёт, мы её мерим, а значение не меняется. Здесь значение наблюдаемой может измениться в одном и том же состоянии, в разных измерениях могут получаться разные значения с разными вероятностями. Поэтому в квантовой теории естественно называть интегралом движения наблюдаемую, у которой с течением времени не меняется предсказываемая статистика результатов измерений – среднее значение, дисперсия, центральные моменты всех порядков, то есть распределение вероятностей реализации. В какой бы момент времени мы бы ни производили измерение, у нас всегда могут выпасть одни и те же значения с одними и теми же вероятностями, статистика в любой момент времени одинакова. А уже какое

конкретно выпадет, определяется случайными факторами, мы это никак не контролируем.

Если мы хотим установить такую вещь, то говорим, что вся статистика считается через скалярные произведения, через матричные элементы наблюдаемых. В картине Шредингера эти матричные элементы и зависят от эволюционирующих в обкладке векторов состояний, и, если, например, наблюдаемая содержит явную зависимость от времени, содержат и возможные изменения самого оператора наблюдаемых. В общем, анализ того, что все эти конструкции не меняются, требует некоего математического искусства.

В картине Гайзенберга всё элементарно. У нас в обкладках стоят постоянные вектора, поэтому все матричные элементы по все базисным векторам данного оператора не будут меняться с течением времени, просто если этот оператор не будет меняться. То есть в этом случае мы говорим, что \hat{F}_H – это интеграл движения, сохраняющаяся величина для нашей квантовой системы в том смысле, что его статистика измерений неизменна. Оказывается, что данное утверждение совершенно равносильно тому, что

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = 0 \quad (4.28)$$

Это проверить гораздо проще, чем анализировать неизменность шредингеровых матричных элементов. Так что, если нас спрашивают, является ли \hat{F}_H интегралом движения системы, мы просто напишем уравнение

$$\frac{\partial \hat{F}_H}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H] = 0 \quad (4.29)$$

Важно помнить, что оно содержит два слагаемых. И привычное нам утверждение, что, если величина явно не зависит от времени и коммутирует с гамильтонианом, то она является интегралом движения, верно, так как оба слагаемых будут нулями. Но утверждение, что интегралами движения бывают только такие величины, неверно.

Можно привести довольно много примеров наблюдаемых, у которых оба слагаемых не нули, но их сумма равна нулю. Один вообще тривиальный, который относится ко всем замкнутым системам. В релятивистской механике это так называемый галилеев момент. Если мы введём для замкнутой системы точечных квантовых частиц оператор

$$\hat{k} = \sum_i m_i \hat{r}_i - t \cdot \sum_i \hat{p}_i, \quad (4.30)$$

t просто входит в определение данной величины, и тем не менее, это интеграл движения. То есть гайзенбергов оператор

$$\hat{k}_H = const \quad (4.31)$$

для замкнутой системы.

Здесь, как и в гамильтоновской механике, если мы разделим \hat{k} на полную массу системы, то есть на сумму всех масс m_i , в первом слагаемом в (4.30) будет оператор координаты центра масс, а во втором скорость центра масс. И утверждение (4.31) эквивалентно тому, что центр масс замкнутой системы движется равномерно прямолинейно, что действительно так.

Это можно доказать напрямую, честно подставив (4.30) в условие (4.29) и убедившись, что действительно получится ноль. Это довольно легко считается, особенно если перед этим проверить, что суммарный импульс для замкнутой системы – интеграл движения.

Надо сказать, что нерелятивистский гамильтониан – сумма кинетических и потенциальных энергий, и потенциальная зависит только от разностей координат частиц. Это и есть условие замкнутости системы, что частицы взаимодействуют только между собой. Ведь если мы добавим потенциальную энергию, зависящую от координаты только одной частицы, то добавим в эту систему внешнее поле. Тогда, если закон взаимодействия у всех пар частиц одинаков, например, они все одинаково заряжены, и V – энергия электростатического взаимодействия в нерелятивистском пределе, будет

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{ij} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (4.32)$$

Для такой задачи и полный импульс, и \hat{k} будут интегралами движения.

С точки зрения теории групп мы знаем, что теорема Нётера связывает каждый закон сохранения с симметрией. Сохранение полного импульса, как мы уже вспоминали, связано с симметрией относительно трансляции по координатам x, y, z , а сохранение \hat{k} на самом деле следствие симметрии относительно преобразований Галилея в нерелятивистской механике. В релятивистской есть совершенно аналогичная величина, её называют лоренцев момент, на самом деле определяющийся той же формулой, что и (4.30), но там \hat{p}_i будет уже релятивистским импульсом. В этом случае сохранение величины \hat{k} будет следствием симметрии относительно преобразований Лоренца, а не Галилея. Названия галилеев и лоренцев моменты напрямую указывают на то, с какой симметрией динамики системы связано сохранение этой величины.

Нам интересно понять, какова схема решения задач эволюции в шрёдингеровой в гайзенберговой картинах.

Задача 1. Схема решения задачи об эволюции в картине Шрёдингера

Рассмотрим схему решения в картине Шрёдингера. Надо решить задачу

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle \quad (4.33)$$

с неким начальным условием

$$|\psi(t_0)\rangle = |\psi^{(0)}\rangle \quad (4.34)$$

Мы сильно помогли себе условием, что анализируем стационарную систему, то есть такую, где гамильтониан явно не зависит от времени:

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0 \quad (4.35)$$

В этом случае можно решить стационарную задачу

$$\hat{H}|\psi_{E\alpha}\rangle = E|\psi_{E\alpha}\rangle \quad (4.36)$$

Наличие индекса α учитывает возможность того, что собственное значение энергии может быть вырожденным. Тогда в (4.36) будет стоять E без всякого α , а собственные вектора гамильтониана мы нумеруем значением E и индексом α , который пробегает значения от 1 до кратности вырождения этого уровня энергии s_F . Их так всегда можно занумеровать.

Раз оператор \hat{H} стационарный, в гильбертовом пространстве существует опять же стационарный, то есть не зависящий от времени полный ортонормированный базис из собственных векторов гамильтониана $\{|\psi_{E\alpha}\rangle\}$. Тогда любой вектор гильбертова пространства можно разложить по этим векторам. Разложим по ним решение уравнения (4.33).

В задачах, где очевидно, какой картиной мы пользуемся, не будем писать у операторов и векторов индексы s и H , чтобы не загромождать обозначения. Эту задачу мы решаем в шредингеровой картине, значит, все присутствующие здесь операторы и вектора по умолчанию шредингеровы. Интересующий нас вектор можно записать как

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{E\alpha} \langle \psi_{E\alpha} | \psi(t) \rangle |\psi_{E\alpha}\rangle, \quad (4.37)$$

где естественными коэффициентами разложения будут являться скалярные произведения. Можно записать

$$\langle \psi_{E\alpha} | \psi(t) \rangle |\psi_{E\alpha}\rangle \equiv c_{E\alpha}(t) \quad (4.38)$$

Если подставить разложение (4.37) в уравнение (4.33), дифференцироваться в этом случае будут только $c_{E\alpha}$. А в правой части уравнения (4.33) \hat{H} , действуя на сумму из (4.37), пройдёт через сумму и коэффициент разложения, подействует на свой собственный вектор и вытащит E . И мы получим уравнение, в котором в правой и левой части стоит разложение по полному ортонормированному базису. Разумеется, это равенство имеет место, когда совпадают коэффициенты разложения справа и слева.

Тогда для коэффициентов $c_{E\alpha}$ мы получаем обыкновенное дифференциальное уравнение

$$i\hbar \frac{dc_{E\alpha}}{dt} = E \cdot c_{E\alpha} \quad (4.39)$$

А начальное условие – коэффициент разложения начального вектора состояния по нашему базису

$$c_{E\alpha} = \langle \psi_{E\alpha} | \psi^{(0)} \rangle \quad (4.40)$$

Решением уравнения (4.39) являются временные экспоненты. И мы обнаруживаем, что наше решение имеет вид

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{E\alpha} \langle \psi_{E\alpha} | \psi(t) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} |\psi_{E\alpha}\rangle \quad (4.41)$$

Это равенство решает нашу задачу в общем виде. Мы обнаружили, что на самом деле знаем решение всех уравнений Шредингера со всеми начальными условиями. Но для того, чтобы им воспользоваться, нужно знать решение спектральной задачи (4.36) для гамильтониана, оператора энергии.

Так что общий вывод, что для стационарных квантовых систем, то есть тех, у которых гамильтониан явно не зависит от времени, решение уравнения Шредингера сводится к решению спектральной задачи для оператора энергии. Поэтому эту спектральную задачу часто называют стационарным уравнением Шредингера. Как только мы его решим в каком-то функциональном пространстве, найдём собственные функции и собственные значения, сразу для любого начального состояния пишем ответ для эволюционирующего шредингера вектора.

В этом главная простота шредингеровской картины. Для стационарных задач она позволяет свести нестационарную задачу к стационарной. На ММФ часто говорили, что нам удобно воспользоваться методом разделения переменных и искать решение нестационарной задачи в виде разложения по собственным функциям стационарной с коэффициентами, зависящими от времени. Это мы сейчас и сделали в отношении уравнения Шредингера.

Задача 2. Схема решения задачи об эволюции одномерной точечной частицы в потенциальном поле в картине Гайзенберга

Теперь разберёмся, что с картиной Гайзенберга для стационарных систем. Мы уже знаем, что описание эволюции системы в картине Гайзенберга сводится к решению фундаментальных уравнений Гайзенберга. В качестве примера возьмём точечную квантовую частицу, совершающую одномерное движение в заданном потенциальном поле. Чтобы задать эту задачу, достаточно написать гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + u(\hat{x}), \quad (4.42)$$

где u – форма потенциальной энергии.

Фундаментальное уравнение Гайзенберга в этом случае

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}], \quad (4.43)$$

здесь мы тоже не будем писать индекс \hat{H} ,

с функцией от самого себя оператор \hat{x} коммутирует, поэтому всё сведётся к вычислению коммутатора

$$\frac{i}{2m\hbar} [\hat{p}_x^2, \hat{x}] \quad (4.44)$$

Очень удачно, что операторы координат и импульсов – как раз пара операторов, коммутирующих со своим коммутатором, который мы анализировали на первом семинаре. Потому что коммутатор

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \cdot \hat{1}, \quad (4.45)$$

а с оператором, кратным единичному, коммутирует всё. Так что можно написать в (4.44) производную по \hat{p}_x как по импульсу, будет $2\hat{p}_x$. И умножить это на коммутатор

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar \quad (4.46)$$

Тогда из (4.44) получится

$$\frac{i}{2m\hbar} 2\hat{p}_x(-i\hbar) = \frac{\hat{p}_x}{m} \quad (4.47)$$

В результате мы обнаружили, что скорость для гайзенберговских операторов – это импульс, разделённый на массу. А когда мы запишем

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_x], \quad (4.48)$$

наоборот, первого слагаемого в (4.42) не будет, потому что \hat{p}_x коммутирует с \hat{p}_x^2 , и мы получим

$$\frac{i}{\hbar} [u(\hat{x}), \hat{p}_x] \quad (4.49)$$

Если опять вспомнить (4.45) и учесть, что тогда явно появится величина, получающаяся из функции $u(\hat{x})$ дифференцированием по x как по символу, то получится

$$-\frac{\partial u_x}{\partial x}(\hat{x}) \quad (4.50)$$

Здесь мы обнаружим, что производная импульса равна силе, действующей на частицу.

То есть фундаментальные уравнения Гайзенберга для стационарных систем совпадают с классическими уравнениями Гамильтона, с классическими уравнениями движения, правда, с точностью до того факта, что \hat{x} и \hat{p}_x не коммутирующие операторы. Это означает, что в классических уравнениях, если сила зависит от координаты и импульса, мы можем их переставлять как хотим, а в квантовой задаче нет.

Но у нас не так часто появляются силы, зависящие от скорости, поэтому есть много задач, где это верно. И можно сформулировать справедливое утверждение, что, если мы можем явно решить классические уравнения Гамильтона, то сможем явно решить для неё и фундаментальные уравнения Гайзенберга. То есть нетривиальности, связанные с отсутствием коммутативности, довольно легко обходятся. Главное, чтобы задача была интегрируемой, чтобы мы смогли её проинтегрировать.

Видно, что оба подхода не сложные. Шредингер сводит нас к решению стационарного уравнения Шредингера, то есть задачи на собственные значения и собственные функции гамильтониана. А гайзенбергов фактически адресует нас к решению классических гамильтоновых уравнений движения.

Но нужно помнить, что мы всё решаем относительно операторнозначных функций времени. Например, уравнения (4.43) и (4.48) мы должны решить ещё и с начальными условиями, и $\hat{x}(t_0)$ и $\hat{p}_x(t_0)$ должны быть именно операторами. То есть константы интегрирования в этих уравнениях будут операторными.

Итак, мы осознали, как решаются задачи по описанию эволюции и даже заодно выяснили, как исследовать некоторые задачи на существующие в них интегралы движения.

Теорема Нётера в нерелятивистской квантовой механике

Пусть для данной системы есть некая наблюдаемая, которая явно не зависит от времени и коммутирует с гамильтонианом:

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0 \quad (4.51)$$

$$[\hat{H}, \hat{F}] = 0 \quad (4.52)$$

Понятно, что эта наблюдаемая и есть интеграл движения, так как гайзенбергов оператор некая константа:

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = 0 \quad (4.53)$$

Оператор \hat{F} эрмитов. Если мы определим унитарный оператор

$$\hat{u} = e^{i\alpha\hat{F}}, \quad (4.54)$$

где $\alpha \in \mathbb{R}^1$, то сразу скажем, что в реальности определили группу $U1$ с генератором \hat{F} . Это унитарная одномерная группа с единственным параметром α , все преобразования данной группы унитарны и строятся через оператор \hat{F} по формуле (4.54).

Такую унитарную группу $U1$ можно связать с каждым интегралом движения. Если у нас есть набор интегралов движения, то в (4.54) можно поставить не $\alpha\hat{F}$, а $\alpha_1\hat{F}_1 + \alpha_2\hat{F}_2 + \dots$, то есть можно определить унитарные группы большей размерности с соответствующим набором генераторов.

Рассмотрим, что будет в отношении этой группы преобразований, если мы произведём преобразования векторов состояний операторов наблюдаемого с помощью данного унитарного преобразования. Пусть есть пространство чистых состояний $\{|\psi\rangle\}$, в котором все чистые состояния описываются векторами $|\psi\rangle$, и в нём определены операторы наблюдаемых \hat{F} . Когда мы производим унитарное преобразование, имеем в виду, что произвольный вектор $|\psi\rangle$ отображаем в произвольный вектор

$$|\psi'\rangle = \hat{u}(\alpha)|\psi\rangle, \quad (4.55)$$

при этом все нормированные на единицу вектора переходят в нормированные на единицу. А операторы наблюдаемых \hat{F} можно преобразовать в

$$\hat{F}' = \hat{u}^+ \hat{F} \hat{u}^+ \quad (4.56)$$

Как мы видели, такое преобразование выдаст физически эквивалентную картину, поскольку все матричные элементы всех операторов по всем состояниям при этом не поменяются. Следовательно, все физические предсказания от этого не изменятся. То есть можно ту же самую квантовую систему в тех же состояниях, с теми же наблюдаемыми просто описывать в чуть-чуть изменённой форме.

Возьмём уравнение эволюции вектора состояния

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi\rangle \quad (4.57)$$

и попробуем написать уравнение эволюции для $|\psi'\rangle$. Это сделать довольно легко, поскольку если $|\psi'\rangle$ выражается (4.55), то сам $|\psi\rangle$ – это $\hat{u}^+(\alpha)|\psi'\rangle$. Так что можно записать

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{u}^+ |\psi'\rangle) = \hat{H} \hat{u}^+ |\psi'\rangle \quad (4.58)$$

Здесь всё получится довольно просто, потому что оператор \hat{F} , а вместе с ним и \hat{u} не зависят от времени. Можно вынести \hat{u} из-под знака $\frac{\partial}{\partial t}$, а потом умножить (4.58) слева на оператор \hat{u} и воспользоваться тем, что $\hat{u}\hat{u}^+ = 1$. Будет

$$i\hbar \frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t} = \hat{u} \hat{H} \hat{u}^+ |\psi'\rangle \quad (4.59)$$

То есть, по сути, получается такое же уравнение, что и (4.57), только вместо старого гамильтониана в нём стоит конструкция $\hat{u} \hat{H} \hat{u}^+$. Но ведь \hat{u} задаётся выражением (4.54), где в показатели степени стоит \hat{F} , а по условию \hat{H} коммутирует с \hat{F} . Из этого следует, что \hat{H} коммутирует с \hat{u} , а значит, мы можем переставить \hat{u}^+ в (4.59) влево от \hat{H} и обнаружить, что

$$\hat{u} \hat{H} \hat{u}^+ = \hat{H} \quad (4.60)$$

То есть унитарное преобразование, генератором которого является интеграл движения, не меняет уравнение динамики системы, и \hat{u} естественно называть преобразованием симметрии динамики нашей системы.

Обратим внимание, что мы определили преобразование симметрии динамики как преобразование, не меняющее уравнение динамики, в данном случае уравнение Шредингера. Фактически мы пошли по более простому пути и доказали, что унитарное преобразование, генератором которого является интеграл движения, является преобразованием симметрии динамики. Гораздо более интересным является обратное утверждение, теорема Нётера, которую мы много раз упоминали. Если есть унитарное преобразование, являющееся симметрией динамики данной системы, генератор этого преобразования есть интеграл движения.

Всякой симметрии динамики квантовой системы отвечает некий интеграл движения. Причём связь мы знаем не только абстрактно, но и на конкретном математическом уровне, что интеграл движения – это генератор данного преобразования симметрии. Мы уже много раз видели это в теоретической механике и электродинамике. Например, инвариантность динамики относительно трансляций по координате x приводит к тому, что генератор трансляции по оси x , по сути, оператор \hat{p}_x , является интегралом движения. Такая связь очень информативна и важна для теоретической физики.

Получается, что мы поняли схему доказательства теоремы Нётера в нерелятивистской квантовой механике. Данная теорема замечательна тем, что справедлива и доказана в любой динамической теории, в которой можно что-то строить на основании принципа наименьшего действия. А на данный момент в физике, по сути, другие и не используют. Поэтому теорема Нётера, частный случай которой мы сейчас обнаружили, справедлива во всех формализованных теориях, которыми пользуется человечество: и в ньютоновской механике, и в электродинамике, и в квантовой теории, и в квантовой теории поля, в том числе в суперсимметричных многомерных пространствах. Для нас принцип наименьшего действия – некий выведенный теоретиками обобщающий принцип, который мы превратили в принцип генерации всех физических теорий.

На самом деле, как только наши задачи станут чуть сложнее простых одномерных, которые пока чаще всего используем в качестве примеров, мы обнаружим, что без симметрии динамики толком ничего не сможем решать. Это нам хорошо известно по тому же ММФ. Когда там давались задачи, которые можно решить вручную, они все были снабжены какой-то разумной симметрией в области симметрии уравнений, потому что при её нарушении придётся решать численно.

Так что когда мы будем решать задачи даже для стационарных систем, в основном будем начинать с решения спектральной задачи для гамильтониана

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (4.61)$$

И будем говорить, в многомерной системе бессмысленно её решать, не обращая внимание на симметрии динамики системы. После того, как мы разберёмся с одномерными системами и перед тем как шагнём к многомерным, у нас будет специальное занятие, лекция или семинар, где мы будем смотреть, как используется симметрия динамики при решении спектральной задачи для гамильтониана.

Рассмотрим, в чём базисная идея такого использования. Если (4.54) – это симметрия динамики системы, то для стационарных задач

$$[\hat{u}, \hat{H}] = 0 \quad (4.62)$$

$$[\hat{F}, \hat{H}] = 0 \quad (4.63)$$

Из этого можно сделать вывод, что у данных операторов есть общая полная система собственных функций. Как правило, решая спектральную задачу, мы хотим получить полный ортонормированный базис, составленный из собственных функций гамильтониана. Здесь мы обнаруживаем, что среди этих возможных базисов существует такой, собственные вектора которого одновременно есть собственные функции \hat{F} или \hat{U} .

Так что мы сразу говорим, что при поиске полного ортонормированного базиса из собственных векторов \hat{H} можно к уравнению (4.61), которое мы решаем, добавить уравнение

$$\hat{F}|\psi\rangle = f|\psi\rangle \quad (4.64)$$

Полученная система уравнений будет совместна. Просто мы таким образом получим не абстрактный полный ортонормированный базис из собственных векторов гамильтониана, а именно тот, который у него общий с оператором \hat{F} . А такой обязательно существует, если \hat{F} – генератор группы симметрии динамики. Если уравнение (4.64) проще, чем (4.61), будет выгоднее сначала решить его и тем самым сразу ограничить произвол в определении собственных векторов $|\psi\rangle$. И уже это решение подставить в (4.61). При этом уравнение упростится, потому что мы будем искать его решение в более узком классе функций, в классе собственных функций оператора \hat{F} .

Такая идея лежит в основе решения большинства многомерных задач. Для дальнейшего нужно смотреть конкретные примеры, которым будет посвящено занятие по использованию принципов симметрии для решения задач.

Чистые и смешанные состояния

У нас наступил момент, когда мы написали и определили всю систему аксиом. Мы уже на прошлом занятии написали аксиому 4 об эволюции, а на этом наполнили её конкретным содержанием. Теперь мы понимаем, что такое картины Шредингера, Гайзенберга, Дирака... и почему там дальше стоит многоточие. В целом, у нас есть правила игры, которыми мы будем пользоваться, не меняя их до конца семестра.

На самом деле не хватает ещё одного элемента. Первая аксиома начиналась со слов о том, что чистым состояниям квантовой системы отвечают нормированные на единицу вектора гильбертова пространства. Когда мы её написали, сказали, что слово «чистым» требует пояснений, и этого ещё не сделали.

Не все состояния квантовых систем можно отнести к классу чистых. Мы уже тогда сказали, что первая аксиома заодно определяет чистые состояния. То есть на самом деле чистые состояния – именно те, которым можно поставить в соответствие вектор состояния, нормированный на единицу, из гильбертова пространства. И они описывают какие-то физически реализуемые чистые состояния нашей системы. Но такой вектор можно поставить в соответствие не всем состояниям квантовой системы.

Мы можем подобрать полный набор наблюдаемых, ведь если система имеет s степеней свободы, наверняка существует s независимых попарно коммутирующих

операторов, у которых данных вектор является общим собственным вектором. Это означает, что мы можем загнать систему в данное состояние последовательностью измерений. То есть мы производим измерения, говорим, что померили эти наблюдаемые, они образуют полный набор, и мы их загнали в определённое состояние, вектор которого знаем с точностью до фазового множителя.

Но мы не всегда можем загнать квантовую систему в заданное состояние. Физическая причина этого связана с понятием квантово-механической когерентности, которое обсуждалось в самом начале. Мы можем в любом базисе записать любой вектор состояния, нормированный на единицу, и с точки зрения волн вероятности это будет означать, что мы записали соответствующую волну вероятности как когерентную сумму базисных волн вероятностей. Ведь коэффициенты разложения везде будут просто комплексными числами, так что и амплитуду, и относительную фазу вклада мы будем знать. То есть действительно речь идёт о когерентной смеси волн вероятностей.

Но бывают и некогерентные. Вспомним опыт Юнга с подсматриванием за электронами. У нас есть хорошо сколлимированный пучок электронов, то есть разброс импульсов в пучке очень мал. Например, если пучок имеет ширину d , разброс не может быть меньше $\frac{\hbar}{d}$, иначе будет неопределённое значение импульса. Пучок очень широкий, то есть размеры установки, в том числе ширмы и дырочек, значительно меньше d , апертуры пучка. Так что при разбросе импульсов порядка $\frac{\hbar}{d}$ с точки зрения установки импульс практически точный. Ведь если электрон провзаимодействовал с установкой, она внесёт этим взаимодействием квантово-механическую неопределённость импульса порядка $\frac{\hbar}{d_{уст}}$, где $d_{уст}$ – её размер, и она будет гораздо больше $\frac{\hbar}{d}$, которая была в начале.

Тогда можно сказать, что начальное состояние – практически состояние с определённым импульсом, почти плоская волна. Она дифрагирует на отверстии, даёт дифракционный конус, дальше мы ставим в области этого конуса ширму с двумя отверстиями, получаем два когерентных источника и наблюдаем на экране интерференционную картину несмотря на то, что выпускаем следующий электрон после того, как первый оставил свою точку на экране-фотопластинке. После набора статистики точки всё равно в неё соберутся.

Но есть подглядывать за электронами, то есть поставить прибор, который будет фиксировать, через какую из двух щелей электрон проходит, интерференционной картины не будет. Мы скажем, что наше вмешательство сделало систему из прибора, электрона и фотопластинки незамкнутой. Появилось дополнительное внешнее воздействие, с помощью которого мы и пытаемся подглядеть, где электрон проходил. Суть в том, что внешнее вмешательство разрушает квантово-механическую когерентность. Или, по-другому, микрообъекты такие чувствительные к внешним воздействиям, что их нельзя от них изолировать. Замкнутая квантовая система – некая

фикция, на самом деле вся остальная Вселенная всегда действует на любой микрообъект в системе, которую мы такой объявили.

И так, и так мы будем вынуждены сказать, что существуют состояния, которые нельзя однозначно зафиксировать такой системой измерений. То есть когда нельзя с достоверностью загнать нашу систему посредством системы измерений, которые не описываются векторами состояний.

Разбираясь, как описывать такие состояния, мы познакомимся с концепцией смешанных состояний. Мы так и будем говорить, что чистые состояния можно описать вектором состояния, а для смешанных нужно использовать что-то другое. Это будет последней темой, которую надо обсудить для установления правил игры. Следующая лекция будет посвящена смешанным состояниям, семинар после неё – эволюции квантовых систем. Мы посмотрим конкретные задачи, в которые будем уже включать и задачи про смешанные состояния, предполагая, что эта концепция будет уже знакома. Так что тему следующего семинара можно обозначить как эволюцию чистых и смешанных состояний.

Тема про смешанные состояния интересна и тем, что её можно рассказать очень по-разному. Блохинцев в своём учебнике рассказывает её, опираясь на представления о квантовой механике, характерные для Фока. В Ландау – Лифшице зафиксированы представления Ландау. То, что они разные, можно заметить, например, рассматривая, как описаны смешанные состояния. Поэтому следующую лекцию мы начнём с трёх определений этого состояния. Одно будет в духе Ландау, другое в духе Фока, а третьим пользуется большинство современных физиков, занимающихся квантовой теорией. Ландау и Фок хотели понять, как всё устроено, в их определениях чётко видна попытка объяснить, откуда всё взялось. Но сейчас большинство физиков ориентируются на математический аппарат, который выдаёт правильные результаты, поэтому предпочитают определять этот объект с математической точки зрения, чтобы понимать, как с ним работать. Мы будем пользоваться разными определениями, чтобы понимать, что они все работают.

Лекция 5. Смешанные состояния

Как и обещали, начнём лекцию с определений понятия оператор (матрица) плотности. Мы уже поняли, что каждому оператору отвечает его матрица в некотором полном ортонормированном базисе в нашем гильбертовом пространстве чистых состояний, и по заданной матрице можно построить сам оператор. Так что оператор и матрица – взаимозаменяемые понятия.

Определение матрицы плотности «в духе Ландау»

Сформулируем первое определение в духе Ландау, потому что по этой схеме построено определение в учебнике Ландау-Лифшица. Пусть есть некоторая замкнутая квантовая система. Вообще микрочастицы, квантовые объекты, очень чувствительны к внешним воздействиям, поэтому вопрос, можно ли считать объект замкнутым или нет, довольно сложный в каждом конкретном случае реального объекта.

Но мы предполагаем, что какие-то замкнутые системы всё-таки существуют. Например, можно считать, что замкнутой системой является вся Вселенная. Обозначим её областью на рис. 5.1. Пусть есть незамкнутая подсистема этой системы, то есть взаимодействующая с остальной системой. Она и будет нашей исследуемой системой, и для неё можно ввести некий полный набор наблюдаемых.

По нашему классическому определению, если мы произведём измерение этих величин полного набора, будем знать с точностью до фазы состояние данной системы, если пренебречь её взаимодействием с остальным миром. Но, к сожалению, это взаимодействие ненулевое, поэтому так считать нельзя. Как и считать, что мы этим измерением величин полного набора загоним нашу измеряемую подсистему в чистое состояние и что вообще для неё существует такое понятие.

Поэтому введём совершенно новый объект. Пусть величины полного набора – это некоторые $x_1 \dots x_s$, где s – число степеней свободы измеряемой системы. Обозначим $q_1 \dots q_N$, где N , наверное, очень велико, но конечно, все остальные наблюдаемые, дополняющие наблюдаемые x до полного набора для всей вселенной, то есть до настоящей замкнутой системы, для которой полный набор наблюдаемых имеет традиционный смысл.

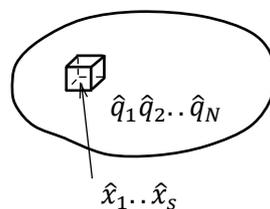


Рис. 5.1. Незамкнутая подсистема в замкнутой системе

Тогда можно ввести некую волновую функцию. Некому чистому состоянию вселенной $|\psi_B\rangle$ отвечает некая её волновая функция в представлении, где она зависит от $x_1 \dots x_s$ и $q_1 \dots q_N$, то есть

$$\psi(x_1 \dots x_s; q_1 \dots q_N) \quad (5.1)$$

Такой волновой функцией можно описать чистое состояние вселенной.

Соответственно, определим некую матрицу в базисе из собственных векторов полного набора $x_1 \dots x_s$ некоего оператора $\hat{\rho}$, который по определению будет

$$\rho(x_1 \dots x_s, x'_1 \dots x'_s) \equiv \sum_{q_1 \dots q_N} \psi(x_1 \dots x_s; q_1 \dots q_N) \psi^*(x'_1 \dots x'_s; q_1 \dots q_N) \quad (5.2)$$

Если переменные q принадлежат непрерывному спектру, под обобщённым суммированием по $q_1 \dots q_N$ будет подразумеваться интегрирование по соответствующим переменным, то есть тут суммирование именно в обобщённом смысле. Реально мы для любой наблюдаемой, зависящей от x и q , как бы производим усреднение по переменным q . Мы в (5.2) уже просуммировали по x , по нему уже нет суммирования. Более того, они разные в ψ и ψ^* , поэтому реально мы в (5.2) получаем объект, зависящий от двух наборов штрихованных и нештрихованных значений переменных x .

Само пространство чистых состояний подсистемы мы смогли определить, а утверждать, что можем загнать эту подсистему в чистое состояние, зафиксировать для неё вектор чистого состояния путем измерений, нельзя. Так что давайте характеризовать состояния подсистемы такими операторами плотности, матрицу которых только что определили.

Утверждение (5.1) особенно тем, что оно явно содержит не формально-математический, а понятийный аспект. Оно прямо указывает, что такие, как мы будем называть, смешанные состояния возникают из-за того, что системы, над которыми мы производим измерения, являются незамкнутыми. Философ бы сказал, что это онтологическое определение, оно рассказывает о сущности введённого понятия.

А с точки зрения человека, решающего практические задачи, понимание этой сущности никак не повлияет на конкретные вычисления, которые мы будем производить при их решении. Всё, что должны уметь делать – исследовать свойства произвольного смешанного состояния, описываемого операторами плотности (5.2).

То есть, по сути, мы производим замену аксиомы 1. Она звучала так, что чистым состоянием замкнутой системы отвечают нормированные на единицу вектора в гильбертовом пространстве чистых состояний. А теперь мы говорим, что всем состояниям квантовой системы отвечают матрицы или операторы плотности, определённые как (5.2).

Главная проблема определения (5.2) в том, что им невозможно пользоваться технически, ведь интересующий объект, матрица плотности некоего состояния, определена через волновую функцию всей вселенной, которую мы точно не знаем. Не

имея доступа к измерениям над остальной частью нашей замкнутой системы, мы никогда это состояние не определим. Таким образом, в реальности мы должны работать со всеми операторами, которые в принципе можно представить в виде (5.2), и считать, что каждый подобный оператор описывает некое смешанное состояние нашей квантовой системы.

При этом понятно, что для любой наблюдаемой, не зависящей от q , то есть для $\hat{F}(\hat{x}_1 \dots \hat{x}_s, t)$, относящейся только к нашей подсистеме, процедура измерения будет выдавать только собственные значения f соответствующего оператора с вероятностью, которая определяется следующим образом. Мы должны усреднить оператор \hat{F} по полной волновой функции всей вселенной (5.1). Но при этом усреднение по $q_1 \dots q_N$ в конструкции (5.2) уже выполнено, останется усреднить только по $x_1 \dots x_s$.

Произвольный оператор \hat{F} , как и любой эрмитов оператор, можно представить в виде спектрального разложения

$$\hat{F} = \sum_f f |\psi_f\rangle \langle \psi_f| \quad (5.3)$$

Тогда возьмём матрицу оператора $\hat{\rho}$, умножим её на матрицу оператора \hat{F} и посчитаем след. След – линейная операция по отношению к каждому из аргументов, поэтому сумма по \hat{F} и числа f вынесутся, и возникнет сумма произведений $\hat{\rho}$ на оператор, являющийся проектором на состояние ψ_f , собственный вектор нашего оператора \hat{F} . Под знаком следа все матричные конструкции можно, как мы знаем, циклически переставлять. Поэтому, когда мы в конструкции в (5.3) переставим $\langle \psi_f|$ перед f , у нас получится число, то есть скалярное произведение $\langle \psi_f|$ на результат действия $\hat{\rho}$ на $|\psi_f\rangle$. То есть получится

$$\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{F}) = \sum_f f \cdot \langle \psi_f | \hat{\rho} | \psi_f \rangle \quad (5.4)$$

Из этого выражения мы понимаем, что $\langle \psi_f | \hat{\rho} | \psi_f \rangle$ является выражением для среднего значения \hat{F} в состоянии $\hat{\rho}$. Тогда вероятность получения собственного значения f ω_f нужно написать через собственные вектора нашей наблюдаемой. То есть для конкретного значения, а вероятность определяется для конкретного значения, это среднее оператора $\hat{\rho}$ по состоянию $|\psi_f\rangle$:

$$\omega_f = \langle \psi_f | \hat{\rho} | \psi_f \rangle \quad (5.5)$$

То есть мы видим, что оператор $\hat{\rho}$ действительно является некой наблюдаемой. И более того, результатами измерения $\hat{\rho}$ являются вероятности, его средние значения в каких-то состояниях – это соответствующие вероятности реализации этого чистого состояния в случае, если система находится в смешанном состоянии $\hat{\rho}$. Вот чем является диагональный матричный элемент оператора $\hat{\rho}$ или его среднее. А из (5.4) мы получаем формулу, что $\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{F})$ на самом деле среднее значение наблюдаемой \hat{F} в смешанном состоянии $\hat{\rho}$, то есть \bar{F}_ρ .

После этого мы производим изменение в аксиоме 2 об измерениях. Она гласила, что, если мы измеряем наблюдаемую \hat{F} у квантовой системы, находящейся в состоянии $|\psi\rangle$, то получаем только собственные значения с вероятностями ω_f , которые вычисляются как квадраты модулей скалярных произведений $\langle\psi_f|\psi\rangle$. А теперь говорим, что при измерении наблюдаемой \hat{F} , относящейся к нашей подсистеме, в состоянии, описываемом оператором или матрицей плотности $\hat{\rho}$, мы получаем только собственные значения f этого оператора с вероятностями, которые считаются по формуле (5.5).

По сути, мы поняли, как в концепции (5.1) должно выглядеть описание процедуры измерения любой наблюдаемой, относящейся только к нашей изучаемой подсистеме. Мы хотим описать физику ситуации, когда работаем с маленькой незамкнутой подсистемой, входящей в большую замкнутую, и не имеем доступа к измерениям над всеми переменными большой замкнутой системы. В аксиоме 1 мы будем ставить в соответствие состояниям операторы плотности $\hat{\rho}$. В аксиоме 2 предъявим новую формулу (5.5) для вычисления вероятности реализации конкретного значения измеряемой величины. И при этом наши операторы плотности должны удовлетворять некому набору требования.

Давайте посмотрим, какому набору требований будет удовлетворять оператор с матрицей (5.2). Во-первых, непосредственно из определения видно, что он эрмитов, если переставим x, x' и символ сопряжения, ничего не изменится:

$$\hat{\rho}^+ = \hat{\rho} \quad (5.6)$$

То есть он сам по себе является некой наблюдаемой для нашей системы.

Во-вторых, легко доказать, что, как говорят математики, он является неотрицательно определённым. Если мы домножим ψ в (5.2) на любую функцию сопряжённую функцию от x , а ψ^* на любую несопряжённую от x' и просуммируем не только по q , но и по x , возникнет сумма квадратов модулей некоторых величин, что не может быть отрицательной величиной. То есть для любого вектора $|\psi\rangle$

$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0, \quad (5.7)$$

Это вполне естественно, потому что потом в (5.5) мы должны будем эти выражения для конкретных состояний считать вероятностями, а те должны быть вещественными неотрицательными числами. Если вероятность окажется комплексной или отрицательной, надо будет отдельно объяснять, что это такое.

Также, если мы просуммируем все диагональные матричные элементы $\hat{\rho}$ в некотором базисе, то есть все ω_f , то, с одной стороны, должны получить след оператора $\hat{\rho}$. Ведь в линейной алгебре нам говорили, что след не зависит от того, в каком базисе расписываем матрицу нашего оператора, это инвариантная по отношению к выбору базиса характеристика оператора. А с другой стороны, сумма всех вероятностей всех возможных исходов должны равняться единице, поэтому в любом базисе должно быть

$$\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{F}) = 1 \quad (5.8)$$

Математики скажут, что здесь очень важно ограничить класс используемых операторов. Формально в бесконечномерных пространствах можно привести примеры операторов, которые будут обладать тремя перечисленными свойствами, но при этом их нельзя будет использовать в качестве операторов плотности, так как они становятся сингулярными при вычислении функций от них. И функции от них могут быть сингулярными.

Чтобы избежать этой ситуации, для достижения полной математической строгости, к свойствам, что $\hat{\rho}$ эрмитов и неотрицательно определённый оператор, обычно ещё добавляют требование, что след оператора $\hat{\rho}^2$ является сходящимся рядом или интегралом:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) < \infty \quad (5.9)$$

В большинстве примеров, с которыми мы будем работать, мы обнаружим, что это условие выполняется практически автоматически. Например, ясно, что по умолчанию так будет, оно автоматически выполняется для всех конечномерных матриц. То есть так будет, если мы работаем с матрицей плотности, у которой конечная размерность, если наш базис ортонормированных собственных функций полного набора наблюдаемых рассматривается для нашей системы как конечный.

Хотя с операторами плотности и их матрицами, с которыми мы будем работать, как правило, и в случае бесконечномерной матрицы проблем с этим требованием не будет. Так что это просто некий штрих для обеспечения математической корректности всех рассуждений.

И теперь мы говорим, что с точки зрения определения «в духе Ландау» любой оператор с матрицей (5.2), которая удовлетворяет перечисленным требованиям, в действительности описывает некое смешанное состояние нашей системы. И для нас возникает смысл, что смешанное состояние – это состояние данной подсистемы, усреднённой по всем возможным состояниям остального мира. Когда мы производим измерение только над конкретной подсистемой и считаем, что нам надо усреднить по всем возможным влияниям внешнего мира на неё, получаем такое дважды статистическое описание. Дважды – потому что статистическим уже было описание (5.1) на языке волновых функций и векторов состояния, а мы ещё и произвели усреднение по всем возможным состояниям окружающего мира.

Определение матрицы плотности «в духе Фоке»

Сформулируем второе определение «в духе Фоке». Мы как бы мысленно забываем про первое и формулируем всё заново. В аксиоме 1 мы говорим, что состояниям квантовой системы (опять убирая слово чистым) отвечают операторы плотности, соответствующие квантово-некогерентным смесям чистых состояний со статистическими весами ω_i .

Так что, вообще говоря, произвольное состояние есть некое квантово-некогерентная смесь набора чистых состояний $\{|\psi_i\rangle\}$, где $i = 1..k$, то есть i абстрактное

число, мы можем брать смесь разного количества состояний. И ему в нашем описании отвечает оператор плотности

$$\hat{\rho} = \sum_i \omega_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (5.10)$$

То есть мы строим оператор плотности как сумму проекторов на чистые состояния. ω_i – статистические веса, определяющие вклад в статистику измерений этих чистых состояний, для них верно

$$\omega_i \geq 0 \quad (5.11)$$

и

$$\sum_i \omega_i = 1 \quad (5.12)$$

Данное определение опять имеет онтологическую составляющую и пытается объяснить нам, что такое квантово-когерентное состояние. И опять человеку, просто решающему задачи, это знание не пригодится. Это нужно для того, чтобы мы представляли, как всё устроено.

Вспомним, что в опыте Юнга мы говорили, что, когда не подсматривали за электронами, идущими через две щели, видели на фотопластинке интерференционную картину от двух щелей. А когда стали подсматривать, обнаружили, что интерференционная картина исчезла, и на фотопластинке просто наложение картинок от двух щелей без суммирования вероятностей. Не суммирование волновых функций, допускающих интерференцию, а просто в каждой точке суммирование вероятностей попадания через первую и вторую щель.

С точки зрения определения Ландау, пока мы не проводили измерения, могли в системе ширмы с двумя щелями и фотопластинки пренебречь влиянием внешнего мира на электроны. А когда поставили источник фотонов и детекторы, которые регистрируют рассеянные фотоны, прошедшие через ту или иную щель, включили взаимодействие с внешним миром, и состояние перестало быть чистым. Оно в результате стало смешанным, и мы начинаем описывать всё, усредняя по влиянию внешнего мира. Причём здесь мы это можем выполнить непосредственно, сказать, что пока можем считать замкнутой системой ширму с двумя щелями, электроны, фотопластинку и систему наблюдения – источники фотонов плюс детекторы. После чего можем усреднить по влияниям этой системы фотонов. В результате получится описание состояния электронов, прошедших через две щели, через матрицу плотности, которая просто говорит, что с вероятностью $\frac{1}{2}$ электрон попадёт на фотопластинку, как бы пройдя через первую щель, и с той же вероятностью через вторую. И мы получаем просто наложение картинок от двух щелей – с вероятностью $\frac{1}{2}$ первое событие или второе.

А с точки зрения Фока мы говорим, что наше влияние разрушило квантово-механическую когерентность двух волн, которые до этого были когерентны, волны

вероятности, идущей от первой щели, и от второй. Результат будет тот же самым. Мы опять скажем, что тогда на фотопластинке будем иметь просто наложение картинок от первой и второй щели с вероятностями по $\frac{1}{2}$, если в этой схеме всё симметрично устроено.

Мы понимаем, что разрушение квантово-механической когерентности, наверное, происходит где-то ввиду неконтролируемого влияния остального мира на наш микрообъект. Но это уже попытка объяснить, как всё устроено. А дальше всё пойдёт также. И если мы будем, например, считать среднее значение наблюдаемой \hat{F} в состоянии ρ , с точки зрения сформулированной в определении 2 концепции должны сказать, что должны получить со статистическими весами ω_i результаты измерений в каждом из чистых состояний $|\psi_i\rangle$. То есть

$$\bar{F}_\rho = \sum_i \omega_i \bar{F}_{\psi_i} = \sum_i \omega_i \langle \psi_f | \hat{F} | \psi_f \rangle \equiv \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{F}), \quad (5.13)$$

потому что, когда мы на место $\hat{\rho}$ подставим представление (5.10), опять возникнет сумма по i и снова произведение \hat{F} на проектор $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$. Под знаком следа мы перекинем бра-вектор $\langle\psi_i|$ в начало конструкции и получим в точности среднее $\langle\psi_f | \hat{F} | \psi_f \rangle$.

То есть в действительности окажется, что в данной концепции мы получаем ровно такую же формулу для среднего значения наблюдаемой. После этого естественно считать, что мы должны получить ровно такую же формулу, как (5.5), для вероятностей выпадения каждого из допустимых значений, чтобы получить то же среднее при тех же допустимых значениях \hat{F} .

Таким образом, на самом деле способы вычисления характеристик системы, которые нам интересны, например, среднего значения, дисперсии, всевозможных наблюдаемых, и, соответственно, распределения вероятностей выпадения значений каждой наблюдаемой в том и другом подходе будут считаться совершенно одинаково. И кроме самого определения в аксиомах 1 и 2 больше ничего различаться не будет.

Формально-математическое определение матрицы плотности

Поэтому чаще всего в современных учебниках встречается третье определение, вполне соответствующее точке зрения, в которой нам не надо задумываться над физическим содержанием квантовой теории. Оно останется для философов, а нам нужно иметь математический аппарат, который позволит решать все задачи. Назовём это определение формально-математическим.

В любом случае для $\hat{\rho}$, определённого как (5.10), можно проверить все свойства, перечисленные после первого определения. Оператор $\hat{\rho}$ эрмитов, потому что под суммой стоят эрмитовы операторы проецирования на вектора некоего базиса, $|\psi_i\rangle$ и $\langle\psi_i|$, а ω_i – вещественные числа, то есть (5.6) верно. Условие нормировки (5.12) гарантирует единичность следа (5.8). Неотрицательная определённость гарантируется выражением (5.11), просто надо приставить любой вектор $|\psi\rangle$ в (5.10) справа, и мы получим сумму

произведения ω_i на квадрат модуля скалярного произведения $\langle \psi_i |$ на $|\psi\rangle$. При неотрицательных ω_i эта сумма будет неотрицательной.

Тогда нам кроме проверенных свойств, по сути, и не нужны онтологические дополнения, в которых объясняется, что такое смешанное состояние. На самом деле можно считать ими и концепцию в духе Ландау, и в духе Фока, какая больше нравится. При этом слова о волновой функции всей остальной вселенной или о разрушении квантовой когерентности – это некая подпорка для воображения, которую мы используем, чтобы чувствовать, что что-то понимаем в этом процессе.

А для решения конкретных задач достаточно сказать, что оператор плотности, который отвечает смешанным состояниям, это такой оператор, определённый в введённом для данной системы гильбертовом пространстве H чистых состояний, что для него верно (5.6). А также что для любого вектора $|\psi\rangle$ выполняется (5.7) и требование (5.8), которое позволит избежать нехороших примеров.

Любой оператор, обладающий перечисленными свойствами, описывает какое-то смешанное состояние, и любое смешанное состояние описывается оператором, обладающим этими свойствами. Между ними есть взаимно однозначное соответствие. Дальше каждый выбирает для себя, нужно ему онтологическое дополнение к этому определению или нет.

Пусть мы получили некое состояние. Разберёмся, можем ли мы выяснить, зная оператор $\hat{\rho}$, действительно ли нужно работать с этим состоянием как со смешанным. Или ему можно поставить в соответствие вектор состояния, то есть забыть, что оно смешанное, и работать с ним как с чистым. То есть, с точки зрения Фока, можно ли считать все чистые состояния, смесью которых является исследуемое, квантово-когерентными. Или, с точки зрения Ландау, можно ли пренебречь влиянием всей остальной вселенной на нашу систему.

Ответ на это даётся непосредственно внутри формализма. Например, посмотрев на определение Фока, мы говорим, что, наверное, нужный случай, когда все ω_i сводятся к одному ω , отличному от нуля и равному единице, а все остальные ω_i равны нулю. То есть в смеси присутствует только одно состояние, если мы можем записать $\hat{\rho}$ как проектор. Если существует такой вектор $|\psi\rangle$, что оператор $\hat{\rho}$ записывается как проектор

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (5.14)$$

то $\hat{\rho}$ ведёт себя в состоянии, описываемом матрицей плотности ρ или оператором плотности $\hat{\rho}$, как чистое состояние, описываемое вектором $|\psi\rangle$.

Если мы, посмотрев на оператор, сходу не увидели, что он представляется в виде проектора, это можно определить с помощью математики. Проекторы обладают уникальным свойством: если мы спроецировали вектор на ось x , а потом проекцию пытаемся ещё раз спроецировать на эту ось, она больше не поменяется. Поэтому оператор проектирования, будучи возведённым в квадрат, куб и любую другую степень,

совпадёт сам с собой. С точки зрения метода математической индукции, достаточно доказать, что

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \quad (5.15)$$

Если это равенство выполнено, значит, существует какой-то вектор $|\psi\rangle$ такой, что оператор $\hat{\rho}$ представим в виде проектора на это $|\psi\rangle$. И это состояние можно рассматривать как чистое и применять к нему методы, которые мы разработаем для чистых состояний. Если же это условие не выполняется, нужно работать с состоянием в общем ключе, то есть считать его смешанным.

Таким образом, у нас возникает множество способов, например, объяснить, чем чистые состояния отличаются от смешанных. Можно сказать прямолинейно, что чистым состояниям можно поставить в соответствие вектор состояния, а смешанным нельзя, и их приходится описывать именно операторами плотности. Также можно сказать, что у чистых состояний оператор плотности удовлетворяет критерию чистоты (5.15), а у смешанных не удовлетворяет.

Задача 1. Матрица плотности для кубита

Самый простой пример – это кубит, то есть двухуровневую систему, у которой базис допустимых состояний состоит из двух состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Соответственно, произвольный вектор $|\psi\rangle$, произвольное чистое состояние, можно записать как вектор состояния в виде

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (5.16)$$

А произвольное смешанное состояние будет произвольной матрицей 2×2 , все операторы в этом базисе могут быть записаны как такие матрицы. То есть

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{22} & \rho_{22} \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

Коэффициенты в данной матрице подчинены ряду условий. Во-первых, должно быть верно

$$\rho_{11} + \rho_{22} = 1 \quad (5.18)$$

Во-вторых, ρ_{11} и ρ_{22} как диагональные матричные элементы должны быть вещественными неотрицательными числами. И в целом, чтобы выяснить, является ли величина (5.17) неотрицательно определённой, можно использовать критерий Сильвестра из линейной алгебры: посчитать все угловые миноры и убедиться, что они неотрицательны. То есть надо посчитать полный определитель, а определители ρ_{11} и ρ_{22} будут неотрицательными, как мы это потребовали во втором требовании. А для неотрицательности всего определителя, учитывая описанные свойства ρ_{11} и ρ_{22} и то, что он эрмитов, то есть ρ_{12} должно быть комплексно-сопряжённым ρ_{21} , для общего детерминанта должно быть

$$\rho_{11}\rho_{22} - |\rho_{12}|^2 \geq 0 \quad (5.19)$$

Любая матрица 2×2 , удовлетворяющая этим требованиям, описывает некое смешанное состояние.

Например, если есть матрица $\begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$, сразу понятно, что она, согласно (5.16), есть некогерентная смесь состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ с весами $\frac{1}{3}$ и $\frac{2}{3}$. То есть через проекторы

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} \end{pmatrix} = \frac{1}{3}|0\rangle\langle 0| + \frac{2}{3}|1\rangle\langle 1| \quad (5.20)$$

Ясно, что не все матрицы плотности имеют нули на побочной диагонали, то есть являются некогерентной смесью $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Они могут быть некогерентной смесью каких-то других состояний, которые здесь есть.

А состояние (5.20) честное смешанное, которое нельзя представить в виде вектора состояния. Ведь, если мы посчитаем $\hat{\rho}^2$, при умножении диагональной матрицы самой на себя она останется диагональной, и на диагонали будут стоять квадраты коэффициентов, получится $\begin{pmatrix} \frac{1}{9} & 0 \\ 0 & \frac{4}{9} \end{pmatrix}$. То есть выражение (5.15) не выполнится.

Посмотрим на матрицу плотности, которая представима в виде вектора состояния. Проще всего взять конкретный, например,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \quad (5.21)$$

при конструкциях $|0\rangle\langle 0|$, $|1\rangle\langle 1|$, $|0\rangle\langle 1|$ и $|1\rangle\langle 0|$ будут стоять коэффициенты $\frac{1}{2}$, то есть мы получим матрицу

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

У неё выполнены все свойства из определений: она эрмитова, у неё след равен единице, она неотрицательно определённая – у неё миноры на главной диагонали равны $\frac{1}{2}$, и определитель $\frac{1}{4} - \frac{1}{4} = 0$, то есть тоже неотрицательный. То, что определитель матрицы плотности, описывающей чистое состояние, являющееся проектором, 2×2 , равен нулю, должно быть обязательно. И для матриц 2×2 это ещё один способ узнавать матрицы, отвечающие чистым состояниям.

Если мы к (5.22) применим критерий чистоты и посчитаем $\hat{\rho}^2$, то убедимся, что она сама в себя и перейдёт. Это очевидно, потому что в данной матрице одинаковые

строки и столбцы, они всегда одинаково перемножаются, и понятно, что $\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$. Так что здесь уже из самого вида матрицы ясно, что выполняется (5.15). Но это очевидно не всегда.

Задача 2. Матрица плотности для частицы, совершающей одномерное движение

Нужно понимать, что существуют не только дискретные базисы, как в предыдущем примере, но и непрерывные. Возьмём другой пример, с которым мы работали. Пусть точечная частица совершает одномерное движение вдоль оси x (рис. 5.1), и мы хотим в координатном представлении записать матрицу оператора $\hat{\rho}$.

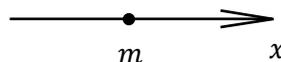


Рис. 5.2. Одномерное движение точечной частицы вдоль оси x

Тогда смешанное состояние будет, по сути, описываться функцией $\rho(x, x')$, где x и x' будут вещественными числами, пробегающими, если нет границ, ограничивающих область движения частицы, всю вещественную ось от $-\infty$ до $+\infty$, то есть $\{x, x'\} \subset \mathbb{R}^1$. Но это всё равно будет матрица некоего оператора $\hat{\rho}$ в непрерывном базисе, и она должна удовлетворять всё тем же соотношениям.

То есть мы опять должны будем написать, что

$$\rho(x, x') = \rho^*(x', x) \quad (5.23)$$

След в этом случае превращается в интеграл по всем значениям переменной диагональных элементов $\rho(x, x)$, он должен быть

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, x) = 1 \quad (5.24)$$

И должна быть неотрицательная определённости, что для любой волновой функции $\psi(x)$ интеграл вида

$$\int \psi^*(x') \rho(x', x) \psi(x) dx', dx \geq 0 \quad (5.25)$$

То есть те же требования, которые мы писали для общего вида, переписутся для такой непрерывной матрицы. Реально это тоже матрица, просто её индексы пробегают непрерывный ряд значений, поэтому нам привычнее воспринимать её как функцию. Но технически мы должны работать с ней по тем же правилам, просто суммы заменяются на интегралы.

Интересно разобраться, как переходят друг в друга чистые и смешанные состояния. Мы вскользь говорили, что, если наша система незамкнута, но при этом к ней добавить ещё какую-то подсистему, вместе они уже могут вести себя практически как

замкнутые. То есть мы можем пренебречь взаимодействием этой пары подсистем с остальным миром.

В этом случае мы получаем две интересные операции, которые могут возникнуть для конструкции состояний этих подсистем.

«Переходы» между способами описания состояний на примере кубита

Мы взяли слово «переходы» в кавычки, потому что здесь речь идёт не о популярных в квантовой теории переходах между состояниями квантовой системы. Пусть есть система, состоящая из двух подсистем A и B (рис. 5.3). При этом общая подсистема в более-менее устраивающем нас приближении будет рассматриваться как замкнутая (пунктир). То есть мы можем пренебречь взаимодействием системы AB с окружающим миром, но при этом производить все измерения только над подсистемой A .

Здесь мы в целом получаем ту же ситуацию, которую описывали, давая определение «в духе Ландау». Только там говорили, что общая замкнутая система гарантированно замкнутая, а здесь она такая в устраивающем нас приближении. Тогда в этом приближении можно записать произвольное состояние данной системы в виде вектора состояния.

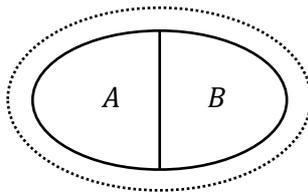


Рис. 5.3. Замкнутая система из двух подсистем

Более того, поскольку для составных систем мы можем гильбертово пространство чистых состояний построить как произведение пространств состояний подсистем, произвольное состояние системы можно записать в виде разложения по некоторому базису:

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |A_i\rangle |B_j\rangle, \quad (5.26)$$

где $|\psi_{AB}\rangle \in H_{AB}$, $|A_i\rangle |B_j\rangle$ – базисный элемент в пространстве H_{AB} .

То есть можно взять базис $|A_i\rangle$ только в пространстве H_A , а $|B_j\rangle$ только в H_B , и строить базис в H_{AB} через упорядоченные произведения и разлагать по ним любое такое состояние. Разберёмся, как работать с оператором, который ответственен только за измерение над подсистемой A . Пусть оператор \hat{F} определён только в H_A . Тогда для описания произвольного состояния только подсистемы A придётся считать в смешанном состоянии, потому что в этом случае будем усреднять по состояниям системы B $|B_j\rangle$.

Для простоты перейдём к самому лёгкому примеру. Пусть A и B – два кубита, две двухуровневые системы, взаимодействующие между собой. В этом случае можно

поставить в соответствие состоянию $|0\rangle$ двухкомпонентный столбик $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, а состоянию $|1\rangle$ столбик $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Тогда произвольное состояние $|\psi\rangle$ будет записываться в виде двухкомпонентного столбика из двух комплексных чисел:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

При этом оказывается, что произвольное чистое состояние системы AB записывается через упорядоченные произведения двух двухкомпонентных столбиков. Введём определение, обобщённое выражение, что столбик χ_i при $i = 0$ даёт столбик $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, а при $i = 1$ $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Тогда чистое состояние системы AB состоит из упорядоченных произведений двух столбиков:

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{ij} c_{ij} \chi_i \chi_j \quad (5.28)$$

Мы договорились, что первый столбик описывает состояние кубита A , а второй кубита B .

В зависимости от того, какое было исходное чистое состояние, при усреднении по возможным состояниям мы будем получать разные смешанные состояния.

Возьмём состояние

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \quad (5.29)$$

Видно, что оно чистое, ведь, согласно условию нормировки для чистых состояний, сумма квадратов модулей коэффициентов разложения должна давать единицу, а здесь два коэффициента по $\frac{1}{\sqrt{2}}$. Оно суперпозиция состояний, в котором оба кубита находятся в состоянии $|0\rangle$, и состояния, в котором оба в состоянии $|1\rangle$, так что по-другому его можно написать как

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |00\rangle + |11\rangle \quad (5.30)$$

Нам хочется усреднить по всем возможным состояниям B , то есть мы предполагаем, что проводим измерение только над кубитом A , и, хотя не знаем этого, замкнутая система AB находится в таком состоянии. Мы должны записать матрицу плотности кубита A для описания смешанного состояния, чтобы описать статистику измерений, которую получим. Мы измеряем, как выражаются в теории измерений, только кубит A .

Можно написать чистое состояние $|\psi_{AB}\rangle$ в виде некоего оператора плотности

$$\hat{\rho} = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|, \quad (5.31)$$

а потом действовать взятием частичного следа.

Мы вычислим след по матрице, которая описывает состояние кубита B . Тем самым такая процедура будет эквивалентна усреднению по возможным состояниям кубита B . Когда будем перемножать $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ из (5.29), согласно (5.30), само на себя, то есть столбик $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ на сопряжённую к нему строку $(1 \ 0)$, и потом аналогично $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ на $(0 \ 1)$, получим

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.32)$$

$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ на самом деле матрица плотности, описывающая чистое состояние системы AB , но записанное в виде матрицу плотности.

А потом произведём операцию частичного следа. То есть скажем, что оператор плотности состояния A – взятие частичного следа у матриц, описывающих состояние системы B , у исходной матрицы плотности оператора $\hat{\rho}_{AB}$

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_{AB}) \quad (5.33)$$

Действительно, у матриц $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ след будет равен единице, сумме 0 и 1. Вторые матрицы в обоих слагаемых в (5.29) после вычисления следа просто заменяются просто на единицу, и мы обнаружим, что матрица плотности (5.33)

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.34)$$

То, что получилось в (5.34), это именно матрица плотности смешанного состояния. Теперь, если мы посчитаем ρ^2 для матрицы ρ_A , обнаружим, что

$$\hat{\rho}_A^2 \neq \rho_A \quad (5.35)$$

Исходное состояние $\hat{\rho}_{AB}$ удовлетворяло этому критерию чистоты, мы его построили как чистое, его матрицу плотности, которая была проектором (5.31), построили как матрицу чистого состояния. Но после того, как мы произвели такое математическое действие как взятие частичного следа, которое и сводится к суммированию по всем возможным состояниям, в этом случае по B , для A получается настоящее смешанное состояние. В терминах векторов $|0\rangle$ и $|1\rangle$ для кубита A это записывается как

$$\frac{1}{2} |0_A\rangle\langle 0_A| + \frac{1}{2} |1_A\rangle\langle 1_A| \quad (5.36)$$

То есть это некогерентная смесь двух состояний кубита $|0\rangle$ и $|1\rangle$ с весами по $\frac{1}{2}$ каждое.

Рассмотрим, можно ли осуществить обратное действие. В квантовой механике его называют дополнением до чистого состояния. То есть говорят, что есть смешанное состояние кубита A , описываемое конечной матрицей плотности (5.34). И нужно найти

чистое состояние системы AB , которое при взятии частичного следа, то есть при усреднении по всем возможным состояниям кубита B , даст чистое состояние.

Поскольку мы построили матрицу (5.34) с помощью операции взятия частичного следа, то знаем, что существует по крайней мере один ответ на этот вопрос – исходное состояние (5.29). Оно перейдет в данное смешанное у A , если мы усредним по всем возможным состояниям B из-за того, что ничего про них не знаем. Для предсказания статистики измерений, производимых только над кубитом A , произвольной наблюдаемой \hat{F} , которая определена в пространстве H_{AB} .

Этот ответ не будет единственным. Операция реконструкции, дополнения до чистого состояния, осуществима, так что такие состояния можно найти. Для кубитов, то есть для таких простых объектов, как матрицы 2×2 , эту задачу можно решить даже в общем виде и построить систему уравнений на коэффициенты c_{ij} исходного чистого состояния. Тогда сразу увидим, что её решение будет не единственным. Мы построим бесконечно много некогерентных смесей чистых состояний кубита A , которые могут получиться в результате операции взятия частичного следа, то есть в результате усреднения по всем возможным состояниям кубита B .

Такое усреднение как бы учитывает неполноту нашей информации о состоянии системы. И эта же неполнота приводит к тому, что обратная задача о дополнении до чистого состояния очень популярна, например, в квантовой информатике, в поведении систем кубитов, там важен переход в ту и другую сторону. Так как обратная реконструкция неоднозначна, каждый раз, когда нужно восстановить состояние некоей замкнутой системы по частичной информации, по результатам измерения над только одной частью этой системы, возникают ошибки, неопределённость этого восстановления. Для квантовой информатики самая главная задача – построение алгоритмов, которые позволили бы выполнить то или иное действие, и при этом необходимо решать описанную проблему.

Люди, занимающиеся квантовой информатикой, часто спрашивают физиков, насколько заинтересовавшее их действие выполнимо в реальности. В большинстве случаев они исходят из мысли, что физики могут выполнить любую формально определённую операцию. Например, изучая эволюцию квантовых систем, мы поняли, что её можно описать как унитарное преобразование вектора состояния или выполнять как унитарное преобразование операторов наблюдаемых. То и другое вполне допустимые подходы. После этого человек, занимающийся квантовой информатикой, скажет, что любой переход векторов некоего базиса, выполняемый с помощью унитарного преобразования, физик как-нибудь реализует. Что он придумает такие условия, в которые нужно поместить нашу систему, что в процессе эволюции она так перейдет, что все состояния преобразуются с помощью унитарного преобразования нужным нам образом.

А информатику в первую очередь нужен такой образ, чтобы мы научились выполнять классические формально логические операции. Например, одна из

классических операций над кубитом – операция «нет», когда кубит в состоянии $|0\rangle$ превращается в кубит в состоянии $|1\rangle$ и наоборот. Очевидно, что она унитарная, поскольку ортонормированный базис превращается в ортонормированный базис. Значит, в принципе можно придумать, как её выполнить для конкретной физической системы, реализующей данный кубит, будет ли это состояние поляризацией фотона или наличие и отсутствие сверхпроводящего тока в некотором сверхпроводящем контуре, или наличие и отсутствие иона в ионной ловушке. Найти способ, как выполнить это преобразование над реальным объектом, дело физика.

Можно придумать разные другие преобразования и на них строить целые алгоритмы. Например, для информатики очень важна задача копирования информации. Пусть у нас есть некий носитель информации, например, классический бит. Это та же ионная ловушка, но в ней ион либо есть в ловушке, то есть состояние $|1\rangle$, либо отсутствует, и это $|0\rangle$. И не может быть такого, что он с вероятностью 50% есть и с такой же отсутствует. То есть у классического бита система из двух чётко изолированных состояний.

У нас есть такой бит в неизвестном нам состоянии, а также наш бит, с которым мы умеем работать. Надо скопировать неизвестное состояние бита, то есть организовать такое взаимодействие между имеющимися, чтобы в итоге получить наш бит в таком состоянии, в котором был исследуемый.

Существует классический алгоритм для решения этой классической задачи копирования информации. В информатике данную операцию обычно называют «контролируемой нет», «CNOT». Идея в том, что мы приводим $|\varphi\rangle$ во взаимодействие с $|\psi\rangle$. Если $|\psi\rangle = 0$, то $|\varphi\rangle$ останется сам собой, а если $|\psi\rangle = 1$, $|\varphi\rangle$ превратится в своё дополнение $|\bar{\varphi}\rangle$, в дополнительное состояние, то есть если он был $|0\rangle$, станет $|1\rangle$, и наоборот.

Если мы научились осуществлять такую операцию, то решим задачу копирования информации с классическими битами. Загоняем свой бит в состояние $|0\rangle$ и приводим его во взаимодействие с $|\psi\rangle$. Если $|\psi\rangle = 0$, то $|\varphi\rangle = 0$ останется нулём, если $|\psi\rangle = 1$, ноль превратится в единицу, то есть $|\varphi\rangle$ в любом случае превратится в $|\psi\rangle$. Задача решена.

Это можно сделать и с квантовым битом, то есть с

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (5.37)$$

Когда мы приводим его во взаимодействие с другим битом, образуем связанную систему. Эта составная система находится в состоянии $|0\rangle|\psi\rangle$: наш кубит мы привели в состояние $|0\rangle$, чтобы осуществить ту же процедуру, а исследуемый в состоянии (5.37). То есть на самом деле двухкубитная система находится в чистом состоянии

$$|0\rangle|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle \quad (5.38)$$

Применяем к ней операцию CNOT, в результате которой, если $|\psi\rangle = 0$, первый бит в (5.37) остаётся в том же самом состоянии, а если $|\psi\rangle = 1$, он меняет своё состояние и переходит в $|1\rangle$. То есть данная операция превратит состояние (5.38) в состояние

$$\alpha|00\rangle + \beta|11\rangle \quad (5.39)$$

А нам для решения задачи копирования информации нужно, чтобы наша система из $|0\rangle|\psi\rangle$ перешла в $|\psi\rangle|\psi\rangle$, – чтобы у исследуемого кубита не испортили состояние, а наш бит приняли неизвестное для нас состояние исследуемого кубита. Если мы подставим в $|\psi\rangle|\psi\rangle$ два выражения (5.39) и перемножим, получится

$$|\psi\rangle|\psi\rangle = \alpha^2|00\rangle + \beta^2|01\rangle + \alpha\beta|01\rangle + \alpha\beta|10\rangle \quad (5.40)$$

То есть в результате операции CNOT мы достигнем успеха, и выражения (5.40) и (5.39) совпадут, только если исследуемый кубит находился либо в состоянии нуля, либо единицы, а не в их комбинации. То есть если одно из чисел α и β равно нулю, а другое единице. Тогда произведения $\alpha\beta$ в двух последних слагаемых в (5.40) будут равны нулю, в двух первых из α^2 и β^2 одно будет ноль, а другое единица, то есть в любом случае получится то же, что и в (5.39).

Но в общем случае задача копирования информации данной операцией не решается. Даже хуже того, в квантовой информатике докажут важную теорему о запрете копирования квантового состояния и скажут, что такой процедуры нет. То есть не только рассмотренный классический алгоритм не работает, а вообще никакой. Это важно для квантовой криптографии, ведь злоумышленник, если даже ему дали организовать произвольное взаимодействие между его кубитом и нашим, никак не сможет скопировать его состояние.

Мы привели пример алгоритма, который работает с классическими битами и не работает с квантовыми кубитами. Есть и то, что работает только наоборот, но об этом поговорим в следующий раз, начав обсуждение с алгоритма, который носит название алгоритма квантовой телепортации состояния или попросту квантовой телепортации.

Лекция 6. Решение уравнения Шредингера для одномерных систем

Мы хотим проанализировать общий подход к простейшей одномерной системе, но начнём с более общей вещи. В одномерном случае, как мы заметили, будет более удобно пользоваться координатным представлением для большинства задач, поэтому нам очень важны свойства шредингеровой координатной волновой функции.

Уравнение непрерывности для шредингеровской координатной волновой функции

Мы можем описывать движение точечной частицы эволюционирующей координатной шредингеровой функцией $\psi(t, \vec{r})$. Гамильтониан традиционно содержит операторы кинетической и потенциальной энергии. Кинетическая будет содержать оператор дифференцирования, и получится

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t, \vec{r})}{\partial t} = \hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vec{r}^2} + u(\vec{r})\psi \quad (6.1)$$

Это дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных. Для данной координатной волновой функции можно ввести плотность вероятности, имеющую важный смысл. В соответствии с нашей аксиоматикой, если мы измеряем координату частицы, то вероятность обнаружения частицы в бесконечно малой окрестности точки с координатой \vec{r} будет пропорциональна объёму, а коэффициент пропорциональности и есть плотность вероятности выпадения значений координаты. Мы её определяем как квадрат модуля соответствующего коэффициента разложения вектора состояния по состояниям с определённой координатой, то есть как квадрат модуля координатной волновой функции:

$$\rho(t, \vec{r}) \equiv |\psi(t, \vec{r})|^2 \quad (6.2)$$

Можно посмотреть, чему равна производная от плотности в заданной точке. Записав $\rho^2 = \psi\psi^*$, получим

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (6.3)$$

Каждую из производных можно выразить из соответствующего уравнения Шредингера, то есть (6.1) и комплексно-сопряжённого к нему, которое получится с другим знаком. Тогда будет

$$\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vec{r}^2} - u\psi \right\} \psi^* - \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial \vec{r}^2} - u\psi^* \right\} \psi \quad (6.4)$$

Слагаемые $u\psi\psi^*$ при вычитании сократятся. Останется только выражение со второй производной, и (6.4) можно будет переписать как

$$\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vec{r}^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial \vec{r}^2} \right) \quad (6.5)$$

Выражение (6.5) записывается как полная производная

$$-\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left\{ \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \vec{r}} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \vec{r}} \right] \right\} \quad (6.6)$$

Из левой части выражения (6.3) и выражения (6.6) получилось, что сумма производной плотности по времени и производной чего-то по x равняется нулю. Это уравнение непрерывности для плотности вероятности. Обозначим

$$\vec{j} \equiv \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \vec{r}} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \vec{r}} \right] \quad (6.7)$$

Это трёхмерный вектор, так как он пишется как градиент выражение в скобках в (6.6). Тогда получится

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0 \quad (6.8)$$

То есть (6.6) следует интерпретировать как плотность потока вероятности, полученное выражение (6.8) в целом – как уравнение непрерывности. Оно говорит о том, что при эрмитовых гамильтонианах, – а мы использовали общий эрмитовый гамильтониан (6.1) для точечной частицы, – вероятность ниоткуда не появляется и никуда не исчезает, а просто перетекает в нашем пространстве с места на место с течением времени. Получается гидродинамическая модель, будто некоторая жидкость течёт в пространстве. И именно так описывается поведение плотности вероятности в соответствии с картиной Шредингера.

Мы можем дальше использовать этот результат для конкретных задач. Например, для любого решения, у которого будет $\operatorname{div} \vec{j} = 0$, сразу будет следовать, что $\rho = \text{const}$, то есть стационарна в каждой точке и не будет меняться с течением времени.

Данный результат был ожидаем из общих соображений, и мы с ним уже были знакомы, просто вспомнили ещё раз. Теперь, вооружившись им, приступим к основной с технической точки зрения теме. Посмотрим, как работает введённая нами по договорённости система аксиом в приложениях к описанию конкретной квантовой системы.

Случаи одномерного движения частицы в квадратичном и более сложном поле

Анализируя применение картины Шредингера для описания эволюции системы, задачу движения точечной частицы во внешнем поле, мы заметили, что свободная задача, когда нет внешних сил, слишком простая и легко решается в любом представлении. В задаче для линейного потенциала, когда мы имеем однородное силовое поле, линейное по координатам $u(\vec{r})$, гамильтониан в координатном представлении оказывается дифференциальным оператором второго порядка, а в импульсном первого, поэтому нам удобнее работать в импульсном представлении.

Так что пока отложим эти задачи и рассмотрим все остальные, с нелинейной функцией $u(\vec{r})$, то есть квадратичное или более сложное поле. Квадратичное даёт линейный осциллятор, мы заметили, что для него без разницы, какое представление использовать. Но мы будем рассматривать произвольное поле $u(\vec{r})$.

Поскольку система одномерная, мы здесь переходим к одной координатной оси x , и потенциальная энергия $u(x)$ является функцией этой координаты (рис. 6.1).

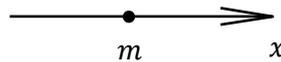


Рис. 6.1. Одномерное движение частицы

В этом случае для общего решения уравнения Шредингера достаточно научиться строить решения стационарного уравнения. Для стационарных систем, где

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \equiv 0, \quad (6.9)$$

а для нашей задачи точечной частицы в потенциальном поле это точно так, уравнение Шредингера приводит нас к стационарной задаче

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (6.10)$$

Подставив в (6.10) выражение для гамильтониана, обнаружим, что для одномерного случая

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + u(x)\psi = E\psi \quad (6.11)$$

Это обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка, которое в канонической, наиболее привычной для нас форме можно переписать в виде

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - u(x)]\psi = 0 \quad (6.12)$$

Штрихами обозначаем дифференцирование по x .

Видно, что здесь коэффициентные функции – просто функции, содержащие потенциальную энергию $u(x)$. И общий тип таких уравнений, которые математики иногда называют обобщёнными уравнениями Дарбу, нам в целом знаком. Дальше вопрос только в зависимости от явного вида $u(x)$, можем ли мы решить это уравнение аналитически или придётся писать квадратурные интегральные представления, будет ли решение в элементарных функциях или придётся использовать спецфункции.

Обратим внимание, что для классификации всех таких возможных задач лучше стартовать с физической картинки, то есть начинать классификацию с точки зрения физики. Какой бы ни был потенциал $u(x)$, можно сразу выделить два типа движения по отношению к тому, может ли частица удалиться на пространственную плюс или минус бесконечность для заданной энергии. Мы каждый раз смотрим, какое значение энергии E берём. Если для него потенциал такой, что уход на бесконечность невозможен, мы

говорим, что движение в этом направлении ограничено. А если уход возможен, то не ограничено.

Пусть у нас есть $u(x)$ как на рис. 6.2. Для значения энергии E_1 будет возможен уход на бесконечность в обе стороны. Для более низкого значения энергии E_2 уход на минус бесконечность оказывается возможным, а на плюс бесконечность нет. И есть энергии, например, E_3 , для которой уход в обе стороны невозможен.

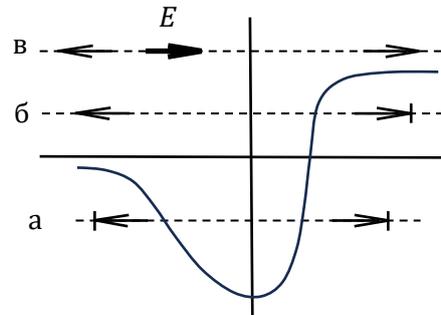


Рис. 6.2. Движение частицы с разной энергией в потенциале

Для непрерывного потенциала, если в нём нет неожиданных для нас сингулярностей или очень высоких скачков, возможны именно три перечисленные ситуации. С точки зрения уравнения (6.12) им отвечают три типа граничных условий, которые мы можем поставить.

Если уход на бесконечность невозможен, например, как для E_3 , в квантовой задаче частица будет находиться в некоем локализованном состоянии. Чтобы удалиться на бесконечность, она должна будет иметь мнимый импульс, а это что-то нефизическое. Поэтому в этом случае для частицы вероятность оказаться на $-\infty$ и на $+\infty$ должна быть нулём.

Пронумеруем эти три ситуации буквами а), б), в). Для **ситуации а)** возникают граничные условия, согласно которым должно быть

$$\psi(x) \rightarrow 0 \tag{6.13}$$

при $x \rightarrow \pm\infty$.

Уравнение (6.12) второго порядка, для него можно записать фундаментальную систему решений, общее решение как суперпозицию двух фундаментально независимых решений с какими-то константами интегрирования. Когда мы подставим это выражение в граничное условие (6.13), получим два уравнения на две константы интегрирования. Они определяются однозначно.

Но на самом деле этого недостаточно. Когда мы описываем локализованное состояние квантовых систем, должны описывать их волновыми функциями, нормированными на единицу. То есть оказывается, что на нашу систему, на общее решение, наложено ещё условие нормировки на единицу, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 = 1 \quad (6.14)$$

Тогда получаются три уравнения и всего две свободные константы. Но на самом деле свободных констант три, в уравнении 6.12) ещё присутствует собственное значение энергии, которое мы должны выбрать из этой же задачи. Три уравнения на три константы позволят их все определить.

То есть мы для некоторых значений энергии, которые будут удовлетворять этой системе уравнений, получим, что стационарные состояния $\psi_E(x)$, соответствующие волновые функции существуют. При этом для каждого такого значения энергии мы однозначно найдём обе константы. У нас, как всегда, останется общее решение. Уравнение (6.12) линейное, поэтому умножение ψ на константу всё равно оставляет её решением. Поэтому, когда мы будем использовать граничное условие (6.13), одна константа всё равно останется, ведь условия тоже однородные, функция стремится к нулям. Она станет константой нормировки. Поскольку мы нормируем выражением (6.14), условие нормировки не портится, если мы умножим эту константу на фазовый множитель. Поэтому в данном случае обе константы и энергия определяются однозначно с точностью до фазового множителя у этих констант интегрирования.

То есть в случае а) возникает уравнение на энергию. Это приведёт к тому, что спектр обычно будет дискретен. Слово «обычно» связано с тем, что мы обосновали, что появляется уравнение на энергии E , которое их отберёт, то есть E не может быть любой. Но то, что оно приводит именно к дискретному спектру, требует отдельного доказательства. Однако, если мы не фиксируем более конкретно вид потенциала $u(x)$, то этого не докажем. Потребуется некие дополнительные предположения относительно потенциала.

Если мы скажем, что потенциал непрерывно дифференцируемый, имеет конечные пределы $-\infty$ и $+\infty$, и мы рассматриваем область энергии ниже обоих предельных значений на $-\infty$ и $+\infty$, нам удастся доказать, что спектр дискретен, но будет более сложно. Впоследствии мы увидим, почему спектр может оказаться не дискретным в ситуациях, когда вроде бы есть ограничения движения, но об этом поговорим потом.

Также в случае а) $\psi_E(x)$ определена однозначно с точностью до фазы. Поскольку изменение начальной фазы не влияет на последующие измерения, мы не считаем состояния с разной фазой физически разными.

Эти два факта позволяют сказать, что спектр невырожденный, то есть кратность вырождения любого собственного значения $s_E \equiv 1$. То, что дискретный спектр в одномерном случае обязательно невырожден, доказать уже довольно легко. Ведь чтобы он был вырожден, нужно, чтобы для данного собственного значения были две линейно независимые собственные функции, а тут всё с точностью до фазы определяется однозначно, и мы даже не уверены, что все E допустимы.

Рассмотрим **случай б)**, когда ограничение на движение есть только с одной стороны. Здесь нет никаких причин требовать, чтобы плотность вероятности обращалась в ноль при $x \rightarrow -\infty$. Мы только можем быть уверены, что она должна стремиться к нулю при $x \rightarrow +\infty$.

То есть здесь возникает одно однородное граничное условие

$$\psi(x) \rightarrow 0 \quad (6.15)$$

при $x \rightarrow -\infty$ либо при $x \rightarrow +\infty$. Также здесь будет условие нормировки.

В результате получится, что на три константы, то есть на две константы интегрирования дифференциального уравнения второго порядка (6.12) и энергию E всего два уравнения. Раз такой дефицит уравнений, скорее всего, они будут существовать для любого E . И действительно, для нормальных потенциалов, если туда не включать нехорошие вещи, мы обычно будем убеждаться, что спектр E оказывается непрерывным. Решение будет существовать для любого E из диапазона, для которого характерна эта ситуация.

При непрерывном спектре немного меняется условие нормировки, оно будет не на единицу, а на дельта-функцию. Но это всё равно уравнение, которое будет определять модуль финальной константы и не будет определять её фазу. И при заданной энергии получаются два условия на две константы интегрирования, так что они однозначно определяются с точностью до фазы.

Это значит, что спектр невырожденный. То есть случай б) – это непрерывный невырожденный спектр. И, как и случае а), кратность вырождения всех уровней энергии $s_E \equiv 1$.

Теперь рассмотрим **случай в)**, когда возможен уход на бесконечность в обе стороны. Здесь вообще нет оснований утверждать, что волновая функция где-то стремится к нулю. Граничные условия, по сути, исчезают, нигде не должно быть неконтролируемого роста. Остаётся только условие интегрируемости, которое тоже, по сути, включается в возникающее здесь условие нормировки. То есть в этом случае есть только условие нормировки, причём оно, как правило, на дельта-функцию, а не на единицу. Физически мы это тоже понимали, когда обсуждали общую физику, и говорили, что дискретный спектр должен быть при финитном движении, а при инфинитном мы вынуждены переходить формально к пределу непрерывного спектра.

Вообще на самом деле любая частица, с которой мы работаем, локализована хотя бы в нашей экспериментальной установке, поэтому настоящее движение всегда финитно, а настоящий спектр дискретен. Но если у системы макроскопически большой размер, как в случаях б) и в), то мы переходим к пределу непрерывного спектра, используя условие нормировки на дельта-функцию.

В случае в) как раз получается такая ситуация. Спектр энергии непрерывен, потому что на энергию точно не возникнет никаких ограничений, решение существует для любого E . Также понятно, что из единственного условия две константы

интегрирования не определить, получится только связать их между собой по модулю с точностью до фазы. Значит, кратность вырождения $s_E = 2$, здесь двукратно вырожденный спектр. Ведь уравнение (6.12) одномерное и второго порядка, и два любых линейно независимых решения образуют фундаментальную систему решений, любое третье уже будет их линейной комбинацией. То есть для каждого E существуют две линейно независимые функции ψ_E .

Таким образом, в этих трёх случаях мы сталкиваемся либо с невырожденным дискретным спектром, либо с невырожденным непрерывным, либо с двукратно вырожденным непрерывным.

Решение уравнения Шредингера для разных случаев движения с учётом уравнения непрерывности

Рассмотрим, как для каждого из этих вариантов реализуется и работает уравнение непрерывности.

а) Дискретный невырожденный спектр энергии E . Волновая функция достаточно быстро стремится к нулю, так, чтобы интеграл от её квадрата модуля был сходящимся. В этом случае плотность вероятности на бесконечностях асимптотически стремится к нулевой константе, поэтому плотность потока, содержащая ψ и $\frac{\partial \psi}{\partial x}$, тоже должна стремиться к нулю. А так как она константа в соответствии с уравнением в стационарном решении (6.12), значит, должна в этом случае равняться нулю. Вектор \vec{j} здесь тоже одномерный, у него одна компонента j_x , и в каждой точке должно быть

$$j_x \equiv 0 \quad (6.16)$$

Рассмотрим, как это возможно для нашей волновой функции. Выражение для плотности потока $\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}$ зануляется, если $\psi^* = \psi$, то есть функция является строго вещественной. Можно просто перебрать все возможные случаи, то есть написать у ψ вещественную и мнимую часть. Если мы запишем ψ как $u + iv$ и подставим в выражение

$$\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0, \quad (6.17)$$

то после раскрытия всех скобок в этом выражении вещественная часть автоматически превратится в ноль. А мнимая будет сведена к уравнению вроде того, где произведение квадрата вещественной части на производную по x отношения мнимой к вещественной равняется нулю. Из чего можно будет сделать вывод, что это возможно, только если вещественная или мнимая часть всюду тождественно равна нулю или если их отношение константа.

Это не означает, что волновая функция обязательно вещественна, но означает, что её выбором фазы всегда можно привести к таковой. Если мнимая часть равна нулю, она уже вещественна, а если вещественная равна нулю, можно выделить фазовый множитель i , и тогда оставшееся будет вещественным. А если мнимая часть – это

произведение константы на вещественную, то, подставляя это выражение, опять вынесем комплексную константу, нормируем её на единицу и скажем, что фазовый множитель можно выбрать так, что он будет вещественным и равным единице. Таким образом, множеством значений $\psi(x)$ оказывается множество вещественных чисел $\psi(E) \in \mathbb{R}^1$, все функции вещественны с точностью до выбора начальной фазы. То есть для дискретного невырожденного спектра всегда можно искать волновые функции просто как вещественные.

б) Поток занулится на одной из бесконечностей, а значит, он тоже всюду ноль. Мы всегда можем записать, что поток равняется нулю, функцию $\psi(x)$ тоже можно всегда записать как вещественную в любой точке выбором начальной фазы, но это не так интересно. Поскольку спектр здесь непрерывный, и мы всё равно нормируем на дельта-функцию, тут тоже можно писать вещественное решение. Ясно, что на бесконечности, если потенциал стремится к константе, должна быть какая-то плоская волна. А для неё решение с плотностью потока, равное нулю, всегда можно записать как суперпозицию двух плосковолновых решений, бегущих туда и обратно с одинаковыми плотностями потока. Тогда полная плотность потока тоже будет ноль, и поэтому это тоже относится и к данному случаю, хотя здесь мы гораздо реже этим пользуемся, ведь часто удобнее записать решение как суперпозицию двух таких волн.

Более того, если слева потенциал не стремится к константе, например, бесконечно убывает, всё будет немного сложнее. Но у нас в этом случае, после того, как мы подчинили уравнение (6.12) одному граничному условию и условию нормировки, функция будет довольно жёстко зафиксирована. И удобный вид, как правило, с точностью до какой-либо константы тоже более-менее фиксирован. Поэтому здесь не всегда удобно выбирать её в вещественной форме. Мы разберём такую задачу и увидим на конкретном примере, как в таких случаях лучше поступать.

в) Здесь возникает ситуация, когда полный поток $j_x = const$. В таком случае могут существовать решения с $j_x \neq 0$. По сути, мы всегда можем записать решение как линейную суперпозицию двух фундаментальных решений. То есть для любого E можно написать

$$\psi_E(x) = A_E \psi_E^{(+)} + B_E \psi_E^{(-)}, \quad (6.18)$$

где $\psi_E^{(+)}$ и $\psi_E^{(-)}$ – два любых линейно независимых решения.

Для физической интерпретации решения обычно удобно выбрать их неким естественным образом. Потенциал не может стремиться к $+\infty$ ни с какой стороны, иначе бы частица туда уйти не смогла, и случай в) не возник. А раз она может уходить на обе бесконечности, то на бесконечности потенциал стремится либо к константе, либо к $-\infty$.

Рассмотрим, что будет для случая, когда $u(x) \rightarrow u^{(+)}$ при $x \rightarrow +\infty$ и $u(x) \rightarrow u^{(-)}$

при $x \rightarrow -\infty$, где величины $u^{(+)}$ и $u^{(-)}$ некоторые константы. Тогда в области асимптотики на плюс и минус бесконечности, то есть при $x \rightarrow \pm\infty$ уравнение (6.12) будет превращаться в

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - \bar{u}^{(\pm)}] \psi = 0 \tag{6.19}$$

Величина $\frac{2m}{\hbar^2} [E - \bar{u}^{(\pm)}]$ – некоторая константа. Более того, раз есть уход на плюс и минус бесконечность, она должна быть ≥ 0 . Тогда можно формально обозначить

$$\frac{2m}{\hbar^2} [E - \bar{u}^{(\pm)}] \equiv \bar{k}_{(\pm)}^2, \tag{6.20}$$

индекс у k означает, что у каждого предела может быть своё значение k .

В этом случае k играет роль волнового числа в стационарной части волнового уравнения. И мы говорим, что фундаментальную систему решений образуют решения, которые на плюс или минус бесконечности ведут себя экспоненциальным образом. То есть, например, если на $+\infty$ (6.20) стремится к $\bar{k}_{(+)}^2$, значит, для уравнения (6.19) существуют решения, стремящиеся на $+\infty$ к $e^{i\bar{k}x}$. И точно также можно написать на $-\infty$. Но ясно, что они, по идее, разные.

Поэтому можно ввести два типа решений. Например, возьмём то, которое на $-\infty$ имеет только асимптотику, движущуюся в положительном направлении оси x (рис. 6.3а). То есть на $-\infty$ есть только решение $e^{i\bar{k}x}$ и нет решения $e^{-i\bar{k}x}$, которое было бы парным к нему. Тогда на $+\infty$ никто не гарантирует, что будет только такая волна, здесь она может идти в обе стороны. И она как-то соответствует граничному условию на $-\infty$, которое мы потребовали.

Можно выбрать это решение как решение $(-)$ и взять решение $(+)$ противоположного типа, когда на $+\infty$ есть только одна волна, идущая влево. Тогда на $-\infty$ в асимптотике будут обе волны (рис. 6.3б). То есть в этом случае можно выбрать такой базис из решений $\psi^{(+)}$ и $\psi^{(-)}$, где описанная ситуация очень чётко видна.

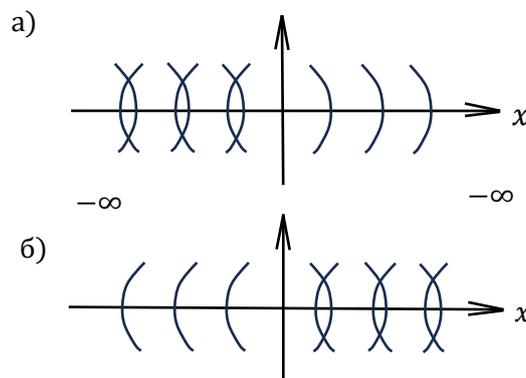


Рис. 6.3. Волны в асимптотиках в решениях $(+)$ и $(-)$

Решение а) мы прочитываем так, что, если на $+\infty$ есть только волна, бегущая вправо, значит, из этой бесконечности никакая вероятность не натекает. Она натекает из $-\infty$, как-то рассеивается на потенциале, и возникают отражённая и прошедшая волны. То есть в этом случае каждое слагаемое мы интерпретируем как падающую, прошедшую и отражённую волны.

Мы точно знаем, что математически можем на каждой бесконечности записать два линейно независимых решения (6.19) с разными асимптотиками в виде двух волн, бегущих влево и вправо. То есть там две константы интегрирования, они произвольные. Искусственно введём условие – объявим одну них нулём. Тогда в решении будет только одна константа интегрирования, которая в первом случае, например, на $+\infty$ стремится только к волне вправо. Её мы с точностью до фазы определим из условия нормировки на дельта-функцию. Тогда будет израсходован весь введённый произвол, и, если мы будем анализировать поведение этого решения на $-\infty$, то почти наверняка, если это не будет как-то обеспечиваться структурой нашего потенциала, получим, что на $-\infty$ будут обе волны. И их амплитуды, то есть константы, стоящие в асимптотике на минус бесконечности, у решения, которое мы уже подчинили двум условиям – равенству нулю одной из констант и условию нормировки – могут быть какие угодно. Мы назовём это падающей и отражённой волнами.

То есть мы говорим, что решение $\psi_E^{(+)}(x)$ определено следующим образом:

$$\psi_E^{(+)}(x) = \begin{cases} Ae^{i\bar{k}_{(-)}x} + Be^{-i\bar{k}_{(-)}x}, & x \rightarrow -\infty \\ Ce^{i\bar{k}_{(+)}x} + \dots, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (6.21)$$

Во втором уравнении (6.21) на месте троеточия должно было быть выражение $De^{i\bar{k}_{(+)}x}$, но мы положили $D = 0$. Это можно сделать, потому что на две константы интегрирования при произвольном значении энергии E одно условие нормировки, и мы имеем право выбрать ещё одно условие сами.

Тогда можно, например, константу C определить из условия нормировки, а A и B будут уже какими-то функциями C , $\bar{k}_{(-)}$ и $\bar{k}_{(+)}$. То есть они должны определиться из условия решения нашего уравнения с таким граничным условием и условием нормировки. Так что мы, выбирая такой тип решения, фактически добавляем граничное условие.

Аналогично (6.21), записываем решение $\psi_E^{(-)}(x)$, выбирая другое граничное условие:

$$\psi_E^{(-)}(x) = \begin{cases} Ce^{i\bar{k}_{(-)}x}, & x \rightarrow -\infty \\ Ae^{i\bar{k}_{(+)}x} + Be^{-i\bar{k}_{(+)}x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (6.22)$$

Видно, что в одной и той же области у решений (6.21) и (6.22) линейно независимые функции, потому что где-то одна экспонента, где-то комбинация обеих, а эти экспоненты линейно независимые функции. Поэтому $\psi_E^{(+)}(x)$ и $\psi_E^{(-)}(x)$ – это пара

линейно независимых решений нашего уравнения (6.19). А значит, любое его решение можно записать как их суперпозицию.

Но главное при этом, что каждое из данных решений для нас физически понятно. Если пучок частиц налетает на наш потенциал из минус бесконечности, мы будем использовать для описания ситуации решение $\psi_E^{(+)}$, потому что фактически это естественное условие, с какой бесконечности частицы могут сюда прибежать. Они для экспериментатора реализуемы по-разному, он ставит источник, направляя частицы по оси x или против, с разных сторон от области, в которой создано потенциальное поле.

Именно это мы хотели сказать, когда говорили, что это удобный базис решений, потому что он имеет ясную физическую природу. То есть мы понимаем физику, которая стоит за каждым решением. А общее решение для произвольного случая, когда частицы могут лететь с обеих сторон, мы всегда можем записать как суперпозицию этих двух решений с новыми константами интегрирования.

И ещё мы понимаем, что для любой области, функция ψ плоскотоволновая, например, описывается экспонентой как

$$\psi = A \cdot e^{ikx}, \quad (6.23)$$

будет

$$\rho = |\psi|^2 = |A|^2 \quad (6.24)$$

А плотность потока

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (6.25)$$

И в $\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}$, и в $\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}$ получится произведение $A \cdot A^* = |A|^2$. Поэтому из (6.25) после дифференцирования выражений (6.23) будет

$$|A|^2 \frac{\hbar k}{m} \quad (6.26)$$

Поскольку из соотношения де Бройля следует, что $\hbar k$ это импульс, тогда $\frac{\hbar k}{m}$ – скорость, отвечающая состоянию с определённой энергией. И мы приходим к знакомому выражению, что

$$j_x = \rho v \quad (6.27)$$

Но мы понимаем, что для любой плоской волны знаем поток вероятности. Например, поток вероятности, который существует в решении при $x \rightarrow -\infty$ в (6.21), будет связан с выражениями $Ae^{i\bar{k}(-)x}$ и $Be^{-i\bar{k}(-)x}$. Когда мы каждой из экспонент подставим в асимптотики постоянный поток вероятности, он создаст положительный поток по оси x от первого слагаемого и отрицательный от второго.

Тогда для первого решения для полного потока вероятности, учитывая, что замена знака у k в (6.23) приведёт к замене знака у проекции потока на ось x (6.26), и перед

вторым квадратом модуля будет минус. А с другой стороны, что этот поток вероятности – выражение для $x \rightarrow +\infty$ в (6.21), который константа по всей оси, получим

$$\bar{k}_{(-)}(|A|^2 - |B|^2) = (\bar{k}_{(+)})|C|^2 \quad (6.28)$$

То есть константы A , B и C действительно будут связаны условием постоянства потока, это вполне естественное требование. То же самое относится и к решению (6.21), там будет

$$(\bar{k}_{(-)})|C|^2 = \bar{k}_{(+)}(|A|^2 - |B|^2) \quad (6.29)$$

Вообще говоря, k не константа. Оно в уравнении (6.23) становится константой, только когда потенциальная энергия стремится к константе, то есть в асимптотической области. Поэтому k на $-\infty$ и $+\infty$, то есть предельные значения k , $\bar{k}_{(-)}$ и $\bar{k}_{(+)}$, которые являются постоянной для данной потенциальной энергии величиной, могут быть разными, ведь потенциал не обязан стремиться к одному пределу при $x \rightarrow -\infty$ и $x \rightarrow +\infty$. Поэтому мы и должны записать общее решение в описанном виде.

Коэффициенты отражения и прохождения для волны вероятности

Обычно для описания поведения этих двух характерных волн вводят величины, которые называют коэффициентами отражения и прохождения для волны вероятности. Мы будем ставить возле них знаки «+» или «-», показывая, что данный коэффициент относится к одному из решений $\psi_E^{(+)}(x)$ или $\psi_E^{(-)}(x)$.

В решении (6.21) мы будем называть волну $Ce^{i\bar{k}_{(+)}x}$ прошедшей, $Be^{-i\bar{k}_{(-)}x}$ – отражённой, а $Ae^{i\bar{k}_{(-)}x}$ – падающей. Эти названия отвечают его естественной физической интерпретации. И очень часто в реальном эксперименте по взаимодействию частиц с каким-то потенциальным барьером, потоки вероятности, которые мы увидим в асимптотике далеко от барьера, будет этому соответствовать.

Для записи коэффициента прохождения мы по определению разделим плотность потока вероятности в прошедшей волне на плотность потока вероятности в падающей:

$$T^{(\pm)} \equiv \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} \quad (6.30)$$

А коэффициент отражения введём, разделив плотность потока вероятности в отражённой волне на плотность потока вероятности в падающей:

$$R^{(\pm)} \equiv \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} \quad (6.31)$$

Но если мы используем решения (6.21) и (6.22), можем вычислить величины (6.30) и (6.31) через константы в них. Для нахождения $T^{(+)}$ подставим в (6.30) правую и левую части выражения (6.28). Получится отношение предельных значений волнового вектора за барьером и до барьера на бесконечности, умноженное на квадрат модуля отношения амплитуды прошедшей волны к амплитуде падающей:

$$T^{(+)} \equiv \frac{\bar{k}_{(+)}}{\bar{k}_{(-)}} \cdot \left| \frac{C}{A} \right|^2 \quad (6.32)$$

А в выражении для коэффициента отражения, если подставить в (6.31) формулу (6.28), ответ будет без волновых векторов из-за того, что обе волны существуют на одной бесконечности, в одной и той же асимптотике:

$$R^{(+)} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad (6.33)$$

Если разделить соотношение (6.28) на $\bar{k}_{(-)}$, оно приведёт к выражению $1 - R^{(+)} = T^{(+)}$, то есть

$$R^{(+)} + T^{(+)} = 1 \quad (6.34)$$

Это вполне естественно, особенно если вспомнить, что (6.28) – соотношение постоянства потока вероятности. Сумма потоков вероятности в отражённой и прошедшей волнах должна равняться потоку вероятности в падающей. Такие же соотношения можно написать и для $R^{(-)}$ и $T^{(-)}$, но там в соответствии с нашими обозначениями будут чуть-чуть по-другому расставлены константы.

В качестве математического упражнения полезно будет доказать, что для достаточно гладкого по поведению потенциала, хотя бы для такого явного случая, как непрерывного дифференцируемого, чтобы там все функции существовали, для одномерного случая всегда $R^{(+)} = R^{(-)}$ и $T^{(+)} = T^{(-)}$.

Это очень неочевидно для несимметричного потенциала. Здесь стоит вспомнить про вронскиан для дифференциальных уравнений и понять, как он тут связан с потоком вероятности. Вронскиан – это определитель Вронского, который составляется из самих функций и их первых производных двух разных решений одного и того же уравнения, мы знаем его свойства. Можно составить вронскиан решений $\psi_E^{(+)}(x)$ или $\psi_E^{(-)}(x)$, тогда мы получим уравнения, связывающие между собой константы в этих двух решениях. Тогда мы свяжем между собой и $R^{(+)}$, $R^{(-)}$ и $T^{(+)}$, $T^{(-)}$. Достаточно доказать только для одного коэффициента, а для второго то же самое будет следовать из условия сохранения потока вероятности (6.34). Это полезное математическое упражнение, чтобы вспомнить определитель Вронского и способы работы с обыкновенными дифференциальными уравнениями второго порядка.

Решения для потенциалов с сингулярностями

Мы выстроили схему анализа, посвящённую решениям, которые относятся к двукратно вырожденному непрерывному спектру одномерной задачи, случаю в). В случаях а, б) роль условия постоянства потока становится скучной из-за нулевого значения этого потока, но её тоже можно использовать. А здесь получается гораздо больше физических следствий.

Мы фактически проанализировали одномерное стационарное рассеяние на почти произвольном потенциале, исключив только случай, когда потенциал может стремиться к минус бесконечности на какой-то из бесконечностей, но он требует более аккуратного анализа. Мы всё равно должны будем налагать на потенциал некое ограничение, а в этом случае можем нарисовать механическую задачу, в которой все частицы высасываются на одну из минус бесконечностей, и стационарного состояния частицы при конечных x вообще существовать не может. Это будет случай, когда происходит падение частицы в одну из сторон.

Но мы пока такие экзотические случаи не трогаем, а для данного сделали практически всё. Практически, потому что мы до сих пор всегда предполагали, что потенциал является непрерывной дифференцируемой функцией, а ведь могут быть задачи, где у потенциала есть нерегулярности. В реальной физике, например, в оптике, мы довольно часто сталкиваемся с задачами, где есть граница раздела двух сред с разными показателями преломления. А это будет означать, что при одной и той же частоте, а по-нашему при одной и той же энергии E будут разные значения k . То есть на языке нашей задачи будет скачок потенциальной энергии конечной величины в некоторой точке. В реальной системе он размазывается на пусть малую по толщине, но ненулевую область, но мы можем посмотреть предел бесконечно малой толщины области перехода, в этом случае такие задачи вполне физичны.

Более того, можно рассмотреть задачи с сингулярностями потенциала. Например, если электрон проводимости летит в решётке металла, то ядро, сидящее возле неё, это некий кулоновский центр, который притягивает электрон. Когда мы вспоминаем закон кулона и, соответственно, потенциальную энергию, если считать ядро точечным, в потенциале возникает сингулярность $\frac{1}{r}$. На самом деле радиус ядра 1 Ферми, 10^{-13} см, а типичный период решётки металла лежит в области 10^{-8} см, между ними разница в пять порядков. И у характерных энергий, с которыми двигаются электроны проводимости в решётке, длины волн гораздо больше размера ядра. Так что учитывать конечность размера ядра можно, но это отдельное усложнение задачи. Вполне допустимо перейти к пределу обычного кулоновского потенциала, и тогда у нас возникнет задача с сингулярностью.

Так что сингулярности и скачки бывают в физически разумно поставленных задачах, хотя это какой-то предел непрерывного дифференцируемого потенциала. В таких случаях мы уже не сможем просто написать решение во всей области движения, потому что область интегрирования нашего дифференциального уравнения второго порядка будет содержать точки, в которых коэффициентная функция имеет скачки и сингулярности. Математики учили в таких случаях разбивать область определения волновой функции, в данном случае ось от $-\infty$ до $+\infty$, на участки, на которых коэффициенты регулярны, и решать уравнение на каждом из них. Раз наше уравнение второго порядка, на каждом участке появится фундаментальная система из двух

решений, и мы будем искать решение как их линейную комбинацию с какими-то коэффициентами.

У нас увеличивается число неизвестных констант из-за того, что теперь по две константы на каждом интервале регулярности. Значит, на границе двух таких интервалов мы должны записывать по два условия сшивки. После этого количество констант и уравнений останется в том же соотношении, что и раньше, и не изменит картину, о которой мы поговорили для случая непрерывного дифференцируемого потенциала.

Итак, мы приходим к выводу, что нарушение регулярности $u(x)$ требует разбиения вещественной оси \mathbb{R}^1 , на которой у нас определена координата, на интервалы регулярности, решения стационарного уравнения Шредингера на каждом интервале и подчинения решения двум условиям сшивки в каждой точке сшивки. Эти условия надо взять из самого уравнения. Мы должны написать уравнение

$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [u(x) - E]\psi(x) \quad (6.35)$$

Если есть некая точка x_0 , то (6.35) можно проинтегрировать по dx от $x_0 - \varepsilon$ до $x_0 + \varepsilon$. Интеграл второй производной выдаст скачок первой. Будет

$$\int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} dx \psi_E''(x) = \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \frac{2m}{\hbar^2} [u(x) - E]\psi_E(x) dx \quad (6.36)$$

При этом мы получим выражение для скачка первой производной при прохождении через произвольную точку x_0

$$\psi_E'(x_0 + \varepsilon) - \psi_E'(x_0 - \varepsilon) \quad (6.37)$$

И поймём, что, если $\frac{2m}{\hbar^2} [u(x) - E]$ конечно, мы строим соответствующую функцию ψ_E'' для какого-то конечного собственного значения энергии. Это не исключает того, что в $u(x)$ может быть скачок конечной величины, просто потенциал должен быть конечен, а энергию E мы считаем такой по умолчанию. Тогда для любого конечного $u(x)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$ в пределе получим ноль, потому что интеграл от конечной функции по интервалу, стремящемуся к нулю, стремится к нулю, то есть выражение (6.37) в этом случае стремится к нулю. Таким образом, скачки потенциала без сингулярностей ничему не вредят, первая производная всё равно оказывается непрерывной на границе.

И, как следствие, сама функция тоже будет непрерывной, то есть при $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\psi_E(x_0 + \varepsilon) - \psi_E(x_0 - \varepsilon) \rightarrow 0 \quad (6.38)$$

Так что при любом конечном потенциале в окрестности границы условия сшивки очень естественны – непрерывность функции и её первой производной. Это может нарушиться, если потенциал имеет сингулярность. Там возникнут две разные ситуации.

а) У $u(x)$ в точке x_0 интегрируемая сингулярность. То есть интеграл от $u(x)$ по интервалу, содержащему x_0 , сходящийся, он конечен несмотря на то, что $u(x)$ в этой

точке обращается в бесконечность. Тогда добавление постоянных множителей вроде $\frac{2m}{\hbar^2}$ и самой функции $\psi_E(x)$, которую мы считаем конечной в этой точке, ничего не испортит. Интеграл (6.26) будет иметь конечную величину, и она и будет скачком первой производной (6.37). То есть в этом случае первая производная не непрерывна, но её скачок конечен. $\psi'_E(x_0 \pm \varepsilon)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$ можно более коротко записать как $\psi'_E(x \pm 0)$, и тогда

$$\psi'_E(x_0 + \varepsilon) - \psi'_E(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} u(x) \psi_E(x) dx \quad (6.39)$$

Выражение $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} u(x) \psi_E(x) dx$ нужно вычислить. Это, по сути, функционал, который функцией $\psi_E(x)$ ставит в соответствие с подынтегральным выражением $u(x)$ некое число. То есть получается число, зависящее от значения функции $\psi_E(x)$ в точке x_0 . Тогда при таком интегрировании по бесконечно малому интервалу можно будет вынести $\psi_E(x)$ за знак интеграла, если $\psi_E(x_0)$ конечная величина. И (6.39) будет записываться как

$$\text{const} \cdot \psi_E(x_0) \quad (6.40)$$

Повторим рассуждения и запишем скачок самой функции $\psi_E(x)$ как интеграл от первой производной, которая будет конечна. При стремлении интервала интегрирования к нулю мы получим нулевой скачок. То есть $\psi_E(x_0)$ будет являться значением любого из пределов:

$$\psi_E(x_0) = \psi_E(x_0 - 0) = \psi_E(x_0 + 0) \quad (6.41)$$

Таким образом, в случае для интегрируемой сингулярности потенциала мы для первой производной получаем скачок конечной величины, вычисляемый по формуле (6.39), а для самой функции по-прежнему требование непрерывности.

б) У $u(x)$ в точке x_0 неинтегрируемая сингулярность. Тогда плотность вероятности обнаружения частицы в этой точке будет сингулярной, а она, по идее, везде должна быть регулярной функцией. Но если посмотреть на интеграл (6.39), можно понять, что нужно забить эту сингулярность в $u(x)$ обращением в ноль $\psi_E(x)$. Тогда мы сможем получить в этом выражении конечный скачок и обеспечить нормальное поведение волновой функции и, соответственно, плотности вероятности.

Но это означает, что мы обязаны потребовать от волновой функции обращения в ноль в точке неинтегрируемой сингулярности. Иными словами, неинтегрируемая сингулярность – непроницаемая стенка для волны вероятности. При этом вероятность может быть отлична от нуля только по одну сторону от неё. То есть неинтегрируемая сингулярность разделяет пространство на две не общающиеся друг с другом с точки зрения частицы области, частица может жить только в одной из них и пройти через эту точку не может.

Таким образом, вы выстроили схему действия в одномерных задачах. Сначала мы смотрим характер движения, является он финитным или инфинитным. Причём как инфинитным он может быть как вообще не финитным, когда частица может уходить на

бесконечность вправо и влево, так и односторонним финитным, когда с одной стороны уход на бесконечность невозможен. После определения этого мы сразу понимаем характер спектра в той или иной области значений энергии. Если это область существования уровней дискретного спектра, проверяем, есть ли там эти уровни, то есть решаем задачу как уравнение, у которого нулевые граничные условия на плюс и минус бесконечностях. Если где-то внутри есть сингулярности, разбиваем на подобласти и пишем дополнительные уравнения на константы интегрирования, условия сшивки на границах раздела этих подобластей.

Если же спектр непрерывен в обе стороны, как правило, наша задача – построить два линейно независимых решения, чаще всего $\psi_E^{(+)}$ и $\psi_E^{(-)}$. Бывает более простая задача, для одномерных задач с непрерывным двукратно вырожденным спектром часто задают вопрос о коэффициентах отражения R и прохождения T . И даже просят найти их для одной из двух конкретных ситуаций, например, для налетания частицы слева на барьер.

Теперь мы понимаем, как действовать в каждом конкретном случае. И на семинаре применим эти методы к конкретным задачам.

Лекция 7. Линейный гармонический осциллятор

Гармонический осциллятор – любимая система теоретической физики. Важной особенностью гармонических задач является их уникальная решаемость. Практически в любом разделе теоретической физики, будь то обычная механика, квантовая электродинамика или квантовая теория поля, все гармонические задачи, то есть все задачи, например, с квадратичными гамильтонианами, точно решаемы при любой размерности, и практически всегда можно придумать алгебраический способ их решения. То есть их не нужно, как задачи динамики, сводить к дифференциальным уравнениям. Сегодня мы продемонстрируем, что и в квантовой механике всё можно сделать на уровне алгебры.

Линейный гармонический осциллятор – это одномерная стационарная квантовая система с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \quad (7.1)$$

И в координатном, и в импульсном пространстве этот оператор будет дифференциальным оператором второго порядка, причём они будут совершенно одинаковыми, поскольку и в слагаемом с \hat{p}_x , и в слагаемом с \hat{x} однородная квадратичная зависимость. Так что при решении задачи в обоих представлениях мы придём к задаче, которая нам будет знакома. В курсе ММФ мы изучали присоединённые функции Эрмита и писали для них нужную систему уравнений или, по крайней мере, систему ортогональных полиномов Эрмита, через которые записываются присоединённые функции Эрмита. Поэтому само уравнение Эрмита будет знакомо.

Повышающий и понижающий операторы для линейного гармонического осциллятора

Но мы хотим решать задачу без дифференциальных уравнений, и для этого надо воспользоваться специфическими удобными операторами. Определим два не эрмитовых, но эрмитово сопряжённых по отношению друг к другу оператора. Первым будем

$$\hat{a} \equiv \frac{m\omega\hat{x} + i\hat{p}_x}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad (7.2)$$

Видно, что он безразмерный. И, поскольку \hat{x} и \hat{p}_x – эрмитовы операторы, и перед вторым есть мнимая единица, действительно не эрмитов. Эрмитово сопряжённый к нему оператор, который уже не определяем, а просто записываем, будет отличаться знаком при i ввиду эрмитовости \hat{x} и \hat{p}_x :

$$\hat{a}^+ = \frac{m\omega\hat{x} - i\hat{p}_x}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad (7.3)$$

У этих двух операторов очень простая алгебра. Если вычислить их коммутатор, подставив в него выражения (7.2) и (7.3), корни в знаменателе можно вынести за знак

коммутатора. \hat{x} коммутирует с \hat{x} , а \hat{p}_x с \hat{p}_x , поэтому нужно записать только коммутатор \hat{x} с \hat{p}_x и обратный к нему. Получится

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \frac{1}{2m\omega\hbar} \{-m\omega x[\hat{x}, \hat{p}_x] + im\omega[\hat{p}_x, \hat{x}]\} = \frac{1}{2m\omega\hbar} \{-m\omega x(i\hbar) + im\omega(-i\hbar)\} = 1 \quad (7.4)$$

То есть операторы \hat{a} и \hat{a}^+ коммутируют на единичный оператор, который в таких случаях, как обычно, пишем как единицу. Тогда они являются парой операторов, коммутирующих со своим коммутатором, а для таких есть много полезных алгебраических соотношений. Например, легко расписывать экспоненты от их линейных комбинаций.

Также через операторы \hat{a} и \hat{a}^+ можно выразить любую наблюдаемую, относящуюся к линейному гармоническому осциллятору. Если мы просто почленно сложим и вычтем (7.2) и (7.3), получим выражения операторов \hat{x} и \hat{p}_x через \hat{a} и \hat{a}^+ .

Например, когда мы складываем, получается $\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\hat{x}$, и тогда

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+), \quad (7.5)$$

где $\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$ – характерный множитель, составленный из констант гамильтониана размерности координаты.

А когда вычитаем, будет

$$\hat{p}_x = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \frac{1}{i} (\hat{a} - \hat{a}^+), \quad (7.6)$$

где $\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}$ – характерный множитель размерности импульса.

Раз мы выразили координату и импульс через \hat{a} и \hat{a}^+ , значит, любую другую наблюдаемую, имеющую классический аналог, а это будет функция от оператора координаты, импульса и, возможно, времени, через них тоже можно записать. Таким образом, через этих операторы можно выразить любой, относящийся к данной задаче, в частности самый важный, оператор Гамильтона. Видно, что, если перемножить \hat{a} и \hat{a}^+ , выходит оператор, кратный данному, то есть $\frac{m\omega\hat{x}^2}{2m\omega\hbar} + \frac{\hat{p}_x^2}{2m\omega\hbar}$. Умножая на $\omega\hbar$, мы как раз получим оператор Гамильтона. Правда, там будут ещё и перекрёстные сомножители, где возникнет $\hbar\omega[\hat{x}, \hat{p}_x]$, и это выдаст ещё один дополнительный множитель.

Тогда гамильтониан можно записать через \hat{a} и \hat{a}^+ в виде

$$\hat{H} = \hbar\omega \left\{ \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right\} \quad (7.7)$$

На самом деле из-за того, что есть коммутационные соотношения, и из-за того, что, согласно (7.4), $\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}$ единичный оператор, можно выражать $\hat{a}\hat{a}^+$ и $\hat{a}^+\hat{a}$ друг через друга и получить в (7.7) бесконечное множество их линейных комбинаций. Самой употребимой записью гамильтониана является (7.7), но также часто используются выражения

$$\hat{H} = \hbar\omega \left\{ \hat{a}\hat{a}^+ - \frac{1}{2} \right\} = \frac{\hbar\omega}{2} \{ \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} \} \quad (7.8)$$

и

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \{ \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} \} \quad (7.9)$$

Из этого следует, что, если мы захотим посчитать коммутатор гамильтониана \hat{H} и оператора \hat{a} , подставляя вид гамильтониана (7.7), вынесем $\hbar\omega$ просто как числовой множитель. Для коммутатора $[\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}]$ \hat{a} ведёт себя по отношению к \hat{a} как константа, и её можно вынести налево, $[\hat{a}^+, \hat{a}]$ даст -1 , поэтому

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega\hat{a} \quad (7.10)$$

Рассуждая аналогично,

$$[\hat{H}, \hat{a}^+] = +\hbar\omega\hat{a}^+ \quad (7.11)$$

То есть коммутаторы операторов \hat{a} и \hat{a}^+ с гамильтонианом пропорциональны соответствующему оператору с множителем $-\hbar\omega$ или $+\hbar\omega$.

Нас интересует система стационарных векторов, то есть собственных векторов гамильтониана. Из общей теории мы понимаем, что здесь потенциальная энергия парабола, она не позволяет ни при какой конечной положительной энергии уйти на бесконечность. То есть весь спектр энергии лежит в области $E > 0$, так как и кинетическая, и потенциальная энергии в (7.1) положительно определены, поэтому собственные значения гамильтониана больше нуля, и ясно, что тут дискретный спектр. А раз задача одномерная и спектр дискретный, то он дискретный невырожденный.

Спектр осциллятора через повышающий и понижающий операторы

Понимая это обстоятельство, когда мы будем решать задачу на собственные вектора и собственные значения гамильтониана, все собственные вектора можно будет занумеровать квантовым числом, которое обозначим n , пробегающим простой ряд дискретных значений:

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (7.12)$$

Проще всего было бы взять натуральный ряд $n = 1, 2, 3, \dots$, но в задаче с осциллятором и в некоторых других задачах о связанных состояниях за состоянием с минимальной энергией стараются закрепить индекс 0. То есть начинают считать уровни дискретного спектра, обычно в ямах, с нулевого, объявляя его основным состоянием. Поэтому в (7.12) $n = 0, 1, 2, \dots$, и

$$E_{min} \equiv E_0 > 0 \tag{7.13}$$

Тогда можно быстро открыть главную особенность этого спектра. Пусть $|n\rangle$ – собственный вектор гамильтониана с собственным значением E_n . Подействуем оператором \hat{a}^+ на $|n\rangle$ и, чтобы выяснить, что получится, подействуем на $\hat{a}^+|n\rangle$ оператором гамильтониана \hat{H} . Воспользуемся коммутационным соотношением (7.11), согласно которому $\hat{H}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{H} + \hbar\omega\hat{a}^+$. Тогда с учётом (7.12) получается

$$\hat{H}(\hat{a}^+|n\rangle) = (\hat{a}^+\hat{H} + \hbar\omega\hat{a}^+)|n\rangle = (E_n + \hbar\omega)\hat{a}^+|n\rangle \tag{7.14}$$

То есть, когда мы действуем оператором \hat{a}^+ на собственный вектор гамильтониана, снова получаем собственный вектор гамильтониана, причём отвечающий собственному значению, большему на $\hbar\omega$. Поэтому за оператором \hat{a}^+ закрепилось название «повышающий оператор», он переводит один собственный вектор в другой, увеличивая собственное значение на $\hbar\omega$.

Аналогично можно убедиться, что

$$\hat{H}(\hat{a}|n\rangle) = (E_n - \hbar\omega)\hat{a}|n\rangle, \tag{7.15}$$

то есть $\hat{a}|n\rangle$ – собственный вектор, отвечающий собственному значению на $\hbar\omega$ меньше. Оператор \hat{a} называют понижающим.

Мы открыли свойство эквидистантности спектра. Наличие одного уровня приводит к тому, что у нас есть уровни, отстоящие от него на $\hbar\omega$ сколько угодно раз вверх и какое-то количество раз вниз, потому что мы не можем зайти в отрицательную область. Там мы на каком-то шаге дойдём до E_0 , и следующий шаг не должен выдавать какой-то вектор (рис. 7.1).

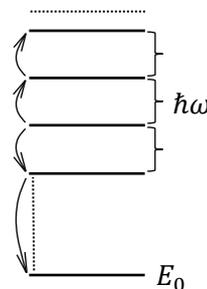


Рис. 7.1. Эквидистантный спектр и перемещение по нему

То есть общая энергия должна описываться формулой через квантовое число n

$$E_n = E_0 + \hbar\omega \cdot n \tag{7.16}$$

Мы в ней пока не знаем E_0 , но знаем, что собственный вектор, отвечающий собственному значению E_0 , то есть $|0\rangle$, не должен выдавать никакого разумного вектора при действии на него оператора \hat{a} . Он должен выдавать нулевой вектор, который в нашем пространстве, будучи добавленным к любому вектору, даёт его же, потому что это единственный вектор, который нельзя отнормировать на единицу, вследствие чего он не может соответствовать никакому физическому состоянию:

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad (7.17)$$

Это единственный способ оборвать нашу «лестницу» движения вниз.

Можно заметить, что согласно этим формулам, действие оператора \hat{a}^+ на $|n\rangle$ должно выдать вектор $|n+1\rangle$, увеличенный на единицу номер уровня, с коэффициентом, зависящим от n :

$$\hat{a}^+|n\rangle = C_n|n+1\rangle \quad (7.18)$$

Оператор \hat{a} эрмитово сопряжённый по отношению к оператору \hat{a}^+ . Вектора $|n\rangle$, если отнормировать их на единицу, образуют полный ортонормированный базис $\{|n\rangle\}$, ведь система этих векторов полна как система собственных векторов эрмитова оператора в гильбертовом пространстве, и они взаимно ортогональны, ведь все относятся к разным собственным значениям, так как наш спектр невырожденный, у них кратность вырождения везде тождественно равна единице.

Матрица оператора \hat{a} в этом базисе должна быть матрицей оператора \hat{a}^+ , только транспонированной и комплексно-сопряжённой. Согласно (7.18), матричный элемент между $|n\rangle$ и $|n+1\rangle$ равняется C_n . Соответственно, матричный элемент от оператора \hat{a} должен получаться из этого транспонированием и сопряжением. То есть действие оператора \hat{a} можно записать через тот же коэффициент:

$$\hat{a}|n\rangle = C_{n-1}^*|n-1\rangle, \quad (7.19)$$

ведь если бы мы действовали \hat{a} на $|n+1\rangle$, получился бы сопряжённый матричный элемент $C_n^*|n\rangle$.

То есть существует функция номера n , C_n , которая описывает действие операторов \hat{a} и \hat{a}^+ в этом базисе из собственных векторов гамильтониана линейного гармонического осциллятора. Она не какая угодно, потому что, согласно выражению (7.4), коммутаторы $[\hat{a}^+, \hat{a}]$ и $[\hat{a}, \hat{a}^+]$ равны единице.

Теперь вычислим матричный элемент $\langle n|\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}\hat{a}^+|n\rangle$. С одной стороны, оператор $\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}\hat{a}^+$ единичный, а матричный элемент по нормированному вектору от единичного оператора равен единице. С другой стороны, согласно формулам (7.18) и (7.19), при действии $\hat{a}\hat{a}^+$ \hat{a}^+ подействует на $|n\rangle$ и вытащит C_n , а потом \hat{a} подействует на $|n+1\rangle$ и вытащит C_n^* . А при действии $\hat{a}\hat{a}^+ \hat{a}$, действуя на $|n\rangle$, вытащит C_{n-1}^* , а потом \hat{a}^+ , действуя на $|n-1\rangle$, даст C_{n-1} . Тогда получится:

$$1 = \langle n|\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = |C_n|^2 - |C_{n-1}|^2 \quad (7.20)$$

Таким образом, константы C_n должны удовлетворять рекуррентному соотношению

$$|C_n|^2 = |C_{n-1}|^2 + 1 \quad (7.21)$$

От модулей можно избавиться. У базисных векторов допустимо переопределять начальную фазу, такой произвол есть всегда, от этого физическое содержание соотношений не поменяется. Поэтому можно так определить фазы базисных векторов, чтобы C_n всегда было вещественным положительным числом. Тогда получается

$$C_n = \sqrt{C_{n-1}^2 + 1} \quad (7.22)$$

А, посмотрев на (7.17) как на частный случай (7.19), нужно написать, что

$$C_{-1} \equiv 0, \quad (7.23)$$

такого коэффициента быть не должно, он и обеспечивает зануление коэффициента при несуществующем векторе с номером -1 . Тогда будет $C_0 = 1$, $C_1 = \sqrt{2}$ и т. д. То есть решение рекуррентного соотношения (7.22) с начальным условием (7.23)

$$C_n = \sqrt{n+1} \quad (7.24)$$

Теперь мы знаем, как выглядят формулы (7.18) и (7.19). Операторы \hat{a} и \hat{a}^+ действуют на собственные вектора гамильтониана как

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (7.25)$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (7.26)$$

Проанализируем то, к чему мы пришли. Спектр эквидистантный, мы можем выстраивать цепочку из собственных векторов с помощью повышающего и понижающего операторов, и любой вектор состояния осциллятора можно разложить по базису $\{|n\rangle\}$, то есть записать как линейную комбинацию векторов с номером $|n\rangle$. Любой оператор наблюдаемой, имеющей классический аналог, выражающийся через координаты, импульсы и время, может быть записан через \hat{a} и \hat{a}^+ . Следовательно, для вычисления любого матричного элемента от любого оператора наблюдаемой по любым векторам, которые нам захочется записать, достаточно формул (7.25) и (7.26). Потому что любой вектор, стоящий в обкладках, мы разложим по $|n\rangle$, любой оператор, стоящий внутри, запишем через \hat{a} и \hat{a}^+ , и надо будет просто действовать \hat{a} и \hat{a}^+ на вектора $|n\rangle$. То есть мы теперь чисто алгебраически вычисляем любой матричный элемент от любой наблюдаемой по любому состоянию.

Например, найдём матричный элемент от гамильтониана по состоянию с номером 0, как раз пока неизвестную константу E_0 как

$$E_0 = \langle 0|\hat{H}|0\rangle \quad (7.27)$$

Подставив в (7.27) выражение для гамильтониана (7.7), получим выражение, где \hat{a} действует на $|0\rangle$ и даёт $|0\rangle$, и мы реально усредняем $\frac{1}{2}$. То есть из (7.27) будет

$$\hbar\omega \left\langle 0 \left| \hat{a}\hat{a}^+ + \frac{1}{2} \right| 0 \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (7.28)$$

Получился известный результат, что энергия основного состояния гармонического осциллятора равна $\frac{\hbar\omega}{2}$. И действительно, если бы мы попытались понизить её ещё на $\hbar\omega$, попали бы в область отрицательных энергий, чего не может быть для системы с заведомо положительно определённым гамильтонианом.

Итак, мы честным доказательством получили знакомую формулу, описывающую все значения нашего гамильтониана,

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (7.29)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$. Причём не решали дифференциальных уравнений или не брали интегралов, а обошлись алгебраическими средствами.

Соответствующие вектора $|n\rangle$ мы легко получим следующим образом. Если есть вектор с номером 0, все остальные можно дальше строить с помощью оператора \hat{a}^+ через выражение (7.25). Подействовав на $|0\rangle$, данный оператор выдаст $|1\rangle$, подействовав на $|1\rangle$, даст $\sqrt{2}|2\rangle$, то есть будет $|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+)^2|0\rangle$. И каждый раз, когда мы будем действовать \hat{a}^+ на $|n\rangle$, он будет вытаскивать следующий $|n + 1\rangle$. Поэтому по индукции можно доказать, что

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle, \quad (7.30)$$

$\sqrt{n!}$ ставим в знаменатель, чтобы сократить множитель $\sqrt{n!} = \sqrt{1} \cdot \sqrt{2} \cdot \dots$ и получить вектор $|n\rangle$ с единичной нормой. По сути, $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ – это нормирующий множитель.

То есть, если мы каким-либо образом в каком-либо представлении написали волновую функцию вектора $|n\rangle$, остаётся только записать в нём же оператор \hat{a}^+ , и мы получим формулу для получения волновой функции любого стационарного состояния гамильтониана.

До этого мы, по сути, убеждали, что для осциллятора не надо пользоваться координатным или импульсным представлением. Какой бы матричный элемент нам ни дали, его можно посчитать, просто пользуясь формулами (7.25) и (7.26). Поэтому координатное представление может понадобиться, только если напрямую спросят, например, с какой вероятностью осциллятор в момент времени t будет найден в интервале значений координаты от x_1 до x_2 . Тогда нам придётся написать волновую функцию соответствующего состояния в координатном представлении в данный момент времени и интегрировать её квадрат модуля от x_1 до x_2 .

Представление с операторами \hat{a}^+ и \hat{a} , поскольку мы здесь будем разлагать любой вектор по собственным функциям оператора энергии, гамильтониана, было бы логично назвать энергетическим. Но, поскольку в нём всё построено на формулах (7.25) и (7.26), оно получило название представление повышающих и понижающих операторов. Именно это самая удобная технология для вычислений практически в любой осцилляторной задаче.

Более того, если у нас будет осциллятор большей размерности, чем линейный, например, пятимерный гармонический осциллятор, со сложным гамильтонианом, например, квадратичной формы, мы всегда сможем перейти к нормальным координатам, диагонализировать квадратичную форму гамильтониана. И для каждой нормальной

координаты ввести свои повышающий и понижающий операторы. Тогда гамильтониан просто будет записываться как сумма гамильтонианов (7.7), только в (7.28) будут разные нормальные частоты ω , например, пять разных. И каждая будет работать независимо, так как ещё одно замечательное свойство квадратичных гамильтонианов – лёгкость деления переменных. Мы просто приводим квадратичную форму к диагональному виду, и все переменные разделяются. И мы сводим осциллятор любой s -й размерности к s линейным осцилляторам.

Координатное представление для осциллятора

Рассмотрим, что делать, если нам всё-таки понадобилось координатное представление. Сначала построим функцию $\psi_0(x)$, которая отвечает основному состоянию осциллятора, вектору $|0\rangle$. Он обязательно удовлетворяет уравнению (7.17). Запишем это уравнение в координатном представлении, подставляя (7.2). Оператор \hat{x} превращается в координату x , $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, и получается

$$\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} \right] \psi_0 = 0 \quad (7.31)$$

Это уравнение с разделяющимися переменными, то есть

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{2\hbar} x dx \quad (7.32)$$

Оно интегрируется, и мы получаем решение в экспоненциальной форме. То есть уровню с наименьшей энергией, основному состоянию, отвечает волновая функция

$$\psi_0(x) = C \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}, \quad (7.33)$$

C – константа.

В осцилляторных задачах очень часто удобно обезразмеривать все переменные. Например, если бы мы в операторе $\frac{d}{dx}$ в (7.31) ввели безразмерную координату

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad (7.34)$$

так как $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ – комбинация из параметров нашего гамильтониана с размерностью координаты, тогда безразмерный оператор \hat{a} записывался бы через неё как

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \quad (7.35)$$

В импульсном представлении будет совершенно симметрично. И оператор \hat{a} , записанный через обезразмеренный импульс и производную по нему, будет отличаться от (7.35) только на фазовый множитель $i = e^{i\frac{\pi}{2}}$, и сама функция будет похожа на (7.33).

Остаётся только определить константу C из условия нормировки. Добавим к (7.33) условие, что вектор $\langle 0|0\rangle$ нормирован на единицу:

$$\langle 0|0\rangle = 1 \tag{7.36}$$

С точки зрения координатной волновой функции (7.37) мы должны дописать интеграл от $-\infty$ до $+\infty$ от квадрата её модуля:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_0(x)|^2 \tag{7.37}$$

У базисных волновых функций мы можем сами выбирать начальную фазу, поэтому не будем писать C по модулю, сразу выбрав её подбором фазы как вещественное положительное число. Тогда из (7.37) получится

$$C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} dx \tag{7.38}$$

Это гауссов интеграл. Введём переменную (7.34). Чтобы переделать dx в $d\xi$, его нужно умножить на $\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, так что вынесется множитель $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, и останется $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t^2} dt$, интеграл Пуассона, равный $\sqrt{\pi}$. Тогда из (7.38) будет

$$C^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{\pi} \tag{7.39}$$

Чтобы (7.39) равнялось единице, правильное вещественное значение константы нормировки должно быть

$$C = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \tag{7.40}$$

Тогда нам известна волновая функция основного состояния

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}, \tag{7.41}$$

и все остальные тоже,

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} \right)^n \psi_0(x) \tag{7.42}$$

Мы, просто действуя оператором в скобках нужное количество раз, путём дифференцирования получаем волновую функцию произвольного n . А если вспомним из ММФ производящие функции, формулы Родрига для системы классических ортогональных полиномов Эрмита, узнаем, что это будет за функция. Не будем выписывать все математические выкладки, просто запишем, что из (7.42) получится

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) \quad (7.43)$$

Так можно получить любые волновые функции. В импульсном представлении будет всё то же самое. Можно даже догадаться, что для $\psi_n(p)$ мы просто поменяем в $e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$ обезразмеренную координату на обезразмеренный импульс, вместо $\frac{m\omega x^2}{2\hbar}$ будет $\frac{p^2}{m\omega\hbar}$, и вместо $x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ будет $p\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

То есть мы, просто посмотрев на функцию и зная, как всё должно быть устроено, можем написать волновую функцию этого состояния в импульсном представлении. Это та же присоединённая функция Эрмита. Квадратичные экспоненты, умноженные на полином Эрмита, и назывались присоединёнными функциями Эрмита, мы получили их в явном виде.

Замечательных следствий уникальных аналитических свойств осцилляторной задачи очень много, все мы сегодня на лекции не рассмотрим.

Эволюция осцилляторных состояний в шредингеровской картине

Мы уже смотрели эволюцию операторов координаты и импульса в осцилляторной задаче в рамках картины Гейзенберга. Поэтому нам в основном интересна шредингеровская картина, мы хотим построить эволюционирующий в ней вектор состояния для осциллятора, некий $|\psi(t)\rangle$, у которого есть начальное условие

$$|\psi(t_0)\rangle = |\psi^{(0)}\rangle \quad (7.44)$$

Начальный вектор можно разложить по полному ортонормированному базису, составленному из собственных векторов гамильтониана, то есть (7.44) можно записать как

$$\sum_{n=0}^{\infty} \langle n|\psi^{(0)}\rangle |n\rangle, \quad (7.45)$$

$\langle n|\psi^{(0)}\rangle$ – скалярные произведения, коэффициенты разложения.

Тогда сразу запишем эволюционирующий вектор $|\psi(t)\rangle$, потому что каждый $|n\rangle$ в (7.45) просто будет умножаться на экспоненту $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}$. А поскольку мы ещё и знаем E_n , и они к тому же выглядят как (7.29), будет

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|\psi^{(0)}\rangle |n\rangle e^{-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)(t-t_0)} \quad (7.46)$$

Это общее решение всех задач об эволюции вектора состояния осциллятора. Видно, что в них всё считается легко, поэтому в учебных курсах, если надо задать задачу про эволюцию, часто дают именно такую. Например, явно задают начальное состояние осциллятора в виде того же разложения по векторам $|n\rangle$, и спрашивают, как меняются с

течением времени, допустим, средние значения и дисперсии координаты и импульса. Могут быть задачи про эволюцию чистого состояния или смешанного, но с оператором плотности будет происходить всё то же самое, его матричные элементы будут умножаться в этом базисе на соответствующие временные экспоненты.

Рассмотрим нетривиальные задачи про осциллятор. Пусть z – любое комплексное число, то есть $z \in \mathbb{C}^1$. Ему будет соответствовать вектор $|z\rangle$ когерентного состояния осциллятора, нумерующийся этими комплексными числами. Определим его разложением в нашем полном ортонормированном базисе:

$$|z\rangle \equiv e^{-\frac{1}{2}zz^*} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (7.47)$$

где $e^{-\frac{1}{2}zz^*} = \frac{1}{2} e^{|z|^2}$ – правильный коэффициент нормировки. Если мы захотим посчитать форму вектора $|z\rangle$, скалярный квадрат, когда будем писать сопряжённый вектор, в формуле (7.47) для него появится $(z^*)^n$ и сопряжённый вектор $|n'\rangle$. Потом скалярное произведение $\langle n|n'\rangle$ выдаст символ Кронекера и снимет суммирование по n' , и останется квадрат множителя $e^{-\frac{1}{2}zz^*}$, умноженный на сумму, под которой два множителя $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ дадут $\frac{1}{n!}$. Так что будет

$$\langle z|z\rangle = e^{-zz^*} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (z - z^*)^{-n} = 1 \quad (7.48)$$

Выражение (7.48) равно единице, потому что данный ряд – ряд для разложения такой же экспоненты, как e^{-zz^*} , но со знаком «+». То есть выражение (7.47) определяет некий нормированный на единицу вектор состояния в нашем базисе. Раз он номирован на единицу, значит, это физически реализуемое состояние нашего линейного гармонического осциллятора. Таких векторов состояния континуальное множество, ведь множество комплексных чисел континуально. Рассмотрим, чем они особенные и почему их назвали когерентными.

Начнём с эволюции, тем более в выражении (7.46) практически всё написано. Если

$$|\psi\rangle|_{t=0} = |z\rangle \quad (7.49)$$

а в выражении для $|\psi(t)\rangle$ коэффициент разложения явно написан в (7.47), будет

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{zz^*}{2}} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t}, \quad (7.50)$$

где t вместо $t - t_0$, так как $t_0 = 0$. Вынесем экспоненту $e^{-\frac{1}{2}i\omega t}$, не содержащую n , за знак общей суммы, а $e^{-i\omega t}$ запишем как $(e^{-i\omega t})^n$ и объединим с z^n :

$$e^{-\frac{i\omega}{2}t} e^{-\frac{zz^*}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ze^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \equiv e^{-\frac{i\omega}{2}t} |ze^{-i\omega t}\rangle \quad (7.51)$$

То есть в процессе эволюции когерентное состояние остаётся когерентным. $e^{-\frac{i\omega}{2}t}$ – некий фазовый множитель, переопределяющий фазу с течением времени по заданному закону, а $|ze^{-i\omega t}\rangle$ – тот же самый когерентный вектор, отвечающий комплексному числу $ze^{-i\omega t}$. Получается когерентное состояние со слегка переопределяемой со временем фазой, у которого комплексное число z меняется умножением на экспоненту.

Рассмотрим, как наглядно представить осциллятор в этом когерентном состоянии, например, в координатном представлении. Будет какой-то волновой пакет, пакет плотности вероятности, который как-то бегает. Искать сразу функцию $\psi(x(t))$ довольно трудоёмкий, хоть и реальный процесс. Но вообще, чтобы понять, как движется пакет плотности вероятности, можно посмотреть, как меняется с течением времени среднее значение координаты, то есть по какому закону движется центр пакета, и среднее значение импульса, то есть как меняется скорость центра пакета с течением времени, а также дисперсию, чтобы узнать, как меняется ширина пакета.

Чтобы понять, как меняется с течением времени среднее значение координаты, нужно вычислить матричный элемент, экспонента $e^{-\frac{i\omega}{2}t}$ из (7.51) и сопряжённая сократятся, и будет

$$\bar{x}_z(t) = \langle ze^{-i\omega t} | \hat{x} | ze^{-i\omega t} \rangle \quad (7.52)$$

Оператор \hat{x} можно записать через \hat{a} и \hat{a}^+ , то есть из (7.52) получается

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle ze^{-i\omega t} | \hat{a} + \hat{a}^+ | ze^{-i\omega t} \rangle \quad (7.53)$$

Для дальнейшего сделаем две вещи. Во-первых, скажем, что каждое комплексное число в экспоненциальной форме $|z|e^{-i\varphi}$, где φ – фаза. Но поскольку в (7.53) $e^{-i\omega t}$, дальше будем тождественно писать

$$z \equiv |z|e^{-i\varphi_0}, \quad (7.54)$$

то есть φ_0 – минус фаза комплексного числа z , чтобы экспоненты $e^{-i\omega t}$ и $e^{-i\varphi_0}$ превратились в $e^{-i\omega t + \varphi_0}$.

Во-вторых, посмотрим, как оператор \hat{a} действует на вектор когерентного состояния $|z\rangle$. Не станем пока писать $|z(t)\rangle$, ведь мы можем посмотреть, что получится, для любого когерентного состояния:

$$\hat{a}|z\rangle = \hat{a}e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (7.55)$$

Оператор \hat{a} пройдёт через всё до $|n\rangle$, подействует на вектор $|n\rangle$ и выдаст $\sqrt{n}|n-1\rangle$. Слагаемое с $n=0$ выпадет, при нём будет нулевой множитель, поэтому в (7.55) под знаком действия оператора \hat{a} оставим $\sum_{n=1}^{\infty}$. Под ней тогда получится разложение по векторам $|n-1\rangle$, тоже начинающееся с нуля.

Введём новую переменную суммирования

$$k = n - 1 \quad (7.56)$$

По n мы суммировали от 1 до ∞ , по k от 0 до ∞ . Из $\sqrt{n}|n-1\rangle$ в (7.55) выскочит \sqrt{n} , и при сокращении с $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ получится $\frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} = \frac{1}{\sqrt{k!}}$. А в числителе стоит $z^k \cdot z$, и этот z вынесем. Получится

$$ze^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\sqrt{k!}} |k\rangle \quad (7.57)$$

$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\sqrt{k!}} |k\rangle$ опять разложение вектора z по собственным векторам гамильтониана. Чтобы было понятнее, перепишем начало и конец:

$$\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle \quad (7.58)$$

Мы обнаружили, что вектор когерентного состояния $|z\rangle$ есть собственный вектор оператора \hat{a} с собственным значением, равным комплексному числу z . Оператор \hat{a} не эрмитов, поэтому у него собственные значения не вещественны, а комплексны. Тогда можно не мучиться с матричным элементом (7.53). \hat{a} , подействовав на вектор $|z(t)\rangle$, вытащит ту же самую z на этот вектор, он нормированный. Также вектор когерентный, так что, перемножившись сам на себя, то есть образовав скалярный квадрат, выдаст единицу, ведь наше определение определило вектор, скалярный квадрат которого равен единице. То есть усреднение \hat{a} просто выдаёт $ze^{-i\omega t}$. И первое слагаемое будет представлено перемножением $ze^{-i\omega t}$ само на себя.

А действие оператора \hat{a}^+ можно перекинуть налево, он будет действовать на левый $ze^{-i\omega t}$ как свой эрмитово сопряжённый \hat{a} , вытащит своё собственное значение z . Всё будет под знаком сопряжения, поэтому мы оставим тот же вектор $ze^{-i\omega t}$, но он умножится на z^* . Потом опять вектор перемножится сам на себя, и мы обнаружим, что \hat{a}^+ выдаст $z^*e^{-i\omega t}$. То есть второе слагаемое будет представлено перемножением $z^*e^{-i\omega t}$ само на себя. Сумма комплексного числа и сопряжённого к нему выдаёт удвоенную вещественную часть этого числа.

То есть из (7.53) получается, учитывая 2 из удвоенной вещественной части,

$$\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |z| \cos(\omega t + \varphi_0), \quad (7.59)$$

$\cos(\omega t + \varphi_0)$ – вещественная часть экспоненты, так как вещественная часть $|z|e^{i\alpha} = z \cos \alpha$.

То есть центр пакета совершает гармонические колебания, при этом $|z|$ задаёт их амплитуду, а фаза комплексного числа z задаёт их начальную фазу.

То же самое произойдёт с импульсом. В выражении для импульса (7.52) мы поставим $\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}$, и там будет $\frac{1}{i}(\hat{a} - \hat{a}^+)$, поэтому опять появится $z - z^*$, а $\frac{z-z^*}{i}$ – это удвоенная мнимая часть нашего комплексного числа. В действительности мы получим производную от $\cos(\omega t + \varphi_0)$, умноженную m . Импульс – это произведение массы на скорость, то есть на производную координаты, поэтому можно сразу переписать для него (7.59), будет

$$- \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} |z| \sin(\omega t + \varphi_0) \quad (7.60)$$

Знак минус появится из минусов, стоящих в предыдущих выражениях, но для производной косинуса естественно, что получается минус синус.

Гораздо интересней, чем импульс, который можно посчитать из выражения, аналогичного (7.53), просто дифференцированием, посмотреть дисперсию координаты. Центр пакета движется как классический осциллятор, но таких состояний, где он бежит по гармоническому закону с частотой ω , у осциллятора, скорее всего, очень много. То есть это относится не только к когерентному состоянию. При этом у пакета может каким-то сложным образом меняться дисперсия, то есть в процессе движения центра тот может ещё и как-то уширяться или сжиматься, и выглядеть это может довольно сложно.

Рассмотрим, как это происходит в нашем случае. Дисперсию состояния с заданным в начальный момент времени комплексным числом z , дисперсию координаты, мы считаем как разность среднего значения от квадрата и квадрата уже посчитанного среднего:

$$D_z x = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \quad (7.61)$$

Поэтому реально нам нужно среднее от квадрата. Выражение для него такое же, как (7.53), только вместо \hat{x} должно стоять \hat{x}^2 . Мы опять на место x подставим

$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+)$. $\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right)^2$ даст $\frac{\hbar}{2m\omega}$, дальше будет стоять вектор когерентного состояния $\langle ze^{-i\omega t} |$ с эволюционирующим комплексным числом z . А между обкладками должно стоять $(\hat{a} + \hat{a}^+)^2$. Мы не можем применить бином Ньютона, потому что \hat{a} и \hat{a}^+ не коммутируют между собой, нужно честно написать результат перемножения двух таких

скобок. И снова это всё будет действовать на эволюционирующий когерентный вектор состояния с зависящим от времени комплексным числом z :

$$\overline{x_z^2} = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle ze^{-i\omega t} | \hat{a}^2 + \hat{a}^{+2} + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} | ze^{-i\omega t} \rangle \quad (7.62)$$

Оператор \hat{a} один раз подействует на свой собственный вектор и вытащит своё собственное значение и второй раз сделает точно также. Так что слагаемое \hat{a}^2 выдаст $(ze^{-i\omega t})^2$. Действие \hat{a}^+ можно два раза перекинуть налево, он каждый раз подействует как эрмитово сопряжённый оператор \hat{a} на свой собственный вектор и два раза вытащит своё собственное значение, получится $(z^*e^{-i\omega t})^2$. В слагаемом $\hat{a}^+\hat{a}$ \hat{a} действует на свой собственный вектор и вытаскивает z , оставшийся \hat{a}^+ перебрасываем налево, и он вытаскивает z^* . А в $\hat{a}^+\hat{a}$ каждый оператор действует не туда. Но из коммутационного соотношения мы можем записать

$$\hat{a}\hat{a}^+ = 1 + \hat{a}^+\hat{a} \quad (7.63)$$

Усреднение единицы даст единицу, матричный элемент от неё по нормированному вектору даст единицу, за ней получится $2\hat{a}^+\hat{a}$, то есть из (7.62)

$$(ze^{-i\omega t})^2 + (z^*e^{-i\omega t})^2 + 2(ze^{-i\omega t})(z^*e^{-i\omega t}) + 1 = (ze^{-i\omega t} + z^*e^{-i\omega t})^2 + 1 \quad (7.64)$$

При умножении на $\frac{\hbar}{2m\omega}$ (7.64) в точности даёт $\overline{x_z^2}$. То есть среднее от квадрата равняется сумме квадрата среднего и $\frac{\hbar}{2m\omega}$:

$$\overline{x_z^2} + \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (7.65)$$

И тогда дисперсия координаты в когерентном состоянии в любой момент времени независимо от комплексного числа z постоянна и равна

$$D_z x(t) = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (7.66)$$

Мы можем увеличить $|z|$, сделать амплитуду квантового осциллятора какой угодно, например, 1 метр, а дисперсия координаты всегда будет маленькой из-за постоянной Планка \hbar . Иначе говоря, эта вещь замечательно изображает классические колебания точечного осциллятора, потому что неопределённость координаты при любой амплитуде колебаний у этого пакета остаётся $\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$.

Более того, если мы также посчитаем дисперсию импульса в момент времени t , тоже получится независящая от z и t величина

$$D_z p_x(t) = \frac{\hbar m\omega}{2} \quad (7.67)$$

Произведение дисперсий координаты и импульса в любой момент равняется единице, когерентное состояние в любой момент времени минимизирует соотношение неопределённостей координаты и импульса. Это означает, что координатная волновая

функция такого состояния – гауссов пакет. То есть это просто маленький гауссов пакет, который бежит по закону колебаний классического осциллятора.

Это важная вещь, потому что она позволяет на квантовом уровне описывать классическое колебание. Пусть у нас есть осциллятор с массой в 1 кг, который совершает на пружинке колебания с амплитудой в 1 м, а нам нужно описывать его колебания на языке квантовой механики. Тогда мы скажем, что больше всего на настоящие классические колебания будет похоже описанное состояние квантового осциллятора. Потому что у заданного классического дисперсии (7.66) и (7.67) не будут заметны совсем, и будет почти как в классической механике, где никакой неопределённости координаты и импульса нет, и мы считаем, что центр масс осциллятора – точка, которая колеблется по определённому закону. В квантовой версии неопределённости появятся, но останутся квантовыми и на классическом уровне будут незаметны. Зато получается, что мы можем описать движение классического тела с точностью до квантовых поправок.

Поэтому данную задачу, скорее всего, знали наизусть все члены коллаборации LIGO, которым нужно было обнаружить гравитационные волны. Их детектор – большая установка, стоящая в четырёхкилометровом тоннеле, где откачан воздух и всё охлаждается жидким гелием. Нужно было сделать так, чтобы мы знали её колебания с точностью до квантового предела. Ведь там расстояние между зеркалами было 4 км, и коэффициент отражения был подобран таким образом, что в среднем получалось, что один квант бежит туда и обратно примерно 5 тысяч раз, и средний проход у него был где-то 200 тыс. км. А если взять амплитуду деформации расстояния гравитационной волны, пришедшей при первой регистрации, изменение длины лазерного луча, который бежит между зеркалами в этом плече интерферометра, и разделить на это расстояние, получится 10^{-21} . То есть относительная амплитуда сигнала, которую они зарегистрировали, 10^{-21} . И понятно, что для описания классического объекта учёным нужно было применять квантовую механику. Это задача сверхточных измерений – измерений, производимых над классическими телами с точностью до квантового предела, налагающегося соотношением неопределённостей, который преодолеть уже нельзя.

Мы увидели, как это делается в простом случае. В реальности ещё будут ангармонические поправки, и при добавлении этих неквадратичных слагаемых в гамильтониан всё очень усложнится. Тот же проект LIGO, если считать от начала его реализации, делали 20 лет. Нобелевскую премию за регистрацию гравитационных волн выдали только в 2018 году, через год с небольшим после их открытия, потому что ещё проверяли результаты.

Мы увидели на примере, что с осциллятором очень легко работать. Но это только первая причина, за которую линейный гармонический осциллятор любят теоретики. Есть и вторая. Когда у нас возникает сложная нелинейная задача, мы поначалу пытаемся её решить по теории возмущений, то есть говорим, что станем считать маленькие нелинейные поправки малым возмущением и решать задачи методом последовательных приближений. Мы будем рассматривать эту методику в целом применимо к квантовым

стационарным задачам, но сейчас просто заметим, что одно из лучших нулевых приближений в ней как раз линейный гармонический осциллятор.

Во-первых, любая система, совершающая малые колебания вблизи положения равновесия, чем-то похожа на гармонический осциллятор. То есть мы всегда можем рассматривать, например, колебания каждого ядра в кристалле вблизи положения равновесия, как чуть-чуть негармонический осциллятор. То есть как будто у него основной гамильтониан осцилляторный и есть какие-то ангармонические поправки. Особенно если мы хорошо заморозили кристалл, и там все колебания действительно стали очень маленькими. Пользуясь этими методами, можно проанализировать, что будет происходить с реальным объектом.

На семинаре по этой теме мы разберём задачу по то, что происходит с колебаниями этого ядра, если оно получает толчок. Ядру это сделать достаточно несложно, если оно, например, находилось в каком-то возбуждённом состоянии по своей внутренней структуре. Оно может высветиться, испустив гамма-квант, и тогда получит отдачу. При этом оно будет должно сильнее заколебаться. Поэтому улетающий гамма-квант не унесёт всю энергию перехода, всё измерение внутренней энергии ядра, а только разность освобождённой энергии перехода и энергии отдачи ядра. Значит, спектр излучения, то есть реальная энергия гамма-кванта будет чуть ниже, чем отвечающая энергии перехода. А если гамма-квант улетел на другое ядро, то, чтобы оно поглотило его и совершило обратный переход, ему нужно будет отдать этому ядру энергию отдачи. Поэтому линия излучения будет сдвинута на энергию отдачи вниз, а линия поглощения на неё же вверх.

Проблема в том, что для метастабильных уровней у ядер характерные ширины гамма-линий в спектре очень маленькие. Существует очень много ядер, у которых ширина линий излучения порядка 1 эВ. А сама энергия при этом, как правило, порядка МэВ, то есть в 10^6 раз больше. Если мы вспомним характерные массы ядер, обнаружим, что характерные энергии отдачи, которые как правило, минимум десятки эВ, на порядок, а то и на два больше ширины линий. То есть линия излучения сдвинулась вниз, а поглощения вверх на расстояние на порядок больше ширины линий, и у них не будет перекрытия. Поэтому всем было понятно, что гамма-квант, испущенный ядром, не может поглотиться таким же ядром в том же кристалле, это энергетически невозможно. Особенно если ядро хорошо заморозили и там нет доплеровского уширения линий.

Когда в лабораторию, занимающуюся, например, гамма-излучением ядер, приходит новый молодой сотрудник, только что закончивший аспирантуру, ему дают задачу, до которой не доходят руки, чтобы он научился работать. Однажды одному такому сотруднику сказали, что все знают, что такого излучения и поглощения ядер быть не может, и ему надо это аккуратно проверить. Он должен быть заморозить и излучатель, и поглотитель, чтобы первый имел очень узкую линию излучения, а второй поглощения, и убедиться, что никакого поглощения нет. До него все замораживали либо излучатель, получая узкую линию излучения и широкую поглощения, либо наоборот.

Этого человека звали Рудольф Мёссбауэр, это была его первая самостоятельная научная работа, и он получил за неё Нобелевскую премию по физике. А почему так случилось, мы попробуем разобраться на следующем семинаре.

Лекция 8. Использование симметрии для решения задач

Наступил переходный момент, связанный с тем, что мы изучили простейшие квантовые системы – одномерные и кубиты, поняли, как работают правила игры, установленные нами в системе аксиом, и теперь готовы к тому, чтобы разбираться с более сложными системами. Для этого нужно понять две важные вещи.

Приёмы для работы со сложными системами

1) Во-первых, более сложные системы, с несколькими степенями свободы или составные, из нескольких квантовых подсистем, являются механическим усложнением более простых. Даже если материальная точка совершает движение в трёхмерном пространстве, можно рассмотреть пространство её состояний как пространство составной системы из трёх подсистем, в одной из которых описываем движение по оси x , в другой по y , в третьей по z .

В этом случае мы будем исходить из общей идеологии и рассматривать гильбертово пространство чистых состояний составной системы как прямое произведение пространств состояний подсистем

$$H_{I+II} = H_I \otimes H_{II} \quad (8.1)$$

Это чисто механическое усложнение, у нас увеличивается число переменных в описании системы.

Также мы уже поняли, что один из основных инструментов работы в пространстве состояний – выстроенный удобным для решения интересующих нас задач полный ортонормированный базис в гильбертовом пространстве чистых состояний. Работая в нём, можно решать задачи про чистые и смешанные состояния, задачи эволюции, особенно для стационарных систем, то есть после его построения сразу возникает много технических возможностей.

И любой полный ортонормированный базис в гильбертовом пространстве состояний составной системы можно построить из упорядоченных произведений базисных элементов в пространствах состояний подсистем. То есть мы договариваемся, что волновую функцию частицы, совершающей движение по осям x , y , и z , можно записать как произведение базисных волновых функций, зависящих от x , y , и z , если условия движения по каждой из осей позволяют построить соответствующее пространство состояний, описывающее движение этой частицы по одной оси. То есть мы всегда можем в качестве первого шага пойти по простому пути, договорившись, что

$$\psi(x, y, z) = \psi_1 \cdot \psi_2 \cdot \psi_3, \quad (8.2)$$

где $\psi_1 = \psi(x)$, $\psi_2 = \psi(y)$, $\psi_3 = \psi(z)$, что и означает упорядоченное произведение. Хотя можно действовать и по-другому, если будет удобней.

2) Второе важное обстоятельство состоит в том, что, как только мы переходим к многомерной системе, то сразу, например, обыкновенные дифференциальные уравнения для стационарного уравнения Шредингера для частицы превращаются в уравнения в

частных производных. Из ММФ мы помним, что для того, чтобы аналитически решать задачи в частных производных, даже линейные дифференциальные уравнения второго порядка, необходима определённая симметрия. Произвольное уравнение, не обладающее какой-то симметрией, в области, не обладающей явной симметрией, в общем виде решается, но в основном через спецфункции и довольно сложным образом.

Поэтому в учебных и в большинстве реалистичных задач мы стараемся использовать любую симметрии динамики, которой обладает исследуемая система, для упрощения решения таких уравнений. Это второй важный момент при исследовании сложных систем.

Прежде чем анализировать многомерные задачи и составные системы, поговорим о том, с чем, с чем мы должны столкнуться и как собираемся действовать.

Относительно первого случая, изучения составных систем, заметим, что дело не только в увеличении числа переменных. При работе с такими системами возникают разные новые квантовые эффекты. Например, для составной системы даже из двух элементов мы обсуждали возникновение квантовой запутанности, состояний, где измерения, производимые над одним элементом, влияют на статистику результатов измерений, проводимых над другим даже при кажущемся отсутствии между этими измерениями внешней причинно-следственной связи. Это связано с тем, что измерения, производимые над одним элементом, меняют состояние всей системы, что отражается на всех остальных измерениях, в ней производимых.

Задача 1. Телепортация кубита с помощью квантовой запутанности

Данный пример будет иллюстрировать особенности поведения составных систем при наличии квантовой запутанности. Рассмотрим технологическую задачу, очень важную для квантовой информатики, о транспортировке или телепортации состояния кубита.

Есть два участника этой процедуры, A и B , в англоязычной версии традиционно Alice и Bob. Alice нужно передать Bob информацию о состоянии некоего кубита, который у неё есть. Ей нужно, чтобы у Bob, находящегося далеко от неё, возник кубит ровно в том состоянии, в каком находится откуда-то полученный ею. В классической постановке задачи Alice сама не знает этого состояния.

Если это чистое состояние, теоретически есть возможность, что Alice производит над своим кубитом все необходимые измерения, чтобы его идентифицировать, а потом по классическому каналу, с помощью секретной радиосвязи, отправляет Bob информацию о них. И он уже своими воздействиями на свой кубит по той же схеме переводит его в это же самое состояние. В таком случае речь будет идти о независимых измерениях у Alice и Bob. Недостатком такой схемы является требование секретности передачи. Неизвестный злоумышленник, подключившись к каналу данной классической связи, может получить информацию Alice вместо Bob или вместе с ним и тоже изготовить

такой кубит. Тогда такой канал связи оказывается незащищённым, а по условию задачи нужно построить стопроцентно защищённый.

Пусть кубит, подлежащий телепортации, находится в произвольном состоянии $|\psi_1\rangle$, которое Alice изначально не знает. Состояние кубита всегда произвольная суперпозиция двух нормированных на единицу базисных состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$.

$$|\psi_1\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (8.3)$$

Базовая идея состоит в том, что Alice и Bob могли подготовиться к процедуре телепортации и создать пару запутанных кубитов. Теперь у них есть общая двухкубитовая система, которую они загнали в конкретное белловское состояние с квантовой запутанностью:

$$|\varphi_{23}\rangle \equiv \frac{\alpha}{\sqrt{2}}[|00\rangle + |11\rangle] \quad (8.4)$$

Это чистое состояние, в котором с равной вероятностью оба кубита могут находиться в состоянии $|0\rangle$ или $|1\rangle$. Пусть первый кубит в данном упорядоченном произведении, чьё состояние описывается первой цифрой, это кубит Alice, который физически находится в зоне влияния Alice, а второй кубит Bob, который в зоне влияния Bob. Они могут быть сильно разделены пространственно, но при этом мы считаем, что квантовую когерентность удалось сохранить. С технологической точки зрения это главная сложность такого подхода.

Дальше Alice присоединяет дополнительный телепортируемый кубит к этой системе, и мы получаем трёхкубитовую систему. При этом мы не производили никаких воздействий. Вообще мы можем позволить кубитам свободно эволюционировать, создав для них некоторые условия. В этом случае преобразование кубита или многокубитовой системы в процессе внутренней эволюции всегда преобразование с помощью унитарного оператора. В квантовой информатике всегда предполагают, что, если есть некий унитарный оператор, переводящий состояние $|1\rangle$ квантовой системы в состояние $|2\rangle$, то физики всегда сумеют придумать реальные внешние физические условия, которые надо создать для данной системы, чтобы она эволюционировала в соответствии с этим оператором. Теоретически это всегда возможно, и для конкретной схемы тоже, если подумать, как это сделать.

То есть у нас есть унитарные операции, свободная эволюция системы в некоторых специально созданных для неё условиях, и измерения. Измерения – это всегда коллапсы, когда мы получаем взаимодействия нашей системы с измерительным прибором, которые загоняют её в какое-то конкретное состояние. И мы что-то о нём знаем, потому что знаем классически произведённые результаты измерений, сообщённые прибором.

Для начала мы строим начальное состояние системы как прямое произведение векторов состояний подсистем (8.3) и (8.4), просто мысленно объединяя их в одну систему:

$$|\text{нач}\rangle = |\psi_1\rangle|\varphi_{23}\rangle, \quad (8.5)$$

где $|\psi_1\rangle$ – телепортируемый кубит, который мы считаем первым в наборе из трёх кубитов, участвующих в процедуре.

Тогда на языке трёхкубитовых систем начальное состояние превратится в

$$\frac{\alpha}{\sqrt{2}}[|000\rangle + |011\rangle] + \frac{\beta}{\sqrt{2}}[|100\rangle + |111\rangle] \quad (8.6)$$

То есть наша система находится в чистом состоянии, являющемся суперпозицией четырёх разных базисных чистых состояний трёхкубитовой системы.

На первом шаге Alice применяет операцию контролируемого нет к первому и второму кубитам системы, $CNOT_{12}$. Операция $CNOT$ унитарная, она не меняет норму вектора. $CNOT_{12}$ означает, что если 1-й кубит находится в состоянии $|0\rangle$, то состояние 2-го кубита не меняется, а если в состоянии $|1\rangle$, состояние 2-го изменяется на противоположное. Поэтому эта операция переведёт систему в состояние $|I\rangle$. В (8.6) в первой скобке 1-й кубит всегда находится в состоянии $|0\rangle$, поэтому у 2-го ничего не меняется, и первая скобка остаётся прежней. А во второй скобке 1-й кубит находится в состоянии $|1\rangle$, поэтому у 2-го состояние поменяется на противоположное. Тогда получится

$$|I\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}[|000\rangle + |011\rangle] + \frac{\beta}{\sqrt{2}}[|110\rangle + |101\rangle] \quad (8.7)$$

Это унитарная операция, то есть полученное состояние по-прежнему остаётся квантово-когерентным чистым состоянием трёхкубитовой системы.

После этого Alice выполняет ещё одну унитарную операцию. В квантовой информатике похожие часто называют операциями Адамара. С точки зрения пространства состояний это некий аналог поворота в нашем двумерном базисе. Всякое состояние $|0\rangle$ должно преобразоваться в $\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$, а $|1\rangle$ в $\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$. Пусть Alice производит эту операцию над телепортируемым кубитом $|\psi_1\rangle$. Теперь каждое слагаемое распадётся на два, и их получится восемь.

Когда мы проведём эту операцию на $|0\rangle$ в первой скобке в (8.7), ещё раз выскочит $\frac{1}{\sqrt{2}}$, и при первой скобке будет $\frac{\alpha}{2}$. Аналогично при второй получится $\frac{\beta}{2}$:

$$|II\rangle = \frac{\alpha}{2} \cdot \{|000\rangle - |100\rangle + |011\rangle + |111\rangle\} + \frac{\beta}{2} \{|110\rangle - |010\rangle + |001\rangle + |101\rangle\} \quad (8.8)$$

Мы выполняли только унитарные операции, и это по-прежнему когерентное состояние трёхкубитовой системы.

III) И теперь Alice производит измерение над своей парой кубитов, то есть приводит находящиеся в её доступности кубиты $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ во взаимодействие с классическим прибором. Он сообщает ей, в каком состоянии они находились, выдавая $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ или $|11\rangle$, то есть сообщает, в какое двухкубитовое состояние он загнал данную пару. Это приведёт к редукции состояния, при этом когерентность с кубитом у

Bob будет разрушена. То есть в результате измерения трёхкубитовая система распадается на двухкубитовую и Alice и однокубитовую у Bob, Alice выделяет некое конкретное состояние у первой пары кубитов.

За счёт запутанности кубит Bob должен перейти в состояние, получающееся в результате измерительной редукции состояния (8.8). Это зависит от результата измерения Alice. Составим таблицу, в которой в первой колонке будем писать результаты измерения Alice, а во второй, что получится у Bob.

Пусть Alice получила $|00\rangle$. 00 есть в (8.8) в первом и седьмом слагаемых $|000\rangle$ и $|001\rangle$, поэтому реализуется только этот вариант. Заметим, что состояние кубита Bob после этого уже будет нормировано на единицу. Нормировки в (8.8) сообщают вероятность, с которой у Alice получится состояние $|00\rangle$. Мы можем посчитать её для заданных α, β , но нас она не интересует. Нам важно конечное состояние кубита Bob, которое надо будет заново отнормировать на единицу после такой процедуры. С коэффициентом $\frac{\alpha}{2}$ получается $|0\rangle$ и с коэффициентом $\frac{\beta}{2}$ $|1\rangle$. $\frac{1}{2}$ оказывается общим множителем, а состояние $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ как раз нормировано на единицу, поэтому получается, что кубит Bob оказался в состоянии $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, то есть в состоянии телепортируемого кубита $|\psi_1\rangle$. Alice сама его не знала, но, если после произведённых действий она получила результат $|00\rangle$, то знает, что кубит Bob находится в нужном состоянии. Она отправляет свой результат Bob по классическому каналу, и, если Bob получает от неё $|00\rangle$, он тоже это знает. Причём редукция произошла мгновенно: в момент, когда Alice произвела своё измерение, кубит Bob оказался в нужном состоянии.

Если Alice получила $|01\rangle$, в (8.8) на первых двух местах такая комбинация в слагаемых $|011\rangle$ и $|010\rangle$. $\frac{1}{2}$ опять уйдёт при восстановлении нормировки, и у Bob получится $\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle$. Если Alice отправит ему сообщение $|01\rangle$, то Bob должен применить к своему кубиту унитарную операцию NOT, которая переводит $|1\rangle$ в $|0\rangle$, а $|0\rangle$ в $|1\rangle$, и тогда он получит требуемый кубит.

Если Alice получила результат $|10\rangle$, который есть в (8.8) в слагаемых $|100\rangle$ и $|101\rangle$, кубит Bob получится в состоянии $-\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Bob должен применить к нему операцию, при которой $-|0\rangle$ переходит в $|0\rangle$, то есть у него меняется фаза, а у $|1\rangle$ она не меняется. Данная операция тоже унитарная, по сути, это контролируемое умножение на $e^{i\pi}$. А значит, можно придумать такие условия, при которых кубит Bob, проэволюционировав, перейдёт в нужное нам состояние.

И если Alice получила результат $|11\rangle$, который в (8.8) в слагаемых $|111\rangle$ и $|110\rangle$, кубит Bob будет в состоянии $-\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle$. И ему нужно будет сначала произвести операцию NOT, чтобы поменять местами 0 и 1, а потом ту же операцию, что и в предыдущем случае.

То есть задача решена. В распоряжении Bob оказывается кубит в состоянии, точно совпадающем с состоянием телепортируемого кубита. Разумеется, никакой

телепортации реального кубита не произошло, у Bob остался его прежний кубит, а телепортируемый всё так же у Alice. Но кубит Alice её прибор перевёл в какое-то состояние в соответствии с результатом измерения, и она теперь не имеет технической возможности определить, в каком состоянии он был. Однако, получив от Alice классическое сообщение, Bob точно знает, как сделать, чтобы у него оказался кубит в нужном состоянии. Это означает, что результат всех прочих операции измерения, которые Bob мог бы с этим кубитом произвести, не будет отличаться от результата таких же операций над телепортируемым кубитом. То есть Bob не сможет отличить результат этих операций от результата при реальной транспортировке телепортируемого кубита.

Причём время, когда у Bob окажется кубит в одном из перечисленных состояний, которые легко переводятся в требуемое либо уже совпадают с ним, определяется временем выполнения процедур Alice и не зависит от расстояния между Alice и Bob. Например, если Alice потребовалась 1 секунда, у Bob произойдёт всё, что нужно, через секунду, даже если он находится на расстоянии 3 световых лет. Правда, узнать, как ему завершить операцию, Bob сможет только через 3 года, когда до него дойдёт классический сигнал с результатом Alice.

И в последнее время действительно можно увидеть сообщения, что группа учёных телепортировала фотон, например, на 8 метров, вполне макроскопическое расстояние, хотя сейчас могут и на большее. Реальной телепортации не было, но фотон из спутанной пары приобрёл состояние телепортируемого и теперь ничем от него не отличается, была мгновенно передана информация о квантовом состоянии.

С точки зрения классического мышления это выглядит немного странно, и, несмотря на простоту процедуры, многие исследователи в квантовой теории не верили, что такое можно сделать. Но сейчас телепортация кубита это технически реализуемая процедура. Её схема может немного отличаться в разных установках, но сама идея всегда в том, что мы пользуемся унитарными операциями и в какой-то момент производим редукцию состояния с помощью измерений.

Потенциальный злоумышленник может сколько угодно перехватывать сигнал Alice. Он будет знать, что будет делать Bob, но не узнает состояние телепортируемого кубита без физического доступа к второй половине спутанного кубита. Как говорят люди, занимающиеся квантовой криптографией, секретность передачи гарантируется не усилиями передающих и принимающих людей или совершенством технологий, а законами природы. Например, на кафедре квантовой электроники на физфаке есть лаборатория профессора С. П. Кулика, которая уже больше 10 лет назад презентовала квантовый телефон, разговор по которому подслушать невозможно. Сейчас в квантовой информатике работают над слабым местом этого алгоритма – ускорением классической передачи информации до сверхсветовых скоростей, но в реальности это пока не удалось.

Использование симметрий

Перейдём ко второму аспекту, где мы говорили, что необходимо использовать соображения симметрии. Немного повторимся, чтобы напомнить базовую идею.

Если у нас есть некая симметрия, значит, существует унитарный оператор \hat{u} , переводящий любое чистое состояние $|\psi\rangle$ в состояние

$$\hat{u}|\psi\rangle \equiv |\tilde{\psi}\rangle \quad (8.9)$$

Это преобразование является преобразованием симметрии динамики, то есть уравнение Шредингера для преобразованного состояния $|\tilde{\psi}\rangle$ совпадает с уравнением Шредингера, для соответствующего непреобразованного.

Пусть мы имеем исходное уравнение Шредингера для непреобразованного оператора

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle \quad (8.10)$$

Причём здесь пока для простоты стационарная задача и стационарное преобразование симметрии, то есть \hat{u} не зависит от t :

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} = 0 \quad (8.11)$$

Для решения стационарных задач нам нужны именно стационарные симметрии.

Если выразить из (8.9) $|\psi\rangle$, с учётом того, что \hat{u} унитарный оператор, получится

$$|\psi\rangle = \hat{u}^+|\tilde{\psi}\rangle \quad (8.12)$$

Подставляя (8.12) в (8.10) и вынося \hat{u}^+ из-под знака $\frac{\partial}{\partial t}$, так как оно не зависит от времени, получим

$$i\hbar \hat{u}^+ \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} \hat{u}^+ |\psi\rangle \quad (8.13)$$

Умножим (8.13) слева на \hat{u} , чтобы слева из $\hat{u}\hat{u}^+$ образовался единичный оператор. Мы хотим, чтобы уравнение Шредингера для преобразованного вектора $|\tilde{\psi}\rangle$ было такое же, как и для $|\psi\rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial |\tilde{\psi}\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\tilde{\psi}\rangle, \quad (8.14)$$

то есть чтобы унитарное преобразование $|\psi\rangle$ его не изменяло и оно было форминвариантным. Для этого нужно, чтобы было

$$\hat{H} = \hat{u}\hat{H}\hat{u}^+, \quad (8.15)$$

так как \hat{u} – преобразование динамики конкретной системы, а физика конкретной системы задаётся гамильтонианом. (8.15) эквивалентно условию, что

$$\hat{H}\hat{u} = \hat{u}\hat{H}, \quad (8.16)$$

то есть гамильтониан коммутирует с нашим преобразованием симметрии:

$$[\hat{H}, \hat{u}] = 0 \quad (8.17)$$

Запишем преобразование симметрии, как и всякое унитарное преобразование, в виде

$$\hat{u} = e^{i\hat{F}}, \quad (8.18)$$

где \hat{F} – эрмитов оператор, то есть для выполнения $\hat{u}^\dagger = \hat{u}^{-1}$ должно быть

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F} \quad (8.19)$$

Тогда, связав уравнение (8.17) и (8.18), заметим, что оператор \hat{F} , как и \hat{u} , явно не зависит от времени:

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0 \quad (8.20)$$

и также как и \hat{u} коммутирует с гамильтонианом:

$$[\hat{H}, \hat{F}] = 0 \quad (8.21)$$

То есть \hat{F} здесь интеграл движения, некий эрмитов оператор наблюдаемой, который в гайзенберговской картине не эволюционирует. Он остаётся постоянным в процессе эволюции системы и его не надо переопределять. Это частный случай теоремы Нётера, \hat{F} – эрмитов оператор наблюдаемой, который коммутирует с гамильтонианом, явно не зависит от времени и связан с преобразованием симметрии динамики как (8.18).

Связь (8.18) нам важна, потому что мы хотим использовать её для решения стационарных задач. Основная задача в отношении любой стационарной системы – решение уравнения стационарного уравнения Шредингера или спектральной задачи для гамильтониана

$$\hat{H}\psi = E_n\psi \quad (8.22)$$

Квантовое число n нумерует уровни энергии, соответственно, оно возникает и у волновой функции.

И раз \hat{u} или \hat{F} коммутируют с гамильтонианом, то, вспоминая математику, раз эти два оператора коммутируют, у них существует общая полная система собственных функций в любом представлении. А значит, решая в отношении волновых функций задачу (8.22), можно добавить туда требование, что $|\psi\rangle$ является собственной функцией \hat{F} или \hat{u} , как удобнее, данная система будет разрешимой.

Единственное, у (8.22) есть много разных базисов, и когда мы добавляем требования, что они собственные функции каких-то сохраняющихся величин вместе с гамильтонианом, сужаем выбор базиса. В итоге, если мы для системы с s степенями свободы добавим к уравнению (8.22) ещё $s - 1$ уравнение $F|\psi\rangle = f\psi$ в соответствии с симметриями, зафиксируем этот базис однозначно. Это некий квантовый аналог того, что в теоретической механике называли теоремами Лиувилля-Арнольда для вполне интегрируемых систем – условия, при которых для системы с s степенями свободы помимо энергии существует ещё $s - 1$ адиабатический вариант, как их называют в общем

случае. Возникает система первых интегралов, мы сводим уравнения движения к системе s уравнений вида «величина равняется константе», и оно в данном случае является следствием уравнения движения. Это и называется решить систему на уровне первых интегралов движения.

Мы в этом случае вместо того, чтобы решать задачу (8.22), добавляем к ней уравнение

$$\hat{F}_1 \psi_n = f_1 \psi_n \tag{8.23}$$

Это означает, что к индексам, нумерующим волновые функции, добавится индекс f_1 . Продолжим данную систему уравнений дальше, добавляя уравнения (8.23) вплоть до $(s - 1)$ -го, где \hat{F}_{s-1} действует на ту же функцию. Все квантовые числа до f_{s-1} должны добавиться в список чисел, нумерующих волновые функции, то есть волновая функция будет нумероваться s квантовыми числами. Получится система

$$\begin{cases} \hat{H} \psi_{nf_1..f_{s-1}} = E_n \psi_{nf_1..f_{s-1}} \\ \hat{F}_1 \psi_{nf_1..f_{s-1}} = f_1 \psi_{nf_1..f_{s-1}} \\ \dots \\ \hat{F}_{s-1} \psi_{nf_1..f_{s-1}} = f_{s-1} \psi_{nf_1..f_{s-1}} \end{cases} \tag{8.24}$$

Здесь \hat{H} коммутирует со всеми наблюдаемыми $\hat{F}_1, \dots, \hat{F}_{s-1}$, так как они интегралы движения. Но чтобы у них была общая собственная функция, важно, чтобы они ещё и коммутировали попарно между собой, то есть для $\forall i, j$ должно быть

$$[\hat{H}, \hat{F}_i] = 0 = [\hat{F}_i, \hat{F}_j] \tag{8.25}$$

Возникает базовая идея использования симметрии задачи. Вместо того, чтобы решать одно уравнение с не до конца определённой собственной функцией, мы решаем систему из уравнений, которые, во-первых, однозначно определяют наш базис собственных функций. И во-вторых, когда у нас возникает система, появляется и техническая возможность при её решении начинать с наиболее простых уравнений. Когда мы решим самое простое, на волновую функцию уже наложится некое ограничение, и второе уравнение мы будем решать в более суженном классе функций, из-за чего решать его станет легче. То есть мы в системе (8.24–8.25) постепенно двигаемся от самого простого уравнения к самому сложному, пока не решим все.

В волновой функции в уравнениях (8.24) в итоге всё равно набираются все индексы. Собственное значение f_1 может быть вырождено, но у функции и так есть дополнительный индекс. В итоге мы хотим набрать набор операторов $\hat{H}, \hat{F}_1.. \hat{F}_{s-1}$, который для данной системы фактически образует полный набор наблюдаемых. Это набор попарно коммутирующих и независимых операторов, ведь, если какой-то из них является функцией от всех остальных, то соответствующее уравнение ничего нового не добавит. Его можно будет выбросить из системы без ущерба для её содержания, и получится, что система в собственных функциях неоднозначно определена. А так она определена с точностью до фазовых множителей, то есть до переопределения начальной

фазы каждого из базисных состояний. Собственное значение зависит от того, что за оператор.

Познакомимся с конкретными симметриями динамики, которые сможем использовать при решении задач.

Задача 2. Сведение двухчастичной задачи к одномерной

Мы уже видели, что, если в одномерной задаче отсутствуют внешние силы, действующие на систему, то её полный импульс сохраняется. Пусть две частицы движутся вдоль одной прямой, гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + u(x_1 - x_2) \quad (8.26)$$

Тогда величина оператора общего импульса

$$\hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \quad (8.27)$$

есть интеграл движения. И мы можем подчинить общую собственную функцию требованию, что она является собственной функцией оператора общего импульса.

Опыт теоретической механики должен подсказать, что это означает. Пусть у нас есть координатная волновая функция этой системы, являющаяся функцией координат двух частиц $\psi(x_1, x_2)$. Можно попытаться подставить её в (8.26) и искать собственную функцию двух переменных оператора, содержащего дифференцирование по двум переменным в $\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1}$ и $\frac{\hat{p}_2^2}{2m_2}$ и функцию $u(x_1 - x_2)$, перепутывающую эти переменные. Но будет удобнее, если перейти в $\psi(x_1, x_2)$ от переменных x_1, x_2 к переменным, где первая

$$\hat{X} = \frac{m_1 \hat{x}_1 + m_2 \hat{x}_2}{m_1 + m_2} \quad (8.28)$$

Канонически сопряжённым импульсом к этой координате и будет (8.27) в том смысле, что у \hat{X} с \hat{P} будет правильное коммутационное соотношение, они будут коммутировать на $i\hbar$. Если так коммутируют \hat{x}_1 с \hat{p}_1 и \hat{x}_2 с \hat{p}_2 , то и \hat{X} с \hat{P} тоже.

Второй переменной будет

$$\hat{x} = \hat{x}_1 - \hat{x}_2 \quad (8.29)$$

для которой канонически сопряжённым импульсом является импульс μ -точки.

$$\hat{p} = \frac{m_2 \hat{p}_1 - m_1 \hat{p}_2}{m_1 + m_2} \quad (8.30)$$

Тогда будет

$$\psi(x_1, x_2) = \psi(X, x) \quad (8.31)$$

В результате чего уравнение

$$\hat{P}\psi = P\psi \quad (8.32)$$

окажется просто уравнением на зависимость от X , потому что в координатном представлении с координатами X, x будет

$$\hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial X} \quad (8.33)$$

Тогда получается, что волновая функция ψ_E , собственная функция гамильтониана (8.26), может быть занумерована ещё квантовым числом K и быть записана как

$$\psi_{EK} = \psi_{EK}(x) \cdot e^{iKX}, \quad (8.34)$$

K – произвольное вещественное число от $-\infty$ до $+\infty$.

e^{iKX} – собственная функция оператора импульса, плоская волна. Собственным значением \hat{P} будет $\hbar K$. Раз K, X есть в показателе экспоненты, значит, эти индексы будут у ψ , и в действительности мы получим уравнение на движение μ -точки в потенциале $u(x_1 - x_2)$ из (8.26). То есть, используя симметрию, в один шаг сведём нашу двумерную задачу к одномерной. Мы выделили из неё простую часть выбором удобных координат для решения уравнения

$$\hat{P}\psi(x_1, x_2) = \hat{H}_K\psi(x_1, x_2) \quad (8.35)$$

То есть мы выбрали удобные переменные для более простой задачи, решили её, и у нас сразу упростилась и первая задача (8.22), оказавшись задачей про одномерное движение μ -точки в потенциале u .

Таких приёмов существует много. Всё, что известно из теоретической механики про использование симметрий динамики, в рамках таких приёмов прямо переносится в квантовую механику.

Задача 3. Сведение трёхмерной задачи к одномерной

Это важный пример симметрии, с которым много придётся работать в самых разных задачах. В атомной и ядерной физике его использовали очень часто.

Пусть наблюдаемая \hat{L} определена для точечной частицы как

$$\hat{L} \equiv \frac{1}{\hbar} [\hat{r} \times \hat{p}] \quad (8.36)$$

Деление на постоянную Планка здесь естественно, теоретики любят безразмерные величины, а размерность произведения координаты на импульс совпадает с размерностью постоянной Планка. Так что мы определили безразмерную эрмитову наблюдаемую, физический смысл которой момент количества движения. В микромире его обычно называют орбитальным моментом количества движения, потому что там есть моменты и другой природы, тот же спиновый.

У многих систем орбитальный момент \hat{L} является интегралом движения. Чтобы установить, когда это происходит, надо рассмотреть унитарное преобразование, для которого эта наблюдаемая является генератором. Рассмотрим преобразование $\hat{u}(\vec{\Omega})$, зависящее от трёх вещественных параметров, которые мы обозначим $\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z$ и будем воспринимать как три проекции некоего вещественного вектора $\vec{\Omega}$:

$$\hat{u}(\vec{\Omega}) = e^{i\vec{\Omega}\hat{L}} \quad (8.37)$$

Мы на самом деле определили три оператора $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ для трёхмерного движения материальной точки и унитарное преобразование, так как оператор \hat{L} эрмитов. Разберёмся, как это преобразование будет действовать на операторы наблюдаемых. Для наблюдаемых, имеющих классический аналог, нужно просто посмотреть, как при нём преобразуются операторы координаты и импульса.

Запишем преобразованный оператор \hat{r}' через исходный оператор координаты частицы \hat{r} и введённый унитарный оператор \hat{u} как

$$\hat{r}' = \hat{u}\hat{r}\hat{u}^\dagger \quad (8.38)$$

В трёхмерном пространстве можно выбирать систему координат как удобно, главное, потом не забыть, что мы перешли от общих соотношений к соотношениям в заданной системе координат, чтобы правильно понять полученные результаты. Здесь заданный вектор $\vec{\Omega}$ задаёт выделенное направление в пространстве, направим вдоль него ось z , а оси x и y перпендикулярно так, чтобы они образовывали правую тройку координатных осей (рис. 8.1).

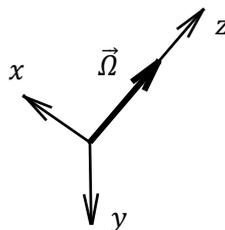


Рис. 8.1. Введённая система координат

Тогда в этой системе координат будет

$$\hat{u} = e^{i\Omega\hat{L}_z} \quad (8.39)$$

А оператор \hat{r}' по-прежнему можно будет записывать через x', y', z' . Оператор x' в этом случае при нашем унитарном преобразовании будет преобразовываться как $e^{i\Omega\hat{L}_z}\hat{x}e^{-i\Omega\hat{L}_z}$.

В курсе предлагалось доказать тождество, что для операторов \hat{A} и \hat{B} можно записать соотношение $e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}}$ в виде ряда по коммутаторам как

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \frac{1}{1!}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (8.40)$$

Это тождество можно доказать алгебраически. Используем его в данной задаче, введя операторнозначную функцию $F(\hat{x})$, чтобы в показателях экспонент стояли $x\hat{A}$ и $-x\hat{A}$, тогда мы получим разложение (8.40) при разложении по степеням \hat{x} в ряд Тейлора, а потом положив $\hat{x} = 1$ в конечной формуле. Видно, что в нашем случае в роли \hat{A} будет выступать $i\Omega\hat{L}_z$, а в роли \hat{B} выступит \hat{x} .

Поэтому получится, если учесть, что в выражении $i\Omega\hat{L}_z$ можно вынести $i\Omega$ в первой степени – мнимое число,

$$e^{i\Omega\hat{L}_z}\hat{x}e^{-i\Omega\hat{L}_z} = \hat{x} + \frac{1}{1!}(i\Omega)' \cdot [\hat{L}_z, \hat{x}] + \frac{1}{2!}(i\Omega)^2 [L_z, [\hat{L}_z, \hat{x}]] + \dots \quad (8.41)$$

Чтобы посчитать такое выражение, нужно уметь считать коммутаторы компонент оператора орбитального момента с компонентами оператора координаты. Представим, что мы хотим вычислить коммутатор i -й компоненты оператора орбитального момента и j -й компоненты оператора координаты. Для этого вспомним запись векторного произведения в покомпонентной форме. Его всегда можно записать с помощью символа Леви-Чивиты, в частности \hat{L}_i , как $\varepsilon_{ikl}\hat{x}_k\hat{p}_l$,

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = \varepsilon_{ikl} \frac{1}{\hbar} [\hat{x}_k\hat{p}_l, \hat{x}_j] \quad (8.42)$$

В первом члене коммутатора мы подразумеваем суммирование по kl , здесь работает соглашение о сокращённом суммировании. $\frac{1}{\hbar}$ выходит из определения \hat{L}_i .

\hat{x}_k коммутирует с \hat{x}_j , поэтому его сразу можно вынести из коммутатора в (8.42) налево. Останется $[\hat{p}_l, \hat{x}_j]$ – канонический коммутатор, равный $-i\hbar$, потому что он обратный коммутатору координаты с импульсом. И из (8.42) получится

$$\varepsilon_{ikl}\hat{x}_n \frac{1}{\hbar} (-i\hbar)\delta_{lj} \quad (8.43)$$

Суммирование по повторяющемуся индексу l снимется за счёт символа Кронекера, на месте l будет стоять j . И чтобы переделать возникшее ε_{ikj} в ε_{ijk} , мы сделаем одну перестановку индексов, которая поменяет знак у символа Леви-Чивиты. Тогда из (8.43) получится

$$i\varepsilon_{ikl}\hat{x}_k \quad (8.44)$$

Если также посчитать коммутатор $[\hat{L}_i, \hat{p}_j]$, получится

$$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k \quad (8.45)$$

И вообще мы обнаружим, какой класс операторов удовлетворяет такому коммутационному соотношению с оператором \hat{L}_i .

В (8.41) во втором слагаемом стоит $[\hat{L}_z, \hat{x}]$. В (8.42) $i = 3, j = 1$, соответственно, в (8.44) получается $31k$. Не 0 получается, только когда $k = 2$, и $\varepsilon_{312} = +1$, потому что мы должны будем два раза переставить 3 через 1 и 2, чтобы восстановить правильный порядок 123, или сделать циклическую перестановку. Таким образом, в (8.44) получается $i\hat{y}$, и $[\hat{L}_z, \hat{x}]$ в (8.41) оказывается равно $i\hat{y}$. В третьем слагаемом $[\hat{L}_z, \hat{x}]$ тоже превратится в $i\hat{y}$, i выносится, и \hat{L}_z коммутирует с \hat{y} . Такая же формула, как (8.44), подскажет, что коммутатор $[\hat{L}_z, \hat{y}] = -i\hat{x}$. $-i \cdot i = 1$, и мы обнаружим, что $[L_z, [\hat{L}_z, \hat{x}]] = \hat{x}$, так что третье

слагаемое в (8.41) просто добавится к первому. Следующий, тройной коммутатор даст $i\hat{y}$.

Так что мы обнаружим, что все чётные слагаемые приводят к оператору \hat{x} , при котором будет стоять числовой ряд, начинающийся с единицы, где дальше степень i будет каждый раз нарастать на 2 и меняться знак. Это ряд для косинуса. А при \hat{y} будут стоять пропущенные в первой скобке степени, здесь возникнет минус ряд для синуса:

$$\hat{x} \left(1 - \frac{\Omega^2}{2!} + \frac{\Omega^4}{4!} - \dots \right) + \hat{y} \left(\Omega + \frac{\Omega^3}{3!} - \frac{\Omega^5}{5!} + \dots \right) = \hat{x} \cos(\Omega) - \hat{y} \sin(\Omega) \quad (8.46)$$

То есть \hat{x}' выглядит в точности также, как будто мы организовали в обычной геометрии преобразование поворота вокруг оси z на угол Ω . А ось z как раз та, которую мы направили вдоль вектора $\vec{\Omega}$.

Аналогичными выкладками можно обнаружить, что для \hat{y}

$$e^{i\Omega\hat{L}_z}\hat{y}e^{-i\Omega\hat{L}_z} = \hat{x} \cos(\Omega) + \hat{y} \sin(\Omega) \quad (8.47)$$

А такая же комбинация для \hat{z} ввиду того, что \hat{L}_z с \hat{z} коммутирует, выдаст

$$e^{i\Omega\hat{L}_z}\hat{z}e^{-i\Omega\hat{L}_z} = \hat{z} \quad (8.48)$$

Итак, мы видим, что формулы преобразования всех трёх координат в точности соответствуют именно преобразованию поворота вокруг оси z на угол Ω . Вспоминая, в каких координатах считали, делаем вывод, что введённый нами в (8.37) унитарный оператор \hat{u} описывает преобразование поворота вокруг оси, задающейся единичным вектором, направленным вдоль вектора $\vec{\Omega}$,

$$\vec{n} = \frac{\vec{\Omega}}{\Omega} \quad (8.49)$$

на угол, равный модулю вектора $\vec{\Omega}$, то есть на Ω .

Отсюда возникает два важных вывода. Во-первых, для любой наблюдаемой, \hat{V}_i , где $i = 1, 2, 3, \dots$, удовлетворяющей коммутационным соотношениям

$$[\hat{L}_i, \hat{V}_j] = i\epsilon_{ikl}\hat{V}_k, \quad (8.50)$$

будет то же самое. То есть эта наблюдаемая при поворотах в нашем пространстве будет преобразовываться по формулам преобразования поворота.

А трёхмерная величина, компоненты которой при всех ортогональных преобразованиях трёхмерного пространства ведут себя также, как вектор координаты \vec{r} , и есть определение вектора. Вектор – это не просто трёхкомпонентная величина, а с заданным законом преобразования при ортогональных преобразованиях. То есть соотношение (8.50) – определение векторного оператора в трёхмерном евклидовом пространстве. Если про какую-то величину будет известно, что это векторный оператор, мы сразу будем знать, как он будет коммутировать с оператором орбитального момента.

И напротив, если известно, если величина коммутирует с ним как (8.50), мы знаем, что это вектор.

И второй вывод следует, если гамильтониан системы не меняется при произвольных поворотах. Например, мы имеем дело с трёхмерной частицей, движущейся в сферически симметричном поле. Тогда кинетическая энергия $\frac{\hat{p}^2}{2m}$, квадрат векторного оператора \hat{p} , это скалярный оператор. Кстати, мы теперь понимаем, что скаляр – это величина, которая коммутирует со всеми \hat{L}_i , потому что тогда из наших формул следует, что она не будет преобразовываться при произвольных поворотах. А это и есть определение скаляра. Тогда $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ инвариантен относительно поворота, и, если u зависит только от $|\vec{r}|$, он тоже инвариантен относительно любых поворотах вокруг оси, проходящей через начало координат.

Тогда весь гамильтониан инвариантен относительно поворотов, то есть

$$e^{i\Omega\hat{L}}\hat{H}e^{-i\Omega\hat{L}} = \hat{H} \tag{8.51}$$

В этом случае «удобная система уравнений для поиска собственных функций гамильтониана» будет составлена из уравнения (8.23), где, если уровни энергии нумеруются каким-то квантовым числом n , то и у ψ будет такой же индекс. И к нему можно будет добавить уравнения для операторов, составленных из компонент вектора \vec{L} . Мы помним, что они должны коммутировать ещё и между собой. К сожалению, L_x, L_y, L_z между собой не коммутируют, то есть мы не можем потребовать, чтобы наша функция была собственной функцией L_x, L_y, L_z . И общей полной системы собственных функций мы не построим, разве что отдельные, которые отвечают нулевому орбитальному моменту. Мы знаем из атомной и ядерной физики, что s -состояние существует, и такое собственное значение всегда есть.

И также мы знаем, что было придумано. Поскольку скалярный квадрат векторного оператора \hat{L} , оператор \hat{L}^2 , действительно является скаляром, то он коммутирует с \hat{L} , с любой компонентой \hat{L} . А поскольку все компоненты \hat{L} коммутируют с \hat{H} , то оператор \hat{L}^2 тоже с ним тоже коммутирует. В системе везде добавятся индексы λ_1 . Тогда возьмём ещё одну любую компоненту из компонент \hat{L} , которая коммутирует с \hat{L}^2 и \hat{H} , везде добавим индекс λ_2 , и получим для трёхмерной задачи нужную полную систему уравнений:

$$\begin{cases} \hat{H}\psi_{n\lambda_1\lambda_2} = E_n\psi_{n\lambda_1\lambda_2} \\ \hat{L}\psi_{n\lambda_1\lambda_2} = \lambda_1\psi_{n\lambda_1\lambda_2} \\ \hat{L}_z\psi_{n\lambda_1\lambda_2} = \lambda_2\psi_{n\lambda_1\lambda_2} \end{cases} \tag{8.52}$$

Это полная задача, она выдаёт полный ортонормированный базис собственных функций не только гамильтониана, но и \hat{L}^2 и \hat{L}_z . И, как мы знаем из атомной и ядерной физики, решать такую систему значительно проще, чем одно её первое уравнение. Ведь

в сферической системе координат последнее уравнение становится совсем простым, оно даст просто экспоненциальную зависимость функции ψ от азимутального угла φ . При этом второе уравнение зафиксирует зависимость от углов θ, φ в сферической системе координат. Тогда нижние два уравнения системы полностью определяют зависимость от θ, φ в сферических координатах. И первое уравнение будет тем, из которого нужно найти только зависимость от радиальной переменной \vec{r} .

То есть этот подход решает ту же задачу, что мы решили в простом примере. Как и в теоретической механике, при описании движения точечной частицы в центрально-симметричных полях мы сводим трёхмерную задачу к одномерной, для зависимости волновой функции только от радиальной переменной. И, как нас учили в ММФ, на базе этого уравнения производится разделение переменных. То есть у задачи (8.52) ещё и существует решение в виде произведения волновых функций $\psi(\vec{r}, \theta, \varphi)$. Именно так и решают в микромире все задачи о движении точечной частицы в сферически симметричном потенциале.

Следующая лекция будет как раз посвящена решению многомерных задач с использованием симметрий, и сферически симметричные задачи являются обязательным элементом обсуждения такого подхода. Мы многое про них уже знаем, поэтому вспомним ключевые моменты и математические операции.

Лекция 9. Сферическая симметрия

Движение частицы в сферически симметричном потенциале

Самый яркий пример симметрии – сферическая симметрия, когда частица массы m движется в сферически-симметричном потенциале, который является функцией только модуля радиус-вектора

$$u = u(|\vec{r}|) \quad (9.1)$$

Это трёхмерная задача, и когда мы будем строить гамильтониан как сумму кинетической и потенциальной энергий

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + u(|\vec{r}|), \quad (9.2)$$

заметим, что оператор импульса $-i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$ в квадрате даст оператор Лапласа Δ , и из (9.2) получится стандартная стационарная задача для линейного уравнения, связанного с оператором Лапласа

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + u(|\vec{r}|) \quad (9.3)$$

Эту задачу подробно изучали в курсе ММФ, решение кулоновской разбирали в атомной физике, но мы всё равно выстроим общую классификацию. В данном случае удобно работать в сферических координатах, где потенциальная энергия становится функцией радиальной переменной. А для оператора Лапласа удобно, например, выделить радиальную часть с r и часть, где содержится дифференцирование по угловым переменным ϑ, φ сферической системы координат:

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r^2} (r \dots) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta\varphi} \quad (9.4)$$

С этими частями будем работать отдельно. Как учили в ММФ, собственные функции оператора (9.2) можно строить методом разделения переменных. То есть в этом случае волновую функцию $\psi_E(\vec{r})$, являющуюся собственной функцией оператора Гамильтона, всегда можно записать как произведение радиальной части, зависящей только от r , на угловую, зависящую от ϑ и φ ,

$$\psi_E(\vec{r}) = R(r)Y(\vartheta\varphi) \quad (9.5)$$

То есть надо будет сначала решить задачу на собственные функции для угловой части оператора Лапласа, а уже потом переходить к радиальной.

С точки зрения физики, эта симметрия связана с инвариантностью гамильтониана относительно любых вращений. Значит, генератор вращения орбитального момента в этом случае является интегралом движения.

Но, как мы уже коротко обсуждали, действуя по предложенной схеме, когда добавляем к уравнению

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (9.6)$$

более простые уравнения, что ψ является собственной функцией таких величин, мы не можем туда добавить, например, $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$, потому что, хоть каждый из них и коммутирует с таким гамильтонианом, они не коммутируют между собой. И подход обычно состоит в том, что мы решаем задачу на собственные функции гамильтониана (9.6), требуя от ψ , чтобы она была собственной функцией оператора $\hat{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$:

$$\hat{L}^2\psi = \lambda\psi \quad (9.7)$$

и одной из проекций. Традиционно выбирается \hat{L}_z :

$$\hat{L}_z\psi = \mu\psi \quad (9.8)$$

Задачу из уравнений (9.6–9.8) тем более удобно решать в сферической системе координат. Например, оператор \hat{L}_z , который в декартовых координатах $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ и, соответственно, записывается через дифференцирование по двум переменным, в сферических будет просто оператором дифференцирования по φ :

$$\hat{L}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad (9.9)$$

Здесь \hat{L} определён уже с обезразмеривающим множителем $\frac{1}{\hbar}$, как обычно.

Поэтому последнее уравнение системы, (9.8), означает, что зависимость собственной функции от азимутального угла, как обычно называют φ , является экспоненциальной, получается $e^{i\mu\varphi}$. А поскольку угол φ определён как циклическая переменная, значение 2π отождествляется со значением 0, то волновая функция при сдвиге на 2π , чтобы перейти сама в себя, должна приобретать множитель, равный единице. Так что должно быть $e^{i2\pi\mu} = 1$. Значит, μ принимает целые значения, то есть $\mu = m \in Z$.

А из уравнения (9.7) с учётом вида оператора \hat{L}^2 , который пропорционален угловой части оператора Лапласа, так что его собственные функции оказываются собственными функциями этого оператора, мы получаем задачу, которую видели в ММФ, когда изучали работу с угловой частью оператора Лапласа, содержащей дифференцирование по ϑ и φ . Там исследовали собственные функции этой задачи и называли их стандартными сферическими гармониками Y_{lm} . Получается уравнение вида

$$\Delta_{\vartheta\varphi}\psi = -l(l+1)\psi, \quad (9.10)$$

то есть собственными значениями являются произведения $l(l+1)$, где $l = 0, 1, 2, \dots$

При этом полная система, из уравнений (9.9) и (9.10), выдаёт в качестве решения, того, что мы называем стандартными сферическими гармониками, произведение нормировочного множителя, содержащего $\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$ и множитель, зависящий от lm , и присоединённого полинома Лежандра:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = N \cdot P_l^{(|m|)}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (9.11)$$

$|m|$, потому что общая задача имеет такие решения, что если l пробегает правильный набор значений – целые неотрицательные числа, то $m = +l \dots -l$ с шагом через единицу.

Это вполне согласуется с тем, что знаем из атомной физики про классификацию одноэлектронных состояний в кулоновском поле. Она там получается такая же, то есть знания из ММФ и атомной физики стыкуются друг с другом. Но мы видим, что зависимость от ϑ, φ описывается стандартной сферической гармоникой для любого центрально-симметричного потенциала $u(r)$.

Тогда уравнение (9.6) превратится в выражение в стандартной форме

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar} [E - u(r)]\psi = 0 \quad (9.12)$$

И если мы подставим в него произведение представления радиальной части на угловую (9.5), то сразу, подчиняя требованиям (9.7) и (9.8), рассматриваем именно те стационарные волновые функции, у которых угловая часть описывается стандартной сферической гармоникой. Три функционально независимых попарно коммутирующих оператора $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ для трёхмерной системы – это полный набор наблюдаемых. У этих операторов есть общий полный ортонормированный базис, определённый с точностью до фазовых множителей: единственный остающийся произвол – определение начальных фаз базисных состояний.

Когда мы подставим представление (9.11) в уравнение (9.12), лапласиан $\Delta_{\vartheta\varphi}$, согласно (9.10), превратится просто в $-l(l+1)$, в первое слагаемое (9.3) тоже добавится множитель $\frac{\hbar^2}{2m}$. И в итоге уравнение (9.4) превратится в уравнение для радиальной части, то есть для функции $R_{El}(r)$. В него будет входить E , которое уже там есть, и через угловую часть лапласиана попадёт l . Квантовое число m в него не попадёт, поэтому радиальная часть будет определяться энергией стационарного состояния и орбитальным квантовым числом, как его называют в атомной физике. l_m также называют азимутальным квантовым числом.

То есть общее уравнение для радиальной части

$$\frac{d^2 R_{El}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{El}}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} [E - u(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{El} = 0 \quad (9.13)$$

Два первых слагаемых представляют радиальную часть оператора Лапласа, а последнее угловую.

Мы использовали сферическую симметрию, и трёхмерная задача свелась к одномерной. Будем решать её как задачу Штурма-Лиувилля. Мы должны найти из (9.13) собственные значения энергии E и отвечающие им собственные функции, ведь угловая часть, по сути, однозначно определилась из требования симметрии, когда мы подчинили волновую функцию требованию, что она собственная функция \hat{L}^2 и \hat{L}_z .

Часто скобку в (9.13) переписывают как

$$\frac{2m}{\hbar^2} [E - u_l(r)], \quad (9.14)$$

где $u_l(r)$ – эффективный потенциал.

Тогда он равен сумме настоящего потенциала, на который пока особых требований не накладывали, и слагаемого, которое обычно называют центробежным барьером:

$$u_l(r) = u(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (9.15)$$

Физический смысл последнего в том, что мы как будто добавляем потенциал центробежных сил, который в сферических координатах всегда потенциал отталкивания. Он больше нуля, потому что здесь потенциальная энергия положительна.

То есть в этом случае мы видим, что в состояниях с большим l центробежный барьер вытесняет из окрестности нашего силового центра, от точки $r = 0$, потому что там бесконечно положительный вклад. А при $l = 0$ получаем задачу о движении в самом потенциале $u(r)$. Правда, здесь вид уравнения (9.13) из-за первых двух слагаемых не совпадает, например, с привычным одномерным уравнением Шредингера. Но в ММФ это была одна из двух постановок. Есть два удобных преобразования конструкции $\frac{d^2 R_{El}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{El}}{dr}$ из производных, и одна из них как раз направлена на то, чтобы убрать слагаемое с первой производной. Это произойдёт, если мы вместо функции $R_{El}(r)$ рассмотрим функцию $\chi_{El}(r)$, где

$$R_{El}(r) \equiv \frac{1}{r} \chi_{El}(r) \quad (9.16)$$

Если мы ищем, например, уровни дискретного спектра, накладываем на волновую функцию ψ условие номерки. И для этого соответствующий интеграл по объёму не должен расходиться, в том числе и в точке $r = 0$. У нас нет ограничения, что радиальная часть $R_{El}(r)$ в нуле ноль, там не нужно требовать, чтобы интеграл хорошо себя вёл. А вот $rR_{El}(r)$ для существования уровней дискретного спектра уже должен быть в нуле нулём.

Если это так, тогда для функции $\chi_{El}(r)$ получается задача, где граничное условие

$$\chi_{El}(0) = 0 \quad (9.17)$$

и дифференциальная форма $\frac{d^2 R_{El}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{El}}{dr}$ в (9.13) превращается во вторую производную без изменения коэффициента $\left[\frac{2m}{\hbar^2} [E - u(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right]$.

Поэтому для χ_{El} получается одномерное стационарное уравнение Шредингера

$$\frac{d^2 \chi_{El}}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - u(r)] \chi_{El} = 0 \quad (9.18)$$

с дополнительным условием (9.17). На самом деле радиальная переменная пробегает в сферических координатах значения от 0 до $+\infty$, у неё нет официальных значений в отрицательной области, и нам нельзя, чтобы туда утекала вероятность. По сути, мы ставим в точке $r = 0$ непроницаемую стенку и требуем, чтобы там волновая функция на языке χ_{El} обязательно обращалась в ноль.

Теперь можно сказать, что мы изучили общую теорию одномерного движения, значит, всё знаем про общую теорию движения в сферически симметричном поле. Ведь мы попросту свели сферически симметричную задачу к одномерной, определённой на половине вещественной оси и с нулевым условием на границе. И мы можем её исследовать.

В этом случае мы обнаружим, что, если, например, действительно существует дискретный спектр, уровни энергии будут зависеть от l , просто потому что l входит в коэффициенты уравнения (9.18). И ещё у этих уровней должно появиться некое дополнительное квантовое число, которое их нумерует.

Пусть задаче (9.18), (9.17) отвечают некоторые уровни энергии, нумеруемые квантовым числом n_r . Традиционно считают, что оно пробегает значения 0, 1, 2, 3..., и часто называют его радиальным квантовым числом. Тогда мы обнаружим, что уровни энергии нумеруются двумя квантовыми числами n_r и l . Так как коэффициенты задачи зависят от l , то и E_{n_r} тоже:

$$E_{n_r, l} \equiv E_{n_r}(l) \quad (9.19)$$

У собственных функций при этом вместо энергии E_{n_r} появляется квантовое число n_r , и они зависят от lm . Тогда уровням энергии (9.19) отвечают собственные функции, являющиеся произведением радиальных частей на стандартные сферические гармоники:

$$\psi_{n_r, lm} = R_{n_r, l}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (9.20)$$

То есть в сферически симметричных задачах всегда есть вырождение – по квантовому числу m , от них энергия не зависит. И так как m пробегает значения от $-l$ до $+l$ с шагом через единицу, всего $2l + 1$ значение, кратность вырождения всех этих уровней энергии как минимум

$$S(E_{n_r, l}) = 2l + 1 \quad (9.21)$$

Как минимум, потому что ситуация, когда кратность вырождения именно такая, существует в случае, если все уровни E_{n_r} являются невырожденными для одномерной задачи (9.18, 9.17). А если выяснится, что некоторые уровни энергии с разными n_r могут между собой совпадать, она может ещё увеличиться. И такое дополнительное вырождение действительно существует в некоторых задачах.

Его можно сделать совсем случайным, если мы так подобрали параметры потенциала, что для нескольких разных l нашлись n_r , у которых соответствующие E_{n_r} совпали. Это будет частная ситуация, характерная для конкретной пары уровней. Но бывают примеры, когда такое вырождение работает автоматически и в него вовлекается

очень много уровней. В этом случае дело в том, что задача имеет более обширную группу симметрии, чем просто сферическая, инвариантность гамильтониана относительно любых вращений координатных осей, поворотов.

Наиболее известные примеры такого вырождения – случай кулоновской задачи и задачи про линейный гармонический осциллятор.

Особые случаи с вырождением

1) **Изотропный гармонический осциллятор**, если он трёхмерный. Речь идёт о потенциале

$$u = \frac{m\omega^2 r^2}{2} \quad (9.22)$$

С данной задачей легко разобраться и без общей теории, потому что потенциал (9.22) в декартовых координатах, как мы уже видели в задаче про эффект Мёссбауэра, переписывается как сумма трёх

$$\frac{m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)}{2} \quad (9.23)$$

И гамильтониан трёхмерного изотропного осциллятора просто разбивается в сумму трёх одномерных гамильтонианов. Здесь есть три независимых оператора, явно коммутирующих между собой, так как относятся к разным степеням свободы, \hat{x} и \hat{p}_x с \hat{y} и \hat{p}_y всегда коммутируют. Поэтому в данном случае можно сменить схему разделения переменных и искать волновую функцию в виде произведения волновых функций от x, y, z , каждую из них подчинив требованию, что она собственная функция своего гамильтониана линейного гармонического осциллятора. В этом случае волновые функции можно занумеровать соответствующими квантовыми числами возбуждений по x, y и z и расписать через присоединённые функции Эрмита с номерами n_x, n_y, n_z :

$$\psi_{n_x n_y n_z}(xyz) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \quad (9.24)$$

Тогда мы знаем и полный спектр. Уровень энергии, отвечающий этим трём собственным числам, будет просто суммой энергий каждого осциллятора, то есть

$$E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega \left(n_x + \frac{3}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_y + \frac{3}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_z + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \quad (9.25)$$

Этого достаточно, чтобы сделать общий анализ и увидеть кратность вырождения. n_x, n_y, n_z пробегают значения $0, 1, 2, 3, \dots$, поэтому сумма $n_x + n_y + n_z$ тоже даёт целое неотрицательное число. Можно отождествить

$$n \equiv n_x + n_y + n_z \quad (9.26)$$

и сказать, что уровни энергии нужно нумеровать одним квантовым числом n . Если задача такое допускает, его обычно называют главным. Получается

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right) \quad (9.27)$$

Это тот же эквидистантный спектр, что и у обычного осциллятора, только он начинается с $\frac{3}{2}\hbar\omega$ из-за того, что нужно просуммировать энергии нулевых колебаний всех трёх осцилляторов.

Тогда вопрос о кратности вырождения уровня (9.27) становится чисто комбинаторной задачей, это число способов разбить число n на сумму трёх неотрицательных чисел $n_x + n_y + n_z$. $n_x = 0, 1, \dots, n$, больше оно быть не может, иначе и сумма станет больше n . Тогда $n_y + n_z = n, n - 1, \dots, 0$. То есть получается $n + 1$ возможных значений числа n_x , и при этом возникает столько же возможных значений суммы $n_y + n_z$. А каждое число k можно разбить на сумму двух слагаемых от 0 до k , выбрав первое k способами от k до 0, второе при этом оказывается жёстко определено. Здесь получается $\frac{(n+2)}{2}$ вариантов, потому что мы суммируем для каждого значения.

Или, через число сочетаний, кратность вырождения уровня E_n

$$S(E_n) = \frac{(n+2)!}{n!2!} = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \quad (9.28)$$

Видно, что основной уровень $n = 0$ остаётся невырожденным. Так и должно быть, потому что для этого надо все три осциллятора посадить в единственный вариант – состояние с $n_x, n_y, n_z = 0$. А дальше число вариантов и кратность вырождения растут довольно быстро, квадратично с ростом n .

Заметим, что мы можем решить эту задачу для осциллятора в сферических координатах. Тогда получим волновую функцию структуры (9.20). Вместо n_r в этом случае можно использовать главное квантовое число n , поскольку они оказываются между собой связаны. Для радиальной части мы опять получим довольно сложную задачу, там всё будет сводиться к системе лагранжевских ортогональных полиномов, и всё равно придётся работать со сложными спецфункциями.

Как мы видели, например, из задачи с эффектом Мёссбауэра, изотропный осциллятор часто удобнее решать в декартовых координатах, разбивая на три одномерных осциллятора. Причём часто это ещё и удобней анализировать на уровне физики. Впрочем, иногда нужен вид функции, общий для гамильтониана осциллятора и операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z , и тогда надо действовать по стандартной схеме (9.20). Кратность вырождения и спектр от этого не меняются.

2) Второй особый случай – **кулоновская задача**. Вообще это потенциал вида $\frac{\alpha}{r}$, но обычно кулоновские потенциалы отталкивания (+) и притяжения (–) прямо разделяют:

$$u(r) = \pm \frac{\alpha}{r} \quad (9.29)$$

Для кулоновского потенциала отталкивания сразу из общих соображений понятно, что все собственные энергии неотрицательны, так как они сумма двух неотрицательно определённых операторов $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ и всюду положительной потенциальной

энергии. Тогда собственные значения $E > 0$, и движение всегда оказывается инфинитным. Так что даже из того, что получается из сведения к одномерной задаче, понятно, что спектр непрерывный. Поэтому для потенциала $u(r) = +\frac{\alpha}{r}$ просто непрерывный спектр в области $E > 0$, и там надо строить волновые функции с определённым поведением на бесконечности.

Для нас это будет важно при обсуждении задач рассеяния, когда поток частиц налетает на препятствие, например, в виде кулоновской мишени, как в опыте Резерфорда, и от него всё разлетается. В таком случае, как правило, нужно смотреть, что измеряет экспериментатор, дифференциальное и интегральное сечение процессов рассеяния. Для кулоновской задачи полное сечение будет бесконечным, так как даже очень далеко летящие частицы чувствуют кулоновское поле, оно слишком медленно убывает на бесконечности для состояний непрерывного спектра. Но дифференциальное можно посчитать по формуле Резерфорда.

Однако теория рассеяния – всё-таки существенно нестационарная задача, ею мы будем заниматься в следующем семестре и всё равно постараемся свести к стационарной. Поэтому сейчас будем изучать в основном случай притяжения с потенциалом $u(r) = -\frac{\alpha}{r}$, когда в области $E < 0$ может возникнуть дискретный спектр.

В этом случае на шкале энергий в области $E > 0$ тоже возникает непрерывный спектр (рис. 9.1), и здесь его нужно изучать именно на языке потоков вероятности, отвечающих каждому стационарному решению, потому что экспериментатор мерит потоки частиц, а теоретик в квантовой задаче, соответственно, будет считать потоки вероятности. И то же самое дифференциальное сечение он должен определять как поток вероятности, пришедший в заданный элемент телесного угла $d\Omega$, отнесённый к плотности потока вероятности в падающей волне.

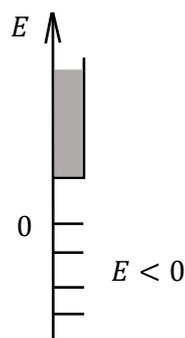


Рис. 9.1. Дискретный и непрерывный спектры в областях энергии в случае потенциала притяжения

А в области $E < 0$ могут быть уровни дискретного спектра, и задачу про него мы исследуем отдельно. Решение для области дискретного спектра в кулоновской задаче хорошо известно. В этом случае тоже происходит дополнительное вырождение в том смысле, что уровни энергии нумеруются одним квантовым числом n , которое

записывается через радиальное число n_r , вводящееся при решении эффективной одномерной задачи, и орбитальное число l , как

$$n = n_r + l + 1 \quad (9.30)$$

n_r пробегает значения от 0 до ∞ , поэтому главное квантовое число n в кулоновской задаче пробегает натуральные значения 1, 2, 3... И зависимость от n в спектре это $-\frac{1}{n^2}$:

$$E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2} \quad (9.31)$$

Соответствующие радиальные части тоже записываются через разные системы ортогональных полиномов. Но теоретики чаще всего выражают соответствующие собственные функции через гипергеометрическую функцию Гаусса, потому что аппарат гипергеометрических функций в математике очень подробно разработан, там исследовано много асимптотик, для интегралов с такими функциями известно много формул. Так что для практических вычислений при произвольном n обычно используется выражение через гипергеометрическую функцию Гаусса.

А для маленьких n выражения для радиальных частей волновой функции очень простые. Мы много раз видели их для $n = 1$ и 2, то есть для основного и наинизшего возбуждённого состояний атома водорода. $n = 1$ – это 1s-состояние. Мы разбиваем волновые функции ψ_{nlm} на так называемые оболочки. В атомной и ядерной физике оболочкой для состояний в сферически симметричной задаче называют набор состояний с определёнными n и l и обычно записывают её как

$$nl^k \quad (9.32)$$

n – главное квантовое число, l – это s, p, d, f, \dots , которые отвечают $l = 0, 1, 2, 3, \dots$, а k – это число заполнения, число электронов, сидящих в оболочке. Мы пока рассматриваем одночастичные задачи, в них всегда $k = 1$, поэтому достаточно указать значения n и l .

1s-состояние – это состояние, описываемое волновой функцией

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}, \quad (9.33)$$

где $a \equiv \frac{\hbar^2}{me^2}$ – боровский радиус. В данном случае e^2 – это просто α , кулоновская задача с потенциалом $-\frac{e^2}{r}$ – это задача о притяжении электрона с зарядом $-e$ к ядру с зарядом $+e$, задача об электроне в атоме водорода.

Функция (9.33) имеет очень простой вид, для более высоких функций с большими n меняется экспонента и появляется полином. При этом данный полином всегда отличен от нуля в нуле для $l = 0$, и функция всегда пропорциональна r^l в асимптотике малых r . Например, при $l = 1$ она имеет вблизи нуля линейную асимптотику как r^1 . И только в состояниях с $l = 0$ ненулевая плотность вероятности обнаружить электрон вблизи ядра.

Ядро – очень маленькое образование по сравнению с атомом, 1 Ферми меньше боровского радиуса почти на пять порядков. Поэтому вероятность обнаружить электрон внутри ядра очень маленькая, но ненулевая, фактически равная $\frac{V_{\text{ядра}}}{|\psi_{100}(0)|^2}$ для s -состояний.

В (9.33) $r_{\text{ядра}}$ по сравнению с a очень маленькая величина, экспонента станет единицей, как что $|\psi_{100}(0)|^2$ будет фактически $\frac{1}{a^3}$. А $V_{\text{ядра}}$ будет пропорционален r^3 , где r – радиус ядра. Соответственно, $\frac{V_{\text{ядра}}}{|\psi_{100}(0)|^2} \approx (10^5)^{-3} = 10^{-15}$. А для p -состояния, где в формуле (9.33) появится ещё множитель $\frac{1}{r}$, после возведения в квадрат и интегрирования добавится ещё $\left(\frac{r}{a}\right)$, то есть будет 10^{-25} . И дальше всё меньше и меньше.

Но тем не менее, процессы, когда происходит какое-то взаимодействие электронов с ядром, бывают в реальных атомах. Правда, из атомной и ядерной физики мы знаем, что чаще такое происходит при K -захватах и прочих процессах, и это взаимодействие будет значительно более заметно для тяжёлых атомов с большим зарядом ядра и многоэлектронной оболочки Z .

Многоэлектронные оболочки мы вспомним в следующем семестре, когда будем решать многочастичные квантовые задачи. А в рамках одночастичных стационарных задач просто нужна технология работы. Мы обычно считаем, что про кулоновскую задачу в рамках одночастичных стационарных задач всё узнали в рамках атомной и ядерной физики. Какие-то примеры среди обязательных задач на эту тему появляются, но в целом надо просто технически уметь работать с соответствующими волновыми функциями. Практически любая задача, если мы работаем в координатном представлении, есть задача о вычислении интегралов с радиальными частями, и это чистая математика.

Более эффектная в этом смысле задача – вывод формул Крамера, которые связывают средние значения n -й степени радиальной переменной для кулоновских состояний со средними значениями $n - 1$ и $n - 2$ степеней. Можно получить алгебраическое соотношение, опираясь на свойства радиальных частей. И после этого, как обычно делали в атомной физике, можно легко посчитать среднее от r^0 и от $\frac{1}{r}$ по той причине, что среднее от $\frac{1}{r}$ пропорционально среднему от потенциальной энергии, а для неё срабатывает теорема Виряла. В кулоновском поле среднее от потенциальной энергии – это удвоенная полная энергия, и для всех стационарных состояний мы посчитаем её через значение E_n , которое известно. И тогда, воспользовавшись этой формулой, можно посчитать среднее значение от r^k для любого k .

Вернёмся к общей постановке задачи для произвольного потенциала $u_l(r)$. Если нам дали сферически симметричную задачу с потенциалом притяжения, чтобы там мог существовать дискретный спектр, и просят найти уровни этого спектра, то нужно сразу выписывать уравнение для радиальной части

$$\frac{d^2 R_{El}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{El}}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - u_l(r)] R_{El} = 0 \quad (9.34)$$

и анализировать его.

Мы увидели, что её можно, например, свести к одномерной задаче с помощью (9.16). В этом случае мы получаем уравнение без первой производной $\frac{2}{r} \frac{dR_{El}}{dr}$, которое полностью копирует уравнение для одномерной задачи. При ненулевом l в последнем слагаемом (9.34) стоит центробежный барьер, который в комбинации с почти любым $u(r)$ сильно затрудняет хорошее интегрирование уравнения (9.34). Там выходят сплошные спецфункции, и даже для относительно простых потенциалов они иногда получаются со сложным анализом, в котором нужно полностью использовать аппарат гипергеометрических функций, чтобы понять, что происходит в задаче. Поэтому мы на семинаре возьмём $l = 0$, то есть s -состояние, и задачу, которую решили бы в одномерном случае, пользуясь элементарными функциями.

Другой подход часто удобнее для задач, в которых потенциал либо очень быстро убывает на бесконечности, либо просто равен нулю, то есть это яма конечного радиуса, если только это не яма с совсем простым потенциалом, как будет на семинаре.

Пусть яма имеет конкретный радиус a , за которым потенциал равняется нулю (рис. 9.2). Тогда во внешней области $r > a$ от потенциала $u_l(r)$ в (9.34) остаётся только центробежный барьер, то есть на его месте стоит $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$, и можно сразу сократить $\frac{2m}{\hbar^2}$.

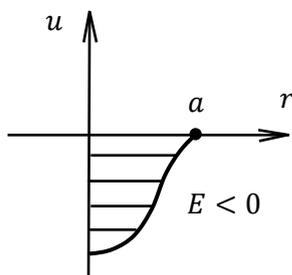


Рис. 9.2. Потенциал в виде ямы и спектр в ней

Для уровней дискретного спектра энергии отрицательны. Поэтому можно обозначить

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = -\kappa^2, \quad (9.35)$$

где κ – вещественное положительное число. И тогда можно записать

$$R_{El} = \frac{1}{\sqrt{r}} u_{El}(x), \quad (9.36)$$

где u_{El} – некая функция, а $x = \kappa r$.

Данная подстановка приводит эту задачу к хорошо знакомой. Во-первых, выделение $\frac{1}{\sqrt{r}}$, если вспомнить ММФ, не убирает в (9.34) первую производную, но в уравнении для u получается слагаемое $\frac{1}{x} \frac{du}{dx}$. Чтобы переделать производные, мы разделили (9.34) на κ^2 . Значит, убрали $-\kappa^2$, возникший там около E . А в $u_l(r)$ при такой подстановке немного преобразуется коэффициентная функция, и вместо $l(l+1)$ возникает $(l + \frac{1}{2})^2$. А $\frac{1}{r^2}$ при делении на κ^2 превращается в $\frac{1}{x^2}$. В итоге, для u получается уравнение

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du}{dx} - \left[1 + \frac{(l + \frac{1}{2})^2}{x^2} \right] u = 0 \quad (9.37)$$

Из ММФ известно, что это уравнение для цилиндрических функций. Но не уравнение Бесселя, которое получается для функций непрерывного спектра, когда перед скобкой в (9.37) плюс, а в ней минус. А модифицированное уравнение Бесселя или уравнение Бесселя для функции мнимого аргумента. Фундаментальную систему его решений обычно пишут как функции Инфельда и Макдональда. Стремятся к нулю на бесконечности функции Макдональда K , $l + \frac{1}{2}$ их индексы. То есть в этом случае локальные решения описываются функциями Макдональда полуцелого порядка. Они даже выражаются для каждого l через элементарные функции, но довольно громоздким образом, как и всегда для цилиндрических функций. То есть тут мы тоже сразу погружаемся в теорию цилиндрических функций, которые подробно изучались в ММФ и про которые много информации в таблицах и программных пакетах – как вычислять интегралы с ними, как по ним раскладывать другие функции. Даже существует аналог ряда Фурье Бесселя для осциллирующих функций в области непрерывного спектра, где их можно использовать в качестве некоего ортогонального базиса для разложения. А также выражения для производных, рекуррентные формулы и т. д.

То есть для решения уравнения (9.37) создано много математики. Поэтому, если мы решаем задачу про яму конечного радиуса, переходим во внешней задаче к переменной u . После этого надо записать аналогичное преобразование во внутренней задаче, но там всё уже будет не так просто, потому что в скобку в (9.37) будет добавляться то, что получится из самого потенциала $u_l(r)$. И вопрос, решим мы там или нет, будет зависеть от вида $u_l(r)$ и того, сможем ли мы разобраться с внутренним условием.

А дальше мы на границе сошьём внутреннее решение с соответствующей функцией Макдональда полуцелого порядка для заданного l . И у нас тоже выстроится полная система собственных функций.

В общем, в таких задачах мы переходим либо к функции $\chi_{El}(r)$, либо к $u_{El}(x)$, вспоминаем из ММФ, что за уравнение получилось с учётом явного вида потенциала, и

дальше занимаемся чистой математикой. Рассказывать что-то из теории особого смысла нет, потому что здесь основное – техника решения конкретных задач.

Рассмотрим, каким вообще может быть потенциал $u_l(r)$, чтобы мы искали решения подобных задач, то есть чтобы дискретный спектр существовал. Во-первых, для этого необходимо, чтобы это был потенциал притяжения. В потенциалах отталкивания всегда будет непрерывный спектр. Более того, если мы, как обычно для потенциала притяжения, нормировали потенциальную энергию условием, что на бесконечности она принимается за ноль, уровни дискретного спектра всегда должны лежать в области $E < 0$.

Ещё есть ограничение, связанное с тем, что потенциал $u_l(r)$ должен прилично себя вести в окрестности нуля. Ведь если он там начнёт очень быстро убывать, может возникнуть ситуация, когда мы не сможем, например, в эффективной одномерной задаче, найти функции, которые подчиняются условию равенства нулю в нуле. И не будем знать, что с этим делать.

Задача. Падение частицы на центр

Для понимания ситуации рассмотрим потенциал притяжения

$$u(r) = -\frac{\beta}{r^2} \quad (9.38)$$

Соответствующая эффективная одномерная задача

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{\gamma - l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0, \quad (9.39)$$

где $\frac{-l(l+1)}{r^2}$ – центробежное слагаемое, а

$$\gamma \equiv \frac{2m\beta}{\hbar^2} \quad (9.40)$$

Если существует решение уравнения (9.39) с конечным E , можно посмотреть его асимптотику в окрестности нуля, ведь если в числителе $\frac{\gamma - l(l+1)}{r^2}$ стоит не ноль, при достаточно маленьких r это слагаемое всегда забьёт константу $\frac{2mE}{\hbar^2}$. Поэтому всегда существуют маленькие расстояния, на которых ей можно пренебречь. Тогда получается очень простая задача для χ . Так как во втором слагаемом (9.39) делим на r^2 , а в первом стоит вторая производная по r , у данного уравнения существуют степенные решения.

Если подставим в это решение

$$\chi = C \cdot r^\nu, \quad (9.41)$$

где C – какая-то константа, то вторая производная из первого слагаемого в (9.39) выдаст $\nu(\nu - 1)$, а из второго при том же выражении (9.41) появится $\gamma - l(l+1)$:

$$\nu^2 - \nu + \gamma - l(l+1) = 0 \quad (9.42)$$

Корни этого квадратного уравнения, если учесть, что $\frac{1}{4} - (-l(l+1)) = \left(l + \frac{1}{2}\right)^2$,

$$v_{1,2} = +\frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \gamma} \quad (9.43)$$

Для каждого l существует такое значение γ , при котором под корнем возникает отрицательное значение. Любое выражение вида $x^{i\alpha}$ можно записать как

$$x^{i\alpha} = e^{i\alpha \ln(x)} \quad (9.44)$$

Видно, что здесь появляются тригонометрические функции от логарифма. Это плохо, потому что в результате мы получаем ненормируемое решение. Самое жёсткое ограничение в (9.43) возникает при $l = 0$, а такое состояние должно быть, если существует связанное состояние. Если

$$\gamma > \frac{1}{4}, \quad (9.45)$$

то есть, согласно (9.40)

$$\beta > \frac{\hbar^2}{8m^2}, \quad (9.46)$$

получается отсутствие нормируемых решений, то есть дискретного спектра тоже вроде быть не должно.

Такая же ситуация возникнет, если потенциал (9.38) будет расти ещё быстрее при $r \rightarrow 0$. r^{-2} – пограничный случай, где существование решений зависит от значения константы β . А при большем отрицательном показателе степени не будет спасать уже и она.

С точки зрения физики эту ситуацию называют падением частицы на центр. Мы не можем подчинить решение условию, что $\chi(0) = 0$, а это и означает, что вероятность утекает под $r = 0$. Одномерная эффективная задача будет устроена так, что окажется невозможным отгородить область отрицательных значений r . Мы будем говорить, что стационарных состояний частицы вблизи такого центра не существует, они все будут падать на центр и там исчезать. Вероятность локализованной частицы при ненулевых r будет убывать с течением времени, стационарного решения тоже не будет существовать.

То есть список потенциалов, способных дать дискретный спектр, не такой уж широкий. Они должны быть потенциалами притяжения и расти не быстрее, чем $\frac{1}{r^2}$ при $|r| \rightarrow 0$.

Для $\gamma < 0$, то есть потенциалов отталкивания, таких проблем не будем. Там мы получаем степенные асимптотики и, если из (9.43) возникает одна отрицательная степень, которую даёт решение с минусом перед корнем, всегда можем занулить при ней константу, чтобы обеспечить нормальное поведение функции в нуле.

Мы увидели, что не любая подобная задача имеет такое решение, но все, которые имеют, исследуются одним из описанных методов.

Этот пример завершает вводную часть курса квантовой теории. Мы до сих пор старались, по крайней мере в нормативных примерах, решать задачи, имеющие классический аналог. Поэтому мы в основном исследовали ситуации, где есть точечная частица, движущаяся в поле каких-то сил. Но из физики микромира нам известно, что существуют и наблюдаемые, не имеющие классического аналога, и мы дальше будем изучать квантовые системы с ними.

Самый яркий и необходимый пример – это спин. У частиц в микромире есть собственный момент количества движения.

Сначала рассмотрим историю. Для физиков-экспериментаторов всё началось с исследования эффекта расщепления спектральных линий атомов в магнитном поле. Его заметили ещё в те времена, когда никакой квантовой теории не было. Правда, поначалу говорили об уширении спектральных линий, но, когда спектроскопическая техника улучшилась, увидели, что это действительно расщепление.

Данную задачу можно решить в классической теории. Самая популярная из них – изотропный осциллятор с одной частотой ω , помещённый в магнитное поле. Она точно решается в ньютоновской механике, и нормальными частотами будут ω и $\omega \pm \Omega$, где Ω – ларморовская частота. То есть классическая теория говорит, что всякая спектральная линия должна расщепиться на три. Такое расщепление называли нормальным, и по фамилии экспериментатора, его изучавшего, его называют нормальным эффектом Зеемана.

Также была найдена ситуация, когда линия расщеплялась на большее число уровней, то есть появлялось меньшее или большее число частот, и расстояния между уровнями не соответствовали ларморовской частоте. Иногда они связывались с ней очень причудливо, например, можно привести пример, где диапазон между подуровнями $\frac{5}{7}\Omega$.

Объяснить это долго никто не мог, в том числе Паули, который много над этим думал. Сейчас почти всё в нерелятивистской теории частиц со спином носит имя Паули. Правда, само слово «спин» придумали до него Уленбек и Гаудсмит. Они подходили к данной задаче в квазиклассическом режиме, развивая планетарную модель атома и предположив, что электрон ещё крутится вокруг своей оси, из-за чего у него появляется дополнительный магнитный момент, который и даёт аномальный эффект Зеемана. Уленбек и Гаудсмит просто феноменологически подобрали, каким должен быть этот момент, чтобы получилась наблюдаемая картина. Всё хорошо сошлось, но они при этом должны были считать, что проекция орбитального момента вращающегося электрона на магнитное поле принимает в единицах \hbar два значения: $\pm \frac{1}{2}$.

Из задачи, которую мы разбирали сегодня, видно, что это невозможно. Квантовое число l пробегает значения 0, 1, 2..., а проекция m – значения от $-l$ до $+l$. Поэтому, если

l целые, то и m тоже. Уленбеку и Гаудсмицу пришлось это искусственно постулировать. А потом, чтобы получить правильные формулы, ввести в выкладки ещё одну двойку, предположив, что гиромангнитное отношение для этого дополнительного магнитного момента, то есть отношение магнитного момента к механическому, ровно в два раза больше, чем рассчитываемое из классической теории.

Паули сразу сказал, что так быть не может. Если электрон – шарик, вращающийся вокруг своей оси, его момент количества движения – орбитальный момент, и его проекция на выделенную ось должна принимать целые значения, кратные \hbar , а не $\frac{\hbar}{2}$. Именно Паули принадлежит мысль сказать, что спин не связан ни с каким движением электрона в пространстве. То есть оператор соответствующей наблюдаемой должен коммутировать и с оператором координаты, и с оператором импульса, потому что не должен зависеть от перемещения электрона в пространстве. Данный момент есть у электрона просто в силу существования электрона.

Математики сразу докажут, что, если мы в пространстве координатных волновых функций $\{\psi(\vec{r})\}$ попробуем определить оператор, который коммутирует с операторами координат и импульсов одновременно, он должен быть кратен единичному. А для такого оператора собственными функциями являются вообще любые функции, и состояний с определённым значением проекции спина быть не должно. То есть это странная наблюдаемая, которая имеет одинаковое значение во всех состояниях, что не отвечает наблюдаемой физике. Поэтому Паули пришёл к выводу, что для описания такой наблюдаемой надо расширить пространство состояний.

Пространство Паули

Рассмотрим пространство Паули, спинорных волновых функций. То есть вместо пространства координатных волновых функций $\{\psi(\vec{r})\}$ будем рассматривать пространство волновых функций как пространство двухкомпонентных столбиков, где каждая компонента – функция от \vec{r} :

$$\begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (9.47)$$

При этом все старые наблюдаемые, которые являлись функциями координат и импульсов, действуют на столбик (9.47), просто действуя на каждую компоненту. Пусть \hat{F} – функция от координат, импульсов и времени:

$$\hat{F} = F(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}, t) \quad (9.48)$$

Чтобы отличать однокомпонентную функцию от многокомпонентной спинорной по написанию, будем обозначать спинор большой буквой Ψ . Тогда по определению действие оператора \hat{F} на наш спинор

$$\hat{F}\Psi \equiv \begin{pmatrix} \hat{F}\psi_1 \\ \hat{F}\psi_2 \end{pmatrix} \quad (9.49)$$

К этим операторам надо добавить и те, которые действуют на спинор нетривиальным образом, по-разному на разные компоненты. Мы должны их строить как матрицы 2×2 :

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} \hat{G}_{11} & \hat{G}_{12} \\ \hat{G}_{21} & \hat{G}_{22} \end{pmatrix} \quad (9.50)$$

Они будут действовать на столбик (9.47) как умножение по правилу матричного перемножения, в результате чего мы будем получать столбик. На каждую компоненту будет действовать свой набор операторов из компонент матрицы (9.50). То есть эта матрица полностью описывает действие произвольного оператора, определенного в пространстве спинорных волновых функций (9.47).

Именно таким должен быть оператор спина. Он должен быть векторным оператором, то есть иметь три компоненты:

$$\hat{\mathbf{s}} = (s_x, s_y, s_z) \quad (9.51)$$

От него надо потребовать, чтобы он был оператором момента количества движения. Но он не определён в обычном координатном пространстве. С алгебраической точки зрения это означает, что каждая компонента этого оператора коммутирует с любой компонентой оператора координаты и оператора импульса:

$$[\hat{s}_i, \hat{x}_j] = [\hat{s}_i, \hat{p}] = 0 \quad (9.52)$$

Это приведёт к тому, что каждый из операторов в матрице (9.50) в соответствующем представлении, то есть $\hat{s}_{11}, \hat{s}_{12}, \hat{s}_{21}, \hat{s}_{22}$, окажется постоянным. С точки зрения зависимости от \vec{r} в координатном или от \vec{p} в импульсном представлении он должен действовать как оператор, пропорциональный единичному. То есть это просто матрица 2×2 с какими-то постоянными матричными элементами.

Кроме того, чтобы $\hat{\mathbf{s}}$ был моментом количества движения, Паули предложил подчинить его коммутационным соотношениям оператора момента. То есть в качестве признака момента считать, что операторы спина должны удовлетворять коммутационным соотношениям

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = j\epsilon_{ijk} \hat{s}_k \quad (9.53)$$

$$[\hat{s}_i, \hat{s}^2] = 0 \quad (9.54)$$

Им отвечает орбитальный момент, мы на самом деле получили эти выражения как коммутационные соотношения для генераторов вращений. То есть мы заявляем, что спин тоже некий генератор преобразований вращений, только не в обычном координатном пространстве, а в своём особенном. Мы вводим особенное спиновое пространство и задаём оператор спина как генератор вращений в нём.

И для данного случая, когда волновая функция – двухкомпонентный спинор (9.47), на языке теорий групп мы реализуем некое представление группы вращений. Но для обычной группы вращений трёхмерного координатного пространства представление для

нас сейчас – это по сути пространство состояний с определённым значением l . При $l = 0$ есть всего одна возможная проекция, равная нулю, при $l = 1$ уже три, m пробегает значения $0, +1, -1$. Соответственно, подпространство всех состояний с орбитальным моментом $l = 0$ одномерно, а с $l = 1$ трёхмерно, с $l = 2$ пятимерно и т. д.

Здесь нет пространства с размерностью 2, а Паули предложил именно такое. То есть оно не может быть реализовано полностью так же, как орбитальный момент. Поэтому сейчас математики различают векторные представления группы вращений и спинорные, где чётные размерности соответствующих пространств. И пространство Паули было простейшей спинорной реализацией.

По сути, в физику был введён совсем новый класс представлений группы вращений. В следующем семестре, когда мы будем изучать попытки квантования релятивистских теорий, узнаем, что представления такого типа естественным образом реализуются в теориях, в которых пространство-время, с которых мы работаем, не трёхмерное евклидово пространство и одномерное время, а четырёхмерное пространство-время Минковского. Там такая классификация представлений группы вращений возникает естественным образом.

Лекция 10. Спин

Будем по умолчанию считать, что феноменологию в духе рассуждений Уленбека-Гаудсмита мы знаем из атомной физики, и сразу перейдём к формальному построению. В прошлый раз мы решили, что будем строить оператор спина как оператор, который коммутирует со всеми операторами координаты и импульса нашей системы частиц со спином, то есть не должен зависеть от движения частиц в пространстве:

$$[\hat{s}_i, \hat{x}_j] = [\hat{s}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (10.1)$$

А сами компоненты оператора спина должны подчиняться стандартным коммутационным соотношениям операторов момента

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = j\epsilon_{ijk}\hat{s}_k \quad (10.2)$$

$$[\hat{s}_i, \hat{s}^2] = 0 \quad (10.3)$$

Матрицы Паули

Мы хотим реализовать эти операторы в пространстве двухкомпонентных спинорных волновых функций Паули. То есть гильбертово пространство чистых состояний H будет пространством двухкомпонентных функций $\{\Psi\}$, которые мы будем записывать в виде столбика с матричными правилами перемножения

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (10.4)$$

Соответственно, эрмитово сопряжённый спинор – это комплексно-сопряжённый и транспонированный спинор в виде строки.

Рассмотрим, как в таком пространстве реализовывать наши операторы. Во-первых, мы с самого начала должны понимать, что любая их конструкция, любое явное их выражение будет неоднозначным.

Пусть есть трёхкомпонентный оператор \hat{s} , и мы от него переходим к \hat{s}' , получающемуся из \hat{s} унитарным преобразованием, то есть записывающемуся как

$$\hat{s}' = \hat{u}\hat{s}\hat{u}^\dagger \quad (10.5)$$

с любой унитарной матрицей \hat{u} 2×2 . Операторы в пространстве волновых функций (10.4) становятся операторами 2×2 . Для \hat{s}' все требования (10.1–10.3) тоже будут выполнены, ведь они не портятся при таком унитарном преобразовании. Так что мы в любом случае определяем операторы спина в таком пространстве с точностью до унитарного преобразования.

Также мы должны понимать, что, поскольку операторы спина между собой попарно не коммутируют (10.2), нельзя построить полный ортонормированный базис из состояний, являющихся собственными векторами всех трёх операторов. Поэтому, какой бы полный ортонормированный базис мы не выбрали, максимум сможем добиться, чтобы один из данных операторов был в нём диагональным, представлялся диагональной

матрицей 2×2 . Если бы мы предположили, что существует базис, в котором диагональны два оператора, (10.2) бы тут же нарушилось, ведь два диагональных оператора всегда коммутируют между собой.

Мы можем сами выбрать оператор, который будет диагональным в данном базисе. Выберем базис, в котором диагонален \hat{S}_z . Фактически мы договариваемся о том, что в полный набор наблюдаемых, характеризующих частицу со спином, будем включать оператор квадрата спина этой частицы \hat{S}^2 и оператор проекции спина на ось z \hat{S}_z . То есть, если в задаче есть выделенное направление, станем считать его направлением оси z .

В этом случае матрица оператора s_z в базисе из своих собственных векторов будет диагональна, и на диагонали будут стоять собственные значения. Из качественной феноменологической картинке понятно, что нам удобно построить описание оператора спина, в котором проекции спина на выделенное направление, если их две возможных, так как у нас матрица 2×2 , и возможных собственных значений два, будут принимать значения

$$s_z = \pm \frac{1}{2} \quad (10.6)$$

Мы всегда измеряем в квантовой теории моменты количества движения в единицах \hbar .

То есть оператор \hat{S}_z – диагональная матрица,

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} +\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (10.7)$$

До этого мы отталкивались от физических соображений о ситуации, а дальше они не нужны, потому что после определения оператора \hat{S}_z операторы \hat{S}_x и \hat{S}_y будут определяться через коммутационные соотношения (10.2) и (10.3). Мы будем получать достаточное количество уравнений, записав коммутационные соотношения этих матриц 2×2 с уже заданной матрицей \hat{S}_z . Это чисто арифметическая задача. С точностью до произведения унитарного преобразования (10.5), которое будет менять эти три оператора, например, когда \hat{S}_z не сильно меняется, а \hat{S}_x и \hat{S}_y переопределяются, решением уравнений будут в частности операторы

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (10.8)$$

$$\hat{S}_y = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{2} \\ +\frac{i}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (10.9)$$

\hat{S}_z, \hat{S}_x и \hat{S}_y – действительно три эрмитовых оператора, представленные матрицами 2×2 , коммутационные соотношения которых отвечают соотношениям (10.1–10.3). Более того, квадрат каждого из этих операторов кратен единичному и равен $\frac{1}{4}$, умноженной на единичный. Так что оператор

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4}\hat{I}_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\hat{I}_2, \quad (10.10)$$

\hat{I}_2 – единичная матрица 2×2 .

Если сопоставить (10.10) с уже известным собственным значением оператора орбитального момента, $l(l+1)$, здесь речь идёт о моменте, у которого квантовое число, аналогичное квантовому числу l для орбитального, равно $\frac{1}{2}$. То есть в данном случае мы работаем с пространством спинорных двухкомпонентных волновых функций (10.4), и это пространство состояний частиц со спином $\frac{1}{2}$.

То, что получилась именно $\frac{1}{2}$, в значительной степени привязано к сочетанию введённых требований. Мы взяли пространство (10.4) из двухкомпонентных столбиков и при этом захотели, чтобы выполнялись коммутационные соотношения (10.2) и (10.3). Фактически мы неявно задали физические свойства соответствующего оператора аналогичными свойствам оператора орбитального момента.

Но у орбитального момента с целыми l не бывает двумерных подпространств состояний с определённым l . При $l=0$ пространство одномерное, при $l=1$ уже трёхмерное. То есть мы расширили список пространств, которые отвечают состояниям с определённым значением некоторого момента.

Кроме того, орбитальный момент имеет коммутаторы с операторами координаты и импульса, отличные от (10.1), потому что как раз связан с движением в обычном координатном пространстве. И сам оператор орбитального момента определяется через операторы координаты и импульса, через эффекторное произведение, нормированное на \hbar .

А здесь мы постулировали, что у квантовых частиц может существовать момент количества движения, принимающий полуцелые значения, в частности $\frac{1}{2}$ как в данном случае, не связанный с движением частицы в пространстве. Если бы мы пытались его, как прежде, описывать как разновидность орбитального момента в модели Уленбека-Гаудсмита, как какое-то вращение, что электрон вроде шарика, который крутится вокруг своей оси, мы бы не получили полуцелые значения проекции при работе с соответствующим оператором. Поэтому мы постулировали существование такого момента, так как в реальном мире мы видим, что у микрочастиц есть собственный момент количества движения, не связанный с движением в пространстве, отличный от нуля даже в системе покоя частицы. И для его описания и построена данная схема, предложенная Паули.

Мы будем говорить, что (10.4) – двухкомпонентные спиноры Паули. Оператор спина, выделив множитель $\frac{1}{2}$, можно записать через матричный вектор $\hat{\sigma}$ как

$$\hat{s} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}, \quad (10.11)$$

где из выражений (10.7–10.9)

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.12)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (10.13)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (10.14)$$

Эти матрицы тоже называются матрицами Паули. Они все эрмитовы, но это естественно, так как мы их ввели как матрицы оператора наблюдаемой в нашем пространстве. Все они бесследовые, это можно доказать явно, опираясь на алгебраические соотношения (10.2) и (10.3). Мы можем записать любой из этих операторов, например, \hat{s}_x , как пропорциональный коммутатору и, используя это представление, увидеть, что след такой конструкции в данном случае должен равняться нулю.

Также вследствие введенной алгебры произведение любой пары матриц Паули даёт третью матрицу Паули, умноженную на $+i$ или $-i$, в зависимости от чётности перестановки, что заметно и по коммутационному соотношению (10.2). Например, $\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z$, а $\sigma_y \sigma_x = -i \sigma_z$. Поэтому коммутатор будет равен $2i$, умноженным на соответствующую матрицу, и когда мы введём нормировочные множители $\frac{1}{2}$, для оператора спина получатся правильные коммутационные соотношения. Мы сразу сможем таким образом описывать разные состояния.

Здесь можно ввести стандартным образом, по аналогии с повышающим и понижающим операторами для проекции орбитального момента, операторы

$$\hat{s}_{\pm} \equiv \hat{s}_x \pm i \hat{s}_y \quad (10.15)$$

Если записать оператор \hat{s}_{+} , подставив определения операторов \hat{s}_x (10.12) и \hat{s}_y (10.13) через выражение (10.11), получится

$$\hat{s}_{+} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.16)$$

Аналогично,

$$\hat{s}_{-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.17)$$

Если мы напишем задачу на собственные значения,

$$\hat{s}_z \Psi = m_s \Psi, \quad (10.18)$$

где Ψ – произвольная спинорная волновая функция, m_s – собственное значение, то просто из вида оператора \hat{s}_z , который сами так строили, можно догадаться, что собственные значения у него

$$m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (10.19)$$

И по виду матрицы (10.14) понять, что у Ψ , отвечающего значению $m_s = +\frac{1}{2}$, будет $\psi_2 = 0$:

$$\Psi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \psi \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10.20)$$

ψ будет функцией координаты и, возможно, времени, если мы изучаем эволюцию. Поэтому можно будет вынести из (10.20) функцию $\psi(\vec{r}, t)$ как числовой множитель из матричной конструкции спинора с постоянными компонентами $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, то есть тождественно переписать (10.20) как

$$\psi(\vec{r}, t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10.21)$$

То есть спинорная волновая функция разбивается в произведение координатной и спиновой части. Волновая функция $\psi(\vec{r}, t)$ обычная, как у бесспиновой частицы, определяющая вероятность реализации разных значений координаты в разные моменты времени, а спинор $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ описывает отдельно спиновое состояние, причем в данном случае мы говорим о состоянии со спином, направленным по оси z .

Мы не должны забывать, что оператор спина состоит из трёх компонент, которые друг с другом не коммутируют. Поэтому в утверждении, что спин куда-то направлен, вообще нет смысла. Чтобы определить направление вектора, нужно измерить три его компоненты. А у оператора спина три компоненты одновременно неизмеримы. Но мы договоримся, произнося, что спин направлен, например, по оси z , иметь в виду, что частица находится в состоянии, при котором измерение проекции спина на ось z с вероятностью 1 выдаст $+\frac{1}{2}$. Это и будет означать, что $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ – постоянный собственный спинор оператора \hat{s}_z с собственным значением $+\frac{1}{2}$.

Аналогично,

$$\Psi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi \end{pmatrix} = \psi(\vec{r}, t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.22)$$

Так как мы выбрали матрицу \hat{s}_z диагональной, базисные спиноры, которые логично выбрать в нашем пространстве как $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, являются собственными векторами для оператора \hat{s}_z .

Проектирование спина на произвольное направление

Обобщим эту ситуацию на произвольное направление. Определим оператор проекции спина на произвольное направление \vec{n} , задаваемое единичным вектором в трёхмерном пространстве, как соответствующее скалярное произведение:

$$\hat{s}_{\vec{n}} = (\vec{n} \cdot \hat{s}) = n_x \hat{s}_x + n_y \hat{s}_y + n_z \hat{s}_z, \quad (10.23)$$

n_x, n_y, n_z – декартовы компоненты \vec{n} .

(10.23) тоже матрица 2×2 , и, подставив в (10.23) выражения (10.11-10.13), мы получим

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix} \quad (10.24)$$

Проекция спина на любое направление тоже может принимать значения $\pm \frac{1}{2}$. Поставим для оператора $\hat{s}_{\vec{n}}$ спектральную задачу, то есть напомним, что

$$\hat{s}_{\vec{n}} \Psi = \hat{s}_{\vec{n}} \Psi, \quad (10.25)$$

В целом мы догадываемся, что получится, но для понимания ситуации сделаем всё явно. Перейдём от декартовых компонент вектора \vec{n} к его записи через сферические углы соответствующего направления ϑ, φ (рис. 10.1). Направление любого единичного вектора можно однозначно задать двумя его сферическими углами – полярным ϑ , который этот вектор составляет с осью z , и азимутальным φ , который его проекция на плоскость xy составляет с осью x .

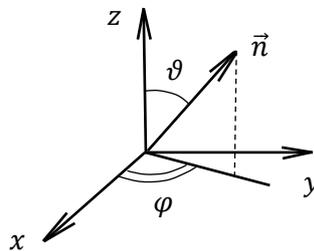


Рис. 10.1. Произвольный единичный вектор в сферических координатах

Компоненты n_x, n_y , с учётом того, что длина вектора единичная, можно записать $\sin \vartheta \cdot \cos \varphi$ и $\sin \vartheta \cdot \sin \varphi$. А n_z как $\cos \vartheta$. Поэтому (10.24), если переписать выражения на побочной диагонали через экспоненту, например, $\sin \vartheta \cdot \cos \varphi - i \sin \vartheta \cdot \sin \varphi$ как $\sin \vartheta \cdot e^{-i\varphi}$, превратится в

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta \cdot e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta \cdot e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (10.26)$$

Так матрица оператора проекции спина на произвольное направление \vec{n} записывается через сферические углы этого направления. Мы чаще всего используем оператор $\hat{s}_{\vec{n}}$ именно в такой форме.

Как только мы начинаем рассуждать про наблюдаемые, связанные только со спином, то есть не реагирующие на движение частицы в пространстве, все матрицы становятся числовыми. В (10.26) не может появиться координата, например, x, y, z , или импульс, то есть производные $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$ для координатных волновых функций. Но существуют общего вида наблюдаемые, которые представлены I -матрицей, в которой каждая матрица может содержать функцию от операторов \hat{x} и \hat{p}_x . И тогда в (10.26) будут присутствовать, например, в координатном представлении, координаты и операторы дифференцирования по ним. Но сейчас мы ушли от этого к более простой ситуации, так как рассматриваем наблюдаемые, связанные только со спином.

Если мы будем решать задачу (10.25), записав Ψ как (10.4), и умножим на него (10.26) по правилу строка на столбец, получим уравнения

$$\frac{1}{2}(\cos \vartheta \psi_1 + \sin \vartheta e^{-i\varphi} \psi_2) = m_{\vec{n}} \psi_1 \tag{10.27}$$

$$\frac{1}{2}(\sin \vartheta \psi_1 - \cos \vartheta e^{-i\varphi} \psi_2) = m_{\vec{n}} \psi_2 \tag{10.28}$$

Это правильная однородная система. Перенесём правые части влево, тогда её детерминант будет

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{2} \cos \vartheta - m & \frac{1}{2} \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{2} \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\frac{1}{2} \cos \vartheta - m \end{vmatrix} = 0 \tag{10.29}$$

Множитель $\frac{1}{2}$ из обоих столбцов можно вынести. Тогда характеристическое уравнение для матрицы данной системы

$$-\frac{1}{4} \cos^2 \vartheta + m^2 - \frac{1}{4} \sin^2 \vartheta = 0, \tag{10.30}$$

оно даёт

$$m^2 = \frac{1}{4} \tag{10.31}$$

Значит,

$$m_{\vec{n}} = \pm \frac{1}{2} \tag{10.32}$$

Так как при этом детерминант системы обратится в ноль, уравнения (10.27) и (10.28) перестанут быть независимыми, и в одном из них можно выразить одну компоненту через другую. Например, для состояния с проекцией на ось \vec{n} $m_{\vec{n}} = +\frac{1}{2}$, которое мы будем называть состоянием со спином, ориентированным вдоль оси, если подставить $m_{\vec{n}} = +\frac{1}{2}$ в (10.27), получится

$$\psi_2 = \frac{1 - \cos \vartheta}{\sin \vartheta e^{-i\varphi}} \psi_1 \tag{10.33}$$

Перейдя к половинному углу, то есть записав $1 - \cos \vartheta = 2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}$, а $\sin \vartheta = \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2}$ и сократив на $\sin \frac{\vartheta}{2}$, получим

$$\psi_2 = e^{i\varphi} \operatorname{tg} \left(\frac{\vartheta}{2} \right) \psi_1 \quad (10.34)$$

Поскольку мы хотим потом подчинить функции ψ_1 и ψ_2 условию нормировки, и видим, что теперь они пропорциональны друг другу просто через числовой множитель $e^{i\varphi} \operatorname{tg} \left(\frac{\vartheta}{2} \right)$, можно вынести функцию ψ_1 из спинора как общий множитель вместе с косинусом в знаменателе тангенса в (10.34), чтобы вынесся нормировочный множитель.

Тогда спинорная волновая функция Ψ в состоянии, где $m_n = +\frac{1}{2}$, то есть спин направлен по оси \vec{n}

$$\Psi_{m_n=+\frac{1}{2}} = N\psi(\vec{r}, t) \begin{pmatrix} \cos \left(\frac{\vartheta}{2} \right) \\ \sin \left(\frac{\vartheta}{2} \right) e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (10.35)$$

$\psi(\vec{r}, t)$ может зависеть и только от \vec{r} , если это не задача по изучению эволюции.

Мы решаем однородное уравнение, поэтому, если умножить его решение на любой постоянный множитель, оно от этого решением быть не перестанет. ψ_1 в (10.35) – любая константа, мы выбрали $\cos \frac{\vartheta}{2}$. Для данного направления \vec{n} ϑ – константа. Сумма квадратов модулей коэффициентов в (10.35) равна единице, по сути, мы отнормировали спинор на единицу. $\psi(\vec{r}, t)$ должен остаться, ведь, пока мы решаем однородное уравнение, не можем определить решение точно. В нём остаётся произвол в умножении на любую константу, который идёт из условия нормировки. Из (10.34) видно, что ψ_2 зависит от (\vec{r}, t) точно также, как и ψ_1 , потому что равняется константе, умноженной на ψ_1 .

Для определения N запишем условие нормировки для спинорной волновой функции, что вероятность найти частицу где-то в пространстве равна единице. Интеграл от квадрата модуля этой функции для любого момента времени

$$1 = \int d\vec{r} \psi^+(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \quad (10.36)$$

Когда мы подставим выражение (10.35) в (10.36), нормировка спинорной волновой конструкции $\begin{pmatrix} \cos \left(\frac{\vartheta}{2} \right) \\ \sin \left(\frac{\vartheta}{2} \right) e^{i\varphi} \end{pmatrix}$, не зависящей от (\vec{r}, t) , будет очень удобна. Ведь если мы возьмём сопряжённый спинор, строку, и перемножим на этот, получится $\cos^2 \frac{\vartheta}{2} + \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = 1$. Мы фактически сразу подобрали из соотношения (10.34) нормировку данного столбца таким образом, чтобы он отдельно был нормирован на единицу. Тогда

условие для определения общей нормировочной константы N (10.36) превратится в обычное условие нормировки для обычной координатной волновой функции,

$$1 = N^2 \int d\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (10.37)$$

Суть написанного в том, что, если зафиксировано направление спина на любую ось, не обязательно на z , мы обнаруживаем, что происходит факторизация спинорной волновой функции (10.35). Она разбивается в произведение обычной координатной волновой функции, которая нормируется обычным образом (10.36–10.37), если двухкомпонентный спинор, который теперь имеет постоянные компоненты, мы отдельно отнормировали на единицу. То есть мы можем не просто разбить её в произведение координатной и спиновой части, а договориться, что их независимо нормируем.

Дальше мы всегда будем для состояний, у которых спинорная волновая функция факторизуется, нормировать спинор на единицу. Тогда, если нас не интересует спин, то есть мы производим над нашей системой частиц измерения, не зависящие от её спинового состояния, то можем забыть про него и работать только с обычной координатной волновой функцией. Если же, напротив, не интересует положение частицы в пространстве, её движение, а только наблюдаемые, связанные со спином, можно работать только со спиновой частью волновой функции. То есть возникает возможность разделения исследования свойств нашего состояния – отдельно смотрим то, что происходит с распределением вероятностей реализации, например, координаты в пространстве, и отдельно, что с вероятностями иметь ту или иную проекцию спина на то или иное направление.

Пусть мы описываем просто измерение проекции спина на ось, например, направленную под 45° к оси z в плоскости zx . Мы поставили идеализированный прибор, который измеряет только проекцию спина частицы на это направление. Он выдаёт $+\frac{1}{2}$ и загоняет частицу в такое состояние, где $\varphi = 0, \vartheta = \frac{\pi}{4}$. При этом прибор не выдаёт информации о том, что происходит с распределением в пространстве. Результаты его измерений от этого никак не зависят, и он никак не воздействует на эту часть состояния частицы.

Таким образом, в некоторый момент времени динамика может быть разделена на спиновую и координатную. При измерении проекции спина мы загоняем частицу в состояние с факторизованными спинорными волновыми функциями, когда разделяются их спиновая и координатная части. А что будет дальше, зависит от эволюции. Чтобы эти две части волновой функции ещё и независимо эволюционировали, у гамильтониана должны быть определённые свойства, определённая физика. Мы пока не исследовали вопрос эволюции спинорной волновой функции, потому что для этого как минимум должны научиться строить гамильтонианы, в какой бы мы картине её не изучали, хоть в шредингеровской, хоть в гайзенберговской. Но обнаруженное разделение очень важно, так

как мы увидим, что во многих ситуациях оно может быть сохранено в процессе эволюции.

Пока мы просто придумали у частицы новую характеристику, но, по сути, не сказали, какова её физика. У частицы есть дополнительный момент количества движения, связанный с её существованием, а не с движением в пространстве. И у нас могут быть приборы, которые измеряют спиновые характеристики – проекцию спина на любую из осей. Можно придумать прибор, который измеряет квадраты оператора спина, хотя в нашем пространстве спинорных двухкомпонентных волновых функций квадрат оператора спина \hat{s}^2 , согласно (10.10), равен произведению $\frac{3}{4}$ на единичный оператор. То есть любая функция из этого пространства является собственной функцией оператора \hat{s}^2 . Это фактически означает, что из всего многообразия частиц мы выбрали только те, у которых измерение \hat{s}^2 выдаёт $\frac{3}{4}$. И наша динамика, вся наша картина, описывает пока только такие частицы.

Можно обобщить эту процедуру на другие варианты. Если у частицы нет спина, то есть $s = 0$, оператор спина не нужен, и получаются обычные однокомпонентные координатные волновые функции, например, в координатном представлении. Если мы возьмём трёхкомпонентный спинор, получится ситуация, в которой спин должен иметь три возможных компоненты на выделенное направление. Вспоминая логику, связанную с орбитальным моментом, скажем, что у операторов момента это означает, что проекция на выделенное направление, если их три, должна принимать значения $+1, 0, -1$.

В общем случае при спине s его проекция на выделенное направление должна пробегать значения от $-s$ до $+s$. Значит, если мы берём $(2s + 1)$ -компонентный спинор, то есть такой же спинор по схеме Паули, но с этим числом компонент, получим пространство спинорных волновых функций для частицы со спином s .

Отличие от орбитального момента в этом случае будет не только в том, что мы можем брать не только полуцелые значения, но и целые. Последние тоже отличаются, потому что оператор орбитального момента по-прежнему определён через координату и импульс, а оператор спинового момента с ними коммутирует и не зависит от состояния частицы в пространстве, движения и распределения. Опять сохранится теоретическая возможность независимо измерять спиновые и координатные/импульсные наблюдаемые, связанные с частицей. Хотя, конечно, может быть и наблюдаемая, которая перепутывает спиновые и координатные / импульсные степени свободы.

В общем, для включения реальной физики надо объяснить, как мы включаем операторы спина в гамильтониан. Тем самым мы объясним, как наличие спина влияет на эволюцию частицы. В гамильтониане векторный оператор спина, скорее всего, будет связан с какими-то другими векторами, ведь гамильтониан в итоге должен оказаться скаляром. Поэтому в данном случае мы будем объяснять, какие существуют, например, внешние поля, которые действуют на спин.

Взаимодействие спина с внешним полем

Здесь можно придумать разные конструкции, но начнём с того, что видим в эксперименте. В реальном мире спин был введён для объяснения аномального эффекта Зеемана, то есть для феноменологического объяснения взаимодействия атомных электронов с внешним магнитным полем. Это взаимодействие было связано с тем, что электроны вели себя как маленькие магнитные диполи.

Координата и импульс – истинные вектора, то есть при, например, зеркальном отражении, \vec{r} переходит в $-\vec{r}$, а \vec{p} в $-\vec{p}$. А момент импульса аксиальный, поэтому переходит сам в себя. Для орбитального момента это очевидно, ведь $\vec{l} = [\vec{r} \times \vec{p}]$, и когда \vec{r} и \vec{p} заменяются на противоположные, он остаётся сам собой. Для спина мы фактически ретранслируем свойства орбитального момента, потому что он тоже момент количества движения. Так что по отношению ко всем ортогональным преобразованиям он должен вести себя также – преобразовываться как аксиальный вектор при поворотах координатных осей, да и при зеркальном отражении тоже не менять своего направления.

Из электродинамики мы знаем, что магнитный момент – также аксиальный вектор. Поэтому можно постулировать, что с каждой частицей со спином \hat{S} можно связать магнитный момент, оператор которого

$$\hat{\mu} = \gamma \cdot \hat{S}, \quad (10.38)$$

γ – некая константа.

Вообще естественно назвать константу γ , как и в классической физике, гиромагнитным отношением, то есть отношением магнитного момента к механическому. Но если там это был коэффициент пропорциональности между двумя числовыми векторами, здесь между двумя эрмитовыми операторами – спина и магнитного момента частицы.

Мы знаем, как магнитный момент должен взаимодействовать с внешним магнитным полем. Для нерелятивистских систем основной вклад во взаимодействие – дипольное слагаемое, описываемое выражением

$$H_B = \hat{\mu} \vec{B} \quad (10.39)$$

И теперь понятно, как можно включить спин в реальное уравнение, описывающее эволюцию частиц со спином.

Мы можем посчитать коммутатор

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_z] = [\hat{S}_x + i\hat{S}_y, \hat{S}_z] = -i\hat{S}_x - \hat{S}_+ = -\hat{S}_+ \quad (10.40)$$

Дальше можно применить приём, который использовался для операторов \hat{a}^+ и \hat{a} в гармоническом осцилляторе. Рассмотрим любой собственный вектор оператора \hat{S}_z . Пусть ψ_m – решение уравнения

$$\hat{S}_z \psi_m = m \psi_m \quad (10.41)$$

Мы мысленно ушли от случая $s = \frac{1}{2}$ и теперь допускаем любые возможные проекции m , собственные значения \hat{s}_z . Подействуем оператором \hat{s}_z на то, что получается из действия оператора \hat{s}_+ на ψ_m

$$\hat{s}_z(\hat{s}_+\psi_m) \tag{10.42}$$

Учитывая (10.40), где $\hat{s}_+\hat{s}_z - \hat{s}_z\hat{s}_+ = -\hat{s}_+$, получим $\hat{s}_z\hat{s}_+ = \hat{s}_+\hat{s}_z + \hat{s}_+$. Тогда из (10.42) будет

$$(\hat{s} + \hat{s}_z + \hat{s}_+)\psi_m \tag{10.43}$$

А \hat{s}_z , действуя на ψ_m , выдаст m , и получится

$$(m + 1)\hat{s}_+\psi_m \tag{10.44}$$

Получилось, что $\hat{s}_+\psi_m$ – тоже собственный вектор \hat{s}_z , но с собственным значением $(m + 1)$. То есть мы понимаем его как повышающий оператор для проекции момента и просто видим из алгебры, что он повышает проекцию на единицу. Это не зависит от значения спина, оно следствие коммутационных соотношений, которым мы подчинили операторы спина.

Поэтому мы всегда будем иметь у оператора спина эквидистантный набор собственных значений в единицах \hbar с шагом через единицу.

Мы договорились, что оператор \hat{s}_+ – это матрица 2×2 (10.16). А состояние с $s_z = -\frac{1}{2}$ имеет спиновую часть $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Матрица $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ никак не подействует на координатную часть спинорной волновой функции, поэтому её можно не писать. Если их перемножить, получим

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{10.45}$$

Мы только что написали это в общем виде, оператор \hat{s}_+ , действуя на состояние с проекцией на ось z $s_z = -\frac{1}{2}$, переводит его в состояние с проекцией $+\frac{1}{2}$. Поэтому здесь как для частного случая, спина $\frac{1}{2}$, так и для общего всё складывается в соответствии с теми представлениями о спине, которые выходят из феноменологии, рассказанной в атомной и ядерной физике.

Случай спина $\frac{1}{2}$ так важен, и Паули изначально занялся именно им, потому что это самый популярный в природе вариант, именно он у частиц материи. Любой атом состоит из маленького тяжелого ядра и быстро двигающихся лёгких электронов – частиц со спином $\frac{1}{2}$. И само ядро в простейшей нуклонной модели Гайзенберга-Иваненко – это система нейтронов и протонов, которые в кварковой модели являются кварками, частицами со спином $\frac{1}{2}$.

Только когда мы переходим к полевым квантам, которые отвечают полям взаимодействия, например, фотонам, квантам электромагнитного поля, видим спин 1.

Его имеют и глюоны, переносчики сильного взаимодействия, и W^\pm, Z^0 – бозоны, переносчики слабого. То есть мы столкнулись с универсальным признаком, что спин $\frac{1}{2}$ у частиц материи, а спин 1 у частиц-переносчиков. Правда, если брать гравитацию, там потребуется как минимум спин 2, а чаще спины 2 и $\frac{3}{2}$ в моделях супергравитации. Но мы изучаем нерелятивистский микромир, и для нас самый важный спин $\frac{1}{2}$.

Значение константы γ из (10.38) нужно определять из опыта. Для каждого типа частиц надо экспериментально выяснить, чему равняется их гиромагнитное отношение. Хотя в качестве ориентира можно взять классическую задачу о движении точечной заряженной частицы во внешнем магнитном поле, проквантовать её и построить оператор магнитного момента для магнитного момента, связанного, например, с вращением точечной заряженной частицы. Эта задача хорошо знакома из атомной физики, для того же орбитального момента электрона, с которым тоже связан некий магнитный момент.

Электрон вращается в атоме, находится в состоянии с определённым l . Исследуя его поведение во внешнем магнитном поле в рамках мультипольного разложения, выделим основное, то есть магнитное дипольное слагаемое, вклад в энергию взаимодействия. Тогда обнаружим, что орбитальный магнитный момент, связанный с орбитальным движением точечной частицы с массой m и зарядом e , точнее с модулем этого заряда, знак определится знаком заряда:

$$\vec{\mu}_{\text{орб}} = -\mu_0 \hat{l}, \quad (10.46)$$

где \hat{l} – орбитальный момент, а

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} \quad (10.47)$$

Если подставить (10.47) в (10.46), $\hbar \hat{l}$ – механический момент, момент количества движения. \hbar возникло из-за того, что мы обезразмерили наблюдаемую момента. Само по себе гиромагнитное отношение – это $\frac{e}{2mc}$.

А для того, чтобы записать спиновый магнитный момент, например, для электрона, нужно провести эксперимент. Мы изначально не знаем, какие надо выбрать гиромагнитные отношения. Спин – это момент новой природы, и отношение магнитного момента к механическому можем быть отлично от (10.46). Его гиромагнитное отношение подобрали из эмпирических данных, и оказалось, что оно в два раза больше:

$$\hat{\mu}_s = 2\mu_0 \hat{s} \quad (10.48)$$

μ_0 в атомной физике называют магнетоном Бора. Это именно отношение магнитного момента к обезразмеренному механическому.

Так надо было написать для правильного описания аномального магнитного эффекта Зеемана, то есть расщепления спектральных линий атомов во внешнем

магнитном поле, посчитанного в низших порядках по \vec{B} – сначала исследовали линейный эффект \vec{B} , потом квадратичный и более сложные поправки, но начиналось всё с линейного. Теоретически это для нас пока ниоткуда не следует, в нерелятивистской теории, теории Паули, мы поставили коэффициент два, чтобы она давала правильные предсказания наблюдаемых эффектов. Но когда мы дойдём в следующем семестре до попыток объединения квантовой теории и релятивизма, он получит естественное объяснение.

Значит, классическая функция Гамильтона $H_{\text{кл}}$ для точечной частицы с зарядом $+e$, движущейся в электромагнитном поле, в нерелятивистском приближении должна выглядеть следующим образом. В форме кинетической энергии импульс \vec{p} заменится на удлинённый импульс $\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$, где \vec{A} – векторный потенциал электромагнитного поля, являющийся функцией координат и времени. Далее стоит произведение заряда на скалярный потенциал электромагнитного поля φ , который тоже может быть функцией координат и времени. Для электронов надо будет поменять знаки перед e . И если мы приписываем частице ещё магнитный момент, $\vec{\mu}$, нужно добавить и его произведение на \vec{B} . Получится

$$H_{\text{кл}} \equiv \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 + e \cdot \varphi - \vec{\mu}\vec{B}, \quad (10.49)$$

где \vec{B} , если писать через потенциалы,

$$\vec{B} \equiv \text{rot } \vec{A} \quad (10.50)$$

После квантования мы приходим к гамильтониану Паули \hat{H}_P («Paul»). Воспользовавшись принципом соответствия, расставим над координатами и импульсами знаки операторов. Здесь уже запишем, что векторный потенциал $A(\hat{r}, t)$, где \hat{r} – оператор координаты заряженной частицы. Этим мы, по сути, постулируем, что в нашей теории электромагнитное взаимодействие является локальным, то есть что частица чувствует поле в точке, где находится. Если бы мы хотели, чтобы она чувствовала поле в окружающих точках, написали бы интеграл по области, окружающей частицу, и получили нелокальный гамильтониан. Аналогично сделаем для скалярного потенциала φ . В последнее слагаемое (10.49) подставим гиромангнитное отношение (10.48) и напишем $\vec{B}(\hat{r}, t)$. Получится

$$\hat{H}_P = \frac{1}{2m} \left[\hat{p} - \frac{e}{c}A(\hat{r}, t) \right]^2 + e\varphi(\hat{r}, t) - 2\mu_0 \left(\hat{s} \cdot \vec{B}(\hat{r}, t) \right) \quad (10.51)$$

Гамильтониан Паули перепутывает спиновые и координатные степени свободы. Первые два слагаемых – часть гамильтониана, не содержащая спиновых операторов. Если бы у частицы не было магнитного момента, то спин не повлиял бы на её движение, а сейчас наличие третьего слагаемого приведёт к тому, что, в зависимости от спина, по-разному будет эволюционировать и координатная часть волновой функции.

В картине Шредингера эволюция спинорной волновой функции Ψ теперь описывается уравнением Паули:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}_p \Psi \quad (10.52)$$

Часть из первых слагаемых в (10.51), содержащая операторы координаты и импульса, пропорциональна единичной матрице 2×2 в пространстве Паули. А часть из третьего – нетривиальная матрица 2×2 , так как здесь присутствуют компоненты оператора спина. У всех трёх компонент стоят коэффициентами компоненты \vec{B} .

Картина получилась сложной. Пусть даже мы в начальный момент времени у такой системы произвели измерение, например, проекции спина на ось z , и загнали её в состояние с проекцией на ось z $s_z = +\frac{1}{2}$, то есть в момент времени $t = 0$ у неё спин был направлен вдоль оси z . Дальше из-за третьего слагаемого в (10.51) компоненты начнут эволюционировать по-разному. И в результате то, что волновая функция факторизуется в произведение координатной и спиновой части, в последующие моменты времени может быть утрачено. Мы должны решать честную систему из двух уравнений для ψ_1 и ψ_2 и не можем разделить уравнение Паули (10.52) на независимые уравнения для координатной части волновой функции и для спиновой, потому что они перепутываются. Спиновая и координатная динамики запутаны для частицы со спином в неоднородном магнитном поле.

А если магнитное поле однородно, одинаково во всех точках пространства, пусть даже может меняться с течением времени, то есть

$$\vec{B} = \vec{B}(t), \quad (10.53)$$

тогда последнее слагаемое в (10.51), содержащее оператор спина, не будет содержать операторов координаты и импульса. И гамильтониан Паули разобьётся в сумму двух независимых гамильтонианов

$$\hat{H}_p = \hat{H}_{\vec{r}} + \hat{H}_{\vec{s}}, \quad (10.54)$$

где

$$\hat{H}_{\vec{r}} = \frac{1}{2m} \left[\hat{p} - \frac{e}{c} A(\hat{r}, t) \right]^2 + e\varphi(\hat{r}, t) \quad (10.55)$$

а

$$\hat{H}_{\vec{s}} = -2\mu_0 \left(\hat{s} \cdot \vec{B}(\hat{r}, t) \right), \quad (10.56)$$

И оно не будет содержать операторов координаты и импульса, а значит, состояние в любой момент времени можно будет записать как произведение координатной и спиновой части волновой функции. Это стандартный случай разделения переменных.

Договоримся, что в случае, когда происходит факторизация, спинорную волновую функцию можно записать как

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi(\vec{r}, t)\chi(t), \quad (10.57)$$

где $\chi(t)$ – двухкомпонентный спинор, обе компоненты которого теперь могут зависеть только от времени:

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} u(t) \\ v(t) \end{pmatrix} \quad (10.58)$$

Тогда из (10.52), если подставить в правую часть (10.54), где каждое слагаемое действует только на свою часть (10.56), получается уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \chi + i\hbar \psi \frac{\partial \chi}{\partial t} = \chi(\hat{H}_{\vec{r}}\psi) + \psi(\hat{H}_s\chi), \quad (10.59)$$

Мы можем разбить его на два независимых, где в одном,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \chi = \chi(\hat{H}_{\vec{r}}\psi), \quad (10.60)$$

χ является просто общим множителем. И поскольку это равенство должно выполняться для произвольного состояния χ , фактически можно потребовать, чтобы выполнялось отдельное независимое уравнение для координатной части волновой функции с координатной частью гамильтониана:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_{\vec{r}}\psi, \quad (10.61)$$

и отдельное уравнение для спиновой:

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \hat{H}_s\chi \quad (10.62)$$

То есть существует некий особенный случай, когда поле однородно, и можно независимо изучать изменение распределения волнового пакета описываемой частицы, пакета вероятности в пространстве, и изменение спинового состояния частицы. Казалось бы, реальные физические поля обычно неоднородны. Но нет, мы же чаще всего работаем с физическими полями, созданными макроскопическими устройствами. Лабораторные поля от электромагнита на масштабах одного атома или молекулы имеют очень слабые неоднородности. А если мы изучаем поведение электрона, локализованного в этом атоме, например, совершающего переходы с одного уровня на другой и испускающего гамма-кванты в эффекте Зеемана, – а ведь именно то, какой переход совершает электрон, определяет, с какой энергией улетит гамма-квант и какой спектр излучения мы в итоге увидим, – для него внешнее поле тем более однородно.

К тому же поля, которые создают мощные электромагниты, очень маленькие по сравнению с характерными электромагнитными полями, возникающие внутри атома, учитывая размеры атомов и реальные величины зарядов. То есть все внешние поля для атома слабые и почти однородные. Поэтому, изучая влияние электромагнитного поля на излучение атомов в атомной физике, мы пренебрегали всеми квадратичными и тем более кубическими поправками, по отношению к внешнему полю, действующему на него и,

как здесь, независимо изучали координатное и спиновое состояния частицы. По крайней мере в одночастичной задаче такое разбиение всегда возможно, в многочастичных всё немного усложнится.

Во многих задачах, например, тех, которые будем решать на семинаре, посвящённом этой теме, для нас наиболее интересно будет уравнение (10.62). Задачи про движение бесспиновой частицы в пространстве мы уже изучили, поняли, что и как там делать. А с этим нужно ещё разобраться, чтобы понять, как ведёт себя эволюция спинового состояния, например, как меняется направление спина в пространстве. Чтобы понять, как всё устроено, лучше начать с классических задач.

Задача. Изменение направления спина электрона в однородном магнитном поле

Электрон попал в однородное магнитное поле, то есть зависящее от времени, но не зависящее от координаты, которое всегда направлено вдоль оси, которую назовём z :

$$\vec{B}(t) = B(t)\vec{e}_z \quad (10.63)$$

В начальный момент времени $t = 0$ спин электрона был ориентирован вдоль некоторой оси \vec{n}_0 , заданной углами ϑ_0 и φ_0 :

$$\vec{n}_0 = \vec{n}(\vartheta_0, \varphi_0) \quad (10.64)$$

Как будет меняться направление спина в дальнейшем?

Опираясь на приобретённый опыт, скажем, что, поскольку нас не интересует движение электрона в пространстве, будем изучать только спиновую часть уравнения Паули. Из-за того, что электрон имеет отрицательный заряд, у спиновой части гамильтониана Паули знак поменяется на плюс. $\hat{S}\vec{B}(t)$ в данном случае будет, учитывая (10.63), $B(t)\hat{S}_z$, так что

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = +2\mu_0B(t)\hat{S}_z\chi, \quad (10.65)$$

Данное уравнение можно записать в матричной форме, если вспомнить, что χ – это спинор $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$. При подставлении (10.7) коэффициент 2 справа сократится. Будет

$$\begin{pmatrix} i\hbar\frac{\partial u}{\partial t} \\ i\hbar\frac{\partial v}{\partial t} \end{pmatrix} = \mu_0B(t) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \mu_0B(t) \begin{pmatrix} u \\ -v \end{pmatrix} \quad (10.66)$$

То есть функции $u(t)$ и $v(t)$ подчиняются почти одинаковым уравнениями, отличающимся только знаком. Поделив их на $i\hbar$, получим

$$\frac{du}{dt} = -i\frac{\mu_0B(t)}{\hbar} \cdot u \quad (10.67)$$

$$\frac{dv}{dt} = -i\frac{\mu_0B(t)}{\hbar} \cdot v \quad (10.68)$$

Каждое из этих уравнений имеет экспоненциальное решение. Введём функцию

$$\alpha(t) \equiv \int_0^t \frac{\mu_0 B(t')}{\hbar} dt' \quad (10.69)$$

Тогда $d\alpha = \frac{\mu_0 B(t)}{\hbar} dt$. Величина $\mu_0 B(t')$ имеет размерность энергии, а $\frac{\mu_0 B(t')}{\hbar}$ частоты, так что интеграл от неё по dt' – величина безразмерная, она появится в показателе экспоненты:

$$u(t) = u(0)e^{-i\alpha(t)} \quad (10.70)$$

$$v(t) = v(0)e^{+i\alpha(t)} \quad (10.71)$$

По условию в момент времени $t = 0$ спин был ориентирован вдоль оси \vec{n}_0 (10.64). Это означает, что можно записать χ в начальный момент через построенный спинор, описывающий состояние с направлением спина вдоль оси n со сферическими углами ϑ , φ :

$$\chi|_{t=0} = \begin{pmatrix} u(0) \\ v(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (10.72)$$

Тогда (10.70) и (10.71) на самом деле

$$u(t) = \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\alpha(t)} \quad (10.73)$$

$$v(t) = \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} e^{+i\alpha(t)} \quad (10.74)$$

То есть просто добавился экспоненциальный множитель. Мы помним, что общий фазовый множитель для всего спинора не задаёт изменение физики. Если мы вынесем из общего спинора коэффициент вида $e^{i\beta}$, где β – что-то вещественное, то есть перейдём от χ к

$$\chi e^{i\beta}, \quad (10.75)$$

любые средние и дисперсии любых наблюдаемых, связанных со спином, не поменяются. Так будет, потому что в любом среднем значении будет сопряжённая волновая функция, в том числе и спинорная, и несопряжённая. И в них такие множители будут сокращаться.

Если будет $\beta = \beta(t)$, не поменяются средние значения и дисперсии от операторов, не тестирующих зависимость от времени напрямую, не содержащих $\frac{d}{dt}$. Физически определённые операторы обычно напрямую $\frac{d}{dt}$ не содержат, по крайней мере в стационарных системах. То есть это утверждение справедливо для задач, которые мы обычно изучаем.

Сказав это, перепишем выражение для $\chi(t)$, то есть (10.73) и (10.74), вынеся $e^{-i\alpha(t)}$ в качестве общего фазового множителя, для каждого момента времени имеющего

своё значение, чтобы привести спиновую часть волновой функции к виду (10.72). Тогда спиновая часть в момент времени t с точностью до $e^{-i\alpha(t)}$ выдаст выражение в скобках

$$\chi(t) = e^{-i\alpha(t)} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i(\varphi+2\alpha(t))} \end{pmatrix} \quad (10.76)$$

Это состояние, у которого спин ориентирован вдоль направления со сферическими углами ϑ и $\varphi + 2\alpha(t)$. То есть магнитное поле направлено вдоль оси z , и, если мы берём какое-то начальное направление спина \vec{n}_0 , оно дальше просто прецессирует вокруг оси z с переменной угловой частотой (рис. 10.2).

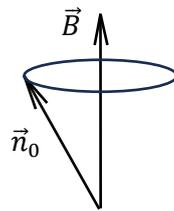


Рис. 10.2. Прецессия направления спина со временем вокруг направления магнитного поля

Если вспомнить (10.69), переменная угловая частота, эффективная частота прецессии спина вокруг направления магнитного поля

$$\Omega(t) = \frac{2\mu_0 B(t)}{\hbar} \quad (10.77)$$

То есть, если магнитное поле однородно и меняется только по величине, не меняясь по направлению, эволюция спина сводится к его прецессии вокруг направления магнитного поля, которая вся диктуется зависимостью $B(t)$. Прецессией называется процесс, когда угол ϑ , остаётся неизменным, а азимутальный φ меняется по некоторому закону, который описывается интегралом от переменной частоты.

Если магнитное поле будет не только однородно, но и постоянно, частота тоже будет постоянной,

$$\Omega = \frac{2\mu_0 B}{\hbar} \quad (10.78)$$

Если подставить определение μ_0 (10.46), получится выражение для ларморовской частоты,

$$\Omega = \frac{eB}{mc} \quad (10.79)$$

Этот пример был достаточно простым, более сложные и интересные с физической точки зрения рассмотрим на семинаре.

Лекция 11. Другие спины и изоспин

Описание частиц со спином $\frac{1}{2}$

Напомним вкратце, что мы изучили про спин. Мы рассматривали нерелятивистские спинорные частицы, то есть частицы со спином $s = \frac{1}{2}$. Их пространство состояний – это пространство спинорных волновых функций $\{\Psi(\vec{r}, t)\}$, которые, например, в координатном пространстве могут зависеть от \vec{r} и в процессе эволюции в шредингеровской картине зависят от t . Но это всегда двухкомпонентный столбик. Мы ввели понятие, что есть состояния, в которых спин имеет определённое направление. Проекция спина на выделенное направление в единицах \hbar всегда может принимать два значения, $\pm \frac{1}{2}$, с разными вероятностями.

И мы договорились считать, что спин ориентирован по оси \vec{n} , если с вероятностью 1 его проекция на это направление принимает значение $+\frac{1}{2}$. Такое состояние описывается собственной функцией оператора проекции спина на ось \vec{n} , который равен произведению единичного вектора вдоль направления \vec{n} на вектор оператора спина,

$$\hat{s}_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \hat{\vec{s}} \quad (11.1)$$

И для этого состояния

$$\hat{s}_{\vec{n}} \Psi_{\vec{n}} = +\frac{1}{2} \Psi_{\vec{n}} \quad (11.2)$$

Оператор спина в данном пространстве определён через введённый нами набор матриц Паули:

$$\hat{\vec{s}} = \frac{1}{2} \hat{\vec{\sigma}} \quad (11.3)$$

Мы явно показали, что в этом случае $\Psi_{\vec{n}}$ факторизуется, его можно записать в виде произведения координатной волновой функции на спинор. Координатная функция $\phi(\vec{r})$ вообще может зависеть от t в процессе эволюции, но сейчас мы её пишем в конкретный момент времени, потому что факт, что частица имеет определённое направление спина, фиксируется в конкретный момент времени. Дальше направление спина при наличии внешних влияний, как мы видели, может изменяться. Спинор, как мы выяснили, при решении задачи (11.2) может быть записан через сферические углы ϑ и φ направления \vec{n} , например, таким образом, как в (11.4). Получается

$$\Psi_{\vec{n}} = \phi(\vec{r}) \cdot \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (11.4)$$

Мы так выбрали фазовые множители, чтобы первая компонента была вещественной. Это нужно, чтобы, когда направим \vec{n} вдоль оси z , то есть когда будет $\vartheta =$

0, получать в качестве спиновой части спинорной волновой функции спинор $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.
Например, если \vec{n} совпадает с \vec{e}_z , то

$$\Psi_z = \phi(\vec{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.5)$$

где $\phi(\vec{r})$ – какая-то координатная волновая функция.

То есть, когда мы говорим, что спин частицы ориентирован по оси z , подразумеваем набор утверждений. Во-первых, если бы мы в этом состоянии померили проекцию спина на данную ось, с вероятностью 1 получили бы $+\frac{1}{2}$. Во-вторых, спинорная волновая функция частицы представима в виде координатной части на спинор $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Также мы вводили оператор проекции спина на произвольное направление $\hat{s}_{\vec{n}}$. Если мы записываем единичный вектор \vec{n} в направлении данной оси тоже стандартным образом, через её сферические углы ϑ и φ , когда $n_x = \cos \vartheta$, n_y и n_z записываются через $\sin \vartheta$ на косинус и синус азимутального угла φ соответственно. Тогда мы можем явно построить оператор проекции спина (11.1) через сферические углы данного направления как

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (11.6)$$

Это матрица оператора проекции спина на ось \vec{n} в базисе из наших спинорных двухкомпонентных волновых функций $\{\Psi(\vec{r}, t)\}$. Как и всякий спиновый оператор, $\hat{s}_{\vec{n}}$ не связан с движением в пространстве, поэтому не зависит от \vec{r} и \vec{p} , не содержит операторов координаты и импульса и полностью определяется направлением, на которое мы проецируем спин, его сферическими углами.

Это явная запись, которая фактически получается при подстановке оператора \hat{s} через матрицу Паули (11.3). Например, в (11.1) будет стоять $\vec{n}_z \cdot \hat{s}_z$. Оператор \hat{s}_z даст $\frac{1}{2}$, и матрица Паули $\hat{\sigma}_z$ – это $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. $\vec{n}_z = \cos \vartheta$, поэтому на главной диагонали в (11.6) стоят выражения $\cos \vartheta$ и $-\cos \vartheta$ с коэффициентом $\frac{1}{2}$ перед матрицей. А от n_x и n_y добавятся выражения $\sin \vartheta e^{-i\varphi}$ и $\sin \vartheta e^{i\varphi}$ на побочную.

Матрица (11.6) эрмитова, при комплексном сопряжении и транспонировании она переходит сама в себя, ведь это матрица оператора наблюдаемой. Найдём с помощью неё среднее значение проекции спина на направление, задаваемое ортом \vec{n} со сферическими углами ϑ и φ , в состоянии, где спин частицы со спином $\frac{1}{2}$ ориентирован по оси z , то есть $\langle s_{\vec{n}} \rangle_z$ (рис. 11.1).

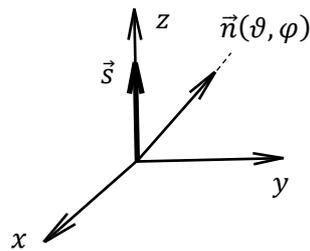


Рис. 11.1. Вектор спина и направление, на которое его нужно спроектировать

Это важная величина, потому что физические результаты не зависят от наших субъективных описательных выборов. Мы так выбрали систему координат, что направили ось z вдоль направления спина частицы в нашем состоянии (рис. 11.1). Поэтому в действительности можно говорить, что мы вычисляем среднее значение проекции спина на направление, составляющее угол ϑ с реальным направлением спина. То есть мы измерением загнали частицу в состояние со спином, ориентированным вдоль какой-то оси, которую выбрали за ось z , и хотим предсказать среднее значение статистики измерений проекции спина на другую ось. Даже из геометрических соображений понятно, что данная величина зависит только от угла между этими осями. В нашей системе координат это полярный угол ϑ . Зависимость от азимутального угла φ противоречила бы геометрии.

Фактически мы должны взять эрмитово сопряжённое выражение к спинору $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, то есть строчку $(1 \ 0)$, и получить элемент с индексом 11 в матрице (11.6):

$$\langle s_{\vec{n}} \rangle_z = (1 \ 0) \hat{s}_{\vec{n}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cos \vartheta \quad (11.7)$$

У нас частица со спином $\frac{1}{2}$, то есть $\frac{1}{2}$ – значение квантового числа s , через которое записывается собственное значение оператора \hat{s}^2 , равное $s(s + 1)$, аналогично тому, как у оператора \hat{l}^2 были собственные значения $l(l + 1)$. Тогда $\langle \hat{s}^2 \rangle = \frac{3}{4}$. То есть частицы со спином $\frac{1}{2}$ – это частицы, у которых оператор квадрата спина имеет определённое значение, равное $\frac{3}{4}$. Так мы договорились называть. $\frac{1}{2}$ ассоциируется с этим спином, потому что его проекции на выделенное направление принимает значение $\pm \frac{1}{2}$.

Есть ещё другое, чисто геометрическое прочтение этого представления. Проекция на ось, составляющую с направлением спина в среднем угол ϑ , всегда $\frac{1}{2} \cos \vartheta$. Это обычное правило геометрического проецирование, как если бы мы спроецировали вектор \vec{s} на направление \vec{n} (рис. 11.1). Для частиц спина $\frac{1}{2}$ это представление универсальное, мы всегда можем рассуждать именно так при вычислении средних проекций.

Дальше, зная выражение (11.6) для оператора $\hat{s}_{\vec{n}}$, можно чисто алгебраически, например, предсказать статистику результатов измерений его проекции. Из (11.7) мы

знаем, что среднее значение проекции равно $\frac{1}{2}$. Оно должно выражаться через вероятности выпадения двух возможных значений, так как если мы производим измерение проекции спина на ось, прибор может выдать только значения $+\frac{1}{2}$ или $-\frac{1}{2}$. Тогда по определению среднего

$$\frac{1}{2} \cos \vartheta = \omega_+ \left(+\frac{1}{2} \right) + \omega_- \left(-\frac{1}{2} \right) \quad (11.8)$$

Кроме того, поскольку других исходов не бывает, сумма соответствующих вероятностей

$$\omega_+ + \omega_- = 1 \quad (11.9)$$

Из соотношений (11.8) и (11.9), то есть из простого геометрического проецирования направления спина на данную ось и естественного соображения, что полная вероятность равняется единице, можно тут же определить ω_+ и ω_- , так как получилась система из двух уравнений для двух неизвестных. Почленно складывая и вычитая уравнения, получим

$$\omega_+ = \frac{1 + \cos \vartheta}{2} = \cos^2 \frac{\vartheta}{2} \quad (11.10)$$

Тогда

$$\omega_- = \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \quad (11.11)$$

Разумеется, этот же результат мы видели в (11.6). Если бы мы просто спросили, какова вероятность обнаружить частицу в состоянии со спиновой частью волновой

функции $\begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}$, если она находится в состоянии с $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, должны были бы просто

перемножить скалярно сопряжённый спинор на обычный и возвести этот результат по модулю в квадрат. Тогда бы тоже получился результат (11.10). А если бы мы взяли в качестве парного спинора $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, то есть когда спин направлен против оси z , квадрат модуля нижней компоненты дал бы (11.11).

Таким образом, для частиц спина $\frac{1}{2}$ при решении задач можно просто проецировать направление спина на нужную нам ось и считать средние, а потом через них вычислять вероятности реализации. У частиц с другими спинами, например, 1 или $\frac{3}{2}$, будет больше проекций, и картина будет сложнее. Если мы говорим, что у частицы спина $\frac{3}{2}$ спин ориентирован вдоль оси z , это означает, что при измерении S_z с вероятностью 1 получится $+\frac{3}{2}$, максимальный спин, $+s$. Состояние против оси z будет иметь проекцию $-\frac{3}{2}$. Получается, что состояния с проекциями по и против оси z не являются полным

базисом состояний, поскольку ещё возможны проекции $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$, которые уже нельзя интерпретировать как состояния с определённым направлением спина в нашей рамках логики.

Поэтому в таких случаях не всегда возможна простая геометрическая картина. Если мы скажем, что частица находится в состоянии с проекцией спина $+\frac{1}{2}$ на ось z у частицы со спином $\frac{3}{2}$ и спросим, с какой вероятностью её спин окажется ориентирован вдоль оси \vec{n} , придётся решать более сложную задачу. Возможность действовать по предложенной схеме сохранится, мы сможем построить оператор проекции спина на ось \vec{n} и посчитать среднее значение этой проекции в заданном состоянии, например, где проекция спина на ось равна $+\frac{1}{2}$. Только теперь не хватит среднего значения и условия нормировки вероятностей, поскольку вероятностей будет четыре: $-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}$. Чтобы увеличивать число уравнений, можно просто, имея оператор проекции спина, посчитать среднее от его квадрата. Это будет новое независимое уравнение на вероятности проецирования в реализации всех значений. А также среднее от куба. Для любого спина можно действовать таким образом и дальше.

Описание частиц с другими спинами

В теории Паули мы разобрались, как описывать частицы со спином $\frac{1}{2}$. Он самый важный для атомной, молекулярной и ядерной физики, ведь им обладают фундаментальные частицы материи в стандартной модели, кварки и лептоны, из которых состоят объекты их изучения. Однако в природе существуют и частицы с другими спинами.

Любой спин s является оператором момента, поэтому операторы спина должны подчиняться тем же алгебраическим соотношениям. Коммутатор проекций оператора спина всё равно должен описываться выражением

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{s}_k \quad (11.12)$$

и любая проекция всегда должна коммутировать с квадратом оператора спина:

$$[\hat{s}_i, \hat{s}^2] = 0 \quad (11.13)$$

Как и в случае спина $\frac{1}{2}$, эти операторы не связаны с вращениями в обычном координатном пространстве, поэтому мы считаем их не зависящими от операторов координаты и импульса. Значит, они все должны с ними коммутировать:

$$[\hat{s}_i, x_j] = [\hat{s}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (11.14)$$

Мы будем считать проекцию спина одним из квантовых чисел, нумерующих базисные состояния, $s_z \equiv m_s$. Она пробегает значения от $+s$ до $-s$ с шагом через единицу, то есть число возможных проекций спина на выделенное направление при спине s всегда будет равно $2s + 1$. При этом из теории орбитального момента нам

известно, что есть состояния, у которых $s = 1$. Но из примера Паули мы понимаем, что есть и полуцелые значения спина.

На данный понятийный момент можно посмотреть с точки зрения теории групп. Она скажет, что когда мы переходим от целых значений оператора момента, которые существуют для орбитального, к полуцелым, возникающим для спинового, то есть когда обобщаем только целые значения на целые и полуцелые вместе, мы расширяем группу симметрии, которую приписываем динамике нашей системы. Сначала была $SO(3)$, группа ортогональных преобразований трёхмерного пространства, вращений. Буква S означает, что специальный детерминант матрицы преобразований равен единице, мы подчиняем её такому требованию, условию ортогональности. И мы её обобщаем до группы $SO(2)$, группы унитарных матриц 2×2 , тоже подчинённых требованию, что определитель единица. В теории групп говорят, что $SO(2)$ является универсальной накрывающей для $SO(3)$. Это расширение приводит к тому, что индексы, которыми мы нумеруем неприводимые представления группы, у $SO(3)$ пробегает только целые значения, а у $SO(2)$ целые и полуцелые.

Но это математический подход, а с точки зрения физики мы не понимаем, для чего такое расширение нужно. В теории Паули мы решили ввести полуцелые значения спина, потому что не могли без этого описать наблюдаемое явление, аномальный магнитный эффект Зеемана. Мы построили модель, которая отвечает эмпирическим данным, и для неё надо вводить полуцелые спины. В общем, в нерелятивистской теории мы обобщаем возможные значения спина частицы с целых до целых и полуцелых, потому что обнаружили в мире частицы с полуцелыми значениями спина.

Когда мы начнём строить релятивистские теории, обнаружим, что там требование наличия допустимых полуцелых значений спина является естественным требованием того, что мы считаем группой симметрии динамики, группой Пуанкаре. То есть группы, состоящей из вращений трёхмерного пространства, трансляций по всем четырём осям четырёхмерного пространства-времени и гиперболических поворотов – поворотов в плоскости $0_x 0_y 0_z$, которые с точки зрения физики являются преобразованиями Лоренца, переходами из одной инерциальной системы отсчёта в другую в четырёхмерном пространстве-времени. Там оказывается, что соответствующие значения спина, то есть соответствующий оператор квадрата спина, является одним из операторов Казимира этой группы, то есть операторов, коммутирующих со всеми генераторами этой группы. И ему там будет необходимо иметь собственные значения $s(s + 1)$, где s пробегает целые и полуцелые значения.

То есть можно сказать, что в нерелятивистской физике мы вынуждены вводить полуцелые значения спина, исходя из эмпирических данных, но в релятивистском подходе это будет естественным следствием релятивизма.

Для дальнейшей схемы построения описания в нашем случае мы используем $(2s + 1)$ -компонентные спинорные волновые функции. То есть теперь спиноры

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \\ \psi_{2s+1} \end{pmatrix} \quad (11.15)$$

И мы теперь всегда можем построить оператор спина \hat{S} как постоянные матрицы в этом пространстве, в том смысле, что они не зависят от операторов координаты и импульса, то есть от \hat{x} и \hat{p}_x , тех же операторов с индексами y и z и т. д., размером $(2s + 1) \times (2s + 1)$. Их можно построить, отталкиваясь от алгебры, представленной выражениями (11.12–11.14). Мы можем выбирать разные базисы. Договоримся, что, если иное не диктуется требованиями конкретной задачи, то, когда мы хотим в задаче ввести выделенное направление, неважно, выделяется ли оно физически, когда, например, включено магнитное поле с определённым направлением, либо мы его выбираем условно, всегда будем считать его направлением оси z .

Важно увидеть общность подхода для всех моментов. Мы даже будем говорить об общей теории моментов, то есть о том, что все моменты количества движения, независимо от их природы, являются ли они орбитальными или спиновыми, обладают рядом общих свойств, являющихся следствием алгебры (11.12–11.14). Особенно первых двух соотношений, потому что последнее для орбитального момента несправедливо. Общность алгебраических свойств в значительной степени отражается на общности их физических свойств.

Итак, поскольку операторы $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ между собой не коммутируют, как и в случае частиц с $s = \frac{1}{2}$ мы можем в качестве состояний с определённым спином выбирать состояния с определённым \hat{S}^2 и определённым \hat{S}_z . Мы можем строить базис в пространстве спиновых состояний, волновых функций Ψ , в виде произведения какой-то координатной волновой функции $\phi(\vec{r})$ с каким-то набором квантовых чисел n . Это не обязательно одно число, некоторые индексы u волновых функций могут превращаться в мультииндексы, то есть содержат в себе несколько квантовых чисел. n – набор квантовых чисел, достаточный для того, чтобы занумеровать все возможные состояния частицы в обычном координатном пространстве, не зависящие от их спинового состояния. $\phi(\vec{r})$ умножается на χ_σ , спиновую часть волновой функции, где σ – некий набор индексов, нумерующих спиновые состояния. χ_σ – это просто $(2s + 1)$ -компонентный спинор с компонентами, постоянными с точки зрения зависимости от \vec{r}

$$\Psi_{n\sigma} = \phi_n(\vec{r})\chi_\sigma \quad (11.16)$$

И $\phi_n(\vec{r})$, и χ_σ могут эволюционировать в дальнейшем, но пока мы берём состояние в заданный момент времени. Оно всегда может быть представлено в виде (11.16), если это базисное состояние. Общее состояние системы – это суперпозиция базисных, поэтому среди состояний частицы со спином есть и те, в которых направление спина, например, не имеет определённого значения. Они будут комбинациями состояний

с разными направлениями спинов с разными координатными частями, но это всё равно будет комбинация базисных волновых функций $\Psi_{n\sigma}$.

Таким образом, в дальнейшем мы всегда будем строить базис из произведений координатных и спиновых частей, при необходимости рассматривая их комбинацию. Если пользоваться линейной алгеброй, мы тем самым говорим, что пространство спиновых волновых функций может быть построено как прямое произведение пространств координатных и спиновых состояний частицы, которые выстраиваются по описанной схеме.

Если мы будем заниматься только спиновыми частями χ_σ волновых функций (11.16), сможем смотреть на операторы спина как на действующие именно на эту часть волновой функции и не трогающие координатную $\phi_n(\vec{r})$, поскольку они не зависят от координат и импульсов. Напротив, те же операторы координаты и импульса будут действовать на координатную часть волновой функции, не трогая спиновую для такого базисного состояния.

Мы договорились, что базис в пространстве спиновых частей волновой функции $l[\chi_\sigma]$ составляем из векторов $|sm_s\rangle$, где s указывает величину спина, а m_s – её проекцию на ось z . Квантовое число m_s мы отождествили со значением проекции спина на ось z , это собственное значение оператора \hat{s}_z . $|sm_s\rangle$ – собственный вектор операторов \hat{s}^2 и \hat{s}_z , то есть они, действуя, на этот вектор, выдают произведение собственного значения на него же:

$$\hat{s}^2|sm_s\rangle = s(s + 1)|sm_s\rangle \tag{11.17}$$

$$\hat{s}_z|sm_s\rangle = m_s|sm_s\rangle \tag{11.18}$$

Собственные значения \hat{s}_z , m_s , пробегает значения от $+s$ до $-s$ с шагом через единицу.

Мы получили с помощью выражения (11.17) и (11.18) некий стандартный базис. Оператор \hat{s}_z в нём является диагональным, поскольку это базис из его собственных векторов, а на диагонали стоят собственные значения. То есть это просто диагональная матрица, на диагонали которой стоят числа от $+s$ до $-s$ с шагом через единицу, а все недиагональные элементы равны нулю:

$$\hat{s}_z = \begin{pmatrix} +s & 1 & 1 \\ 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & s \end{pmatrix} \tag{11.19}$$

Так что, как только мы выбрали этот базис, сразу знаем в нём оператор проекции спина на ось z . Две другие проекции возьмём из алгебры, с заданным оператором \hat{s}_z операторы \hat{s}_x и \hat{s}_y строятся из коммутационных соотношений. Повторим то, что делали для орбитального момента и момента спина $\frac{1}{2}$, только постараемся сделать это в общем виде.

Введём операторы

$$\hat{s}_\pm = \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y \tag{11.20}$$

Если будем считать коммутатор \hat{s}_z например, с \hat{s}_+ , получим

$$[\hat{s}_z, \hat{s}_+] = [\hat{s}_+, \hat{s}_x] + i[\hat{s}_z, \hat{s}_y] \quad (11.21)$$

Пользуясь коммутационными соотношениями, обнаружим, что $[\hat{s}_+, \hat{s}_x] = i\varepsilon_{31k}\hat{s}_k$. Это не равно нулю только при $k = 2$, ε_{312} двумя перестановками превращается в ε_{123} , то есть получается +1. Из $[\hat{s}_z, \hat{s}_y]$ получится $-i\hat{s}_x$. Тогда из (11.21) будет

$$i\hat{s}_y + \hat{s}_x = \hat{s}_+ \quad (11.22)$$

Мы уже видели эту ситуацию. Если мы действуем оператором \hat{s}_z на то, что получается из действия \hat{s}_+ на $|sm_s\rangle$, то, воспользовавшись (11.21), можно написать

$$\hat{s}_z\hat{s}_+ = \hat{s}_+\hat{s}_z + [\hat{s}_z, \hat{s}_+] = \hat{s}_+\hat{s}_z + \hat{s}_+ \quad (11.23)$$

Оператор \hat{s}_z из (11.23), действуя на свой собственный вектор в (11.22), вытаскивает своё собственное значение m_s . И из (11.22) снова получается вектор из произведения \hat{s}_+ на базисный вектор $|sm_s\rangle$, только теперь умноженный на $m_s + 1$,

$$(m_s + 1)\hat{s}_+|sm_s\rangle, \quad (11.24)$$

то есть снова его собственный вектор, отвечающий собственному значению, большему на единицу. \hat{s}_+ в общем случае – повышающий оператор для проекции момента.

Важно заметить, что коммутатор

$$[\hat{s}_+, \hat{s}^2] = 0, \quad (11.25)$$

потому что \hat{s}_x и \hat{s}_y коммутируют по отдельности с \hat{s}^2 , а \hat{s}_+ , согласно (11.20), их комбинация. Поэтому такая же выкладка докажет, что \hat{s}_+ не меняет собственного значения оператора \hat{s}^2 , то есть не меняет квантового числа s у базисного элемента $|sm_s\rangle$, а m_s увеличивает на единицу. То есть переводит в вектор

$$\hat{s}_+|sm_s\rangle = C(s, m_s)|s, m_s + 1\rangle, \quad (11.26)$$

C – множитель, который мы пока не знаем.

С другой стороны, возьмём оператор из произведения $\hat{s}_-\hat{s}_+$ и вычислим среднее значение от него по нашему базисному состоянию, $\langle sm_s|\hat{s}_-\hat{s}_+|sm_s\rangle$. \hat{s}_+ , подействовав вправо, вытаскивает C и переведёт вектор $|sm_s\rangle$ в $|s, m_s + 1\rangle$. А оператор \hat{s}_- , как видно из определения операторов (11.20), эрмитово сопряжённый к \hat{s}_+ . Мы можем перекинуть его действие налево, куда он будет действовать как \hat{s}_+ . Снова воспользовавшись формулой (11.26), получим тот же множитель $C(s, m_s)$, только из-за действия налево сопряжённый. Тогда получится

$$\langle sm_s|\hat{s}_-\hat{s}_+|sm_s\rangle = |C(s, m_s)|^2 \quad (11.27)$$

А если расписать $\hat{s}_+\hat{s}_-$ через определение (11.20), получим

$$\hat{s}_+\hat{s}_- = (\hat{s}_x - i\hat{s}_y)(\hat{s}_x + i\hat{s}_y) = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + i(\hat{s}_x\hat{s}_y - \hat{s}_y\hat{s}_x) \quad (11.28)$$

$\hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2$ можно записать как $\hat{s}^2 - \hat{s}_z^2$, а $i(\hat{s}_x\hat{s}_y - \hat{s}_y\hat{s}_x)$ как $-\hat{s}_z$. То есть из (11.28) получится

$$\hat{s}^2 - \hat{s}_z^2 - \hat{s}_z \quad (11.29)$$

Подставим (11.29) в (11.27). В обкладках будут стоять собственные вектора всех этих операторов, и они просто заменятся на свои собственные значения. То есть из (11.27) получится

$$s(s+1) - m_s^2 - m_s \quad (11.30)$$

Базисные элементы всегда можно определить с точностью до фазы, поэтому выберем их фазу так, чтобы множители C были положительными вещественными. Тогда можно будет просто извлечь квадратный корень из выражения (11.30). То есть из (11.27) и (11.30) можно сделать вывод, что возможен такой выбор начальных фаз у элементов нашего базиса, чтобы получалось

$$\hat{s}_+ |sm_s\rangle = \sqrt{(s - m_s)(s + 1 + m_s)} |s m_s + 1\rangle, \quad (11.31)$$

где под корнем стоит немного переписанное выражение (11.30), мы факторизовали разность и записали в виде произведения двух линейных комбинаций m_s .

Мы аккуратно доказали, что повышающий оператор проекции спина при любом спине действует на собственный вектор операторов \hat{s}^2 и \hat{s}_z известным образом (11.31). Аналогичные рассуждения или соображения о том, что \hat{s}_- эрмитово сопряжённый к \hat{s}_+ оператор, позволят записать, что его действие описывается как

$$\hat{s}_- |sm_s\rangle = \sqrt{(s + m_s)(s + 1 - m_s)} |s m_s - 1\rangle \quad (11.32)$$

Если взять состояние с $m_s = +s$, у него не должно быть возможностей повысить проекцию, потому что при спине s проекции выше $+s$ быть не может. И действительно, если в (11.31) $m_s = +s$, в первой скобке под корнем получается ноль, и соответствующий оператор, действуя на состояние с проекцией, которую нельзя повысить, даёт ноль.

То же самое будет с \hat{s}_- , если взять состояние с $m_s = -s$, то есть проекцию, которую нельзя понизить. Действие понижающего оператора на такое состояние из (11.32) даст ноль. Это ещё одно косвенное наблюдение, подтверждающее, что мы получили правильные выражения.

Благодаря формулам (11.31) и (11.32) мы можем построить матрицы операторов \hat{s}_+ и \hat{s}_- для любого s в явном виде. А потом через них легко построить \hat{s}_x и \hat{s}_y . Из определений, введённых для \hat{s}_+ и \hat{s}_- , следует, что

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}(\hat{s}_+ + \hat{s}_-) \quad (11.33)$$

$$\hat{s}_y = \frac{1}{2i}(\hat{s}_+ - \hat{s}_-) \quad (11.34)$$

То есть формулы (11.31) и (11.32) дают решение общей задачи построения спиновых матриц для любого спина. Мы всегда построим \hat{s}_x , \hat{s}_y и \hat{s}_z как матрицы Паули для спина $s = \frac{1}{2}$ и можем обобщить эту конструкцию на любой случай. Но мы при этом строим в определённом базисе, на который наложили два жёстких требования. Во-первых, это базис состояний с определённой s_z , из-за чего оператор \hat{s}_z стал

диагональным. Мы можем построить базис состояний с определённой s_x , и тогда оператор \hat{s}_x будет диагональным, а \hat{s}_y и \hat{s}_z какими-то другими.

Переход от одного базиса к другому будет просто унитарным преобразованием. Поэтому во-вторых можно заявить, что мы строим эти матрицы с точностью до унитарного преобразования. Синхронное унитарное преобразование матриц \hat{s}_x , \hat{s}_y и \hat{s}_z от построенного нами типа к любому другому ничего не испортит, коммутационные соотношения останутся теми же самыми, так что с ними можно будет работать также. Но у нас здесь некий стандартный базис, который всегда можем построить и в котором \hat{s}_z всегда диагональна, а \hat{s}_x и \hat{s}_y строятся через \hat{s}_+ и \hat{s}_- , которые явно определены соотношениями (11.31) и (11.32).

Задача 1. Операторы спина в пространстве спинорных трёхкомпонентных волновых функций

Пусть спин $s = 1$. Есть пространство спинорных трёхкомпонентных волновых функций, они в координатном представлении будут

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \\ \psi_3(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (11.35)$$

В этом пространстве надо построить в явном виде операторы спина.

Выберем базис из состояний с определённой проекцией спина на ось z $|sm_s\rangle$, где $s = 1$, а $m_s = +1, 0, -1$. В нём оператор \hat{s}_z , матрица 3×3 , диагональная, и на диагонали стоят собственные значения $+1, 0, -1$:

$$\hat{s}_z = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (11.36)$$

То есть, сделав выбор базиса, мы тут же выписываем вид оператора \hat{s}_z в нём.

Оператор \hat{s}_+ - какая-то матрица 3×3 . Пусть она действует на базисный спинор $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, то есть на спиновую часть волновой функции с определённой проекцией спина на ось z , равной $+1$. Поскольку повысить проекцию $+1$ невозможно, ведь большей проекции спина не существует, а также, согласно формуле (11.31),

$$\hat{s}_+ |1 + 1\rangle = \sqrt{(1 - 1)(1 + 1 + 1)} = 0 \quad (11.37)$$

Поэтому должно быть

$$\hat{s}_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (11.38)$$

Мы всегда перемножаем по правилу «строка на столбец» и видим, что у каждой строки при умножении на столбец $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ должен получаться ноль. Первый элемент любой строки будет умножаться на единицу, поэтому в матрице \hat{s}_+ первый столбец должен состоять из нулей.

Если мы действуем оператором \hat{s}_+ на состояние $|10\rangle$, со спином единица в нашем базисе и его проекцией, равной нулю, то есть на базисный спинор $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, так как по формуле (11.31)

$$\hat{s}_+|10\rangle = \sqrt{(1-0)(1+1+0)}|1+1\rangle, \quad (11.39)$$

то

$$\hat{s}_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.40)$$

где спинор $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ соответствует состоянию $|1+1\rangle$.

Чтобы при поочерёдном умножении каждой строки матрицы \hat{s}_+ на столбец $\hat{s}_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ получился столбец $\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, второй столбец этой матрицы должен быть $\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Аналогично, должно быть

$$\hat{s}_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.41)$$

поэтому матрица \hat{s}_+ в этом базисе обязательно должна иметь вид

$$\hat{s}_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (11.42)$$

Мы получили этот результат из определения данного оператора и коммутационных соотношений. Аналогично можно построить \hat{s}_- , но, так как этот оператор эрмитово сопряжённый по отношению к \hat{s}_+ , можно просто транспонировать матрицу (11.42) и взять комплексно-сопряжённое выражение. Для вещественной матрицы оно простое. Поэтому

$$\hat{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (11.43)$$

Тогда, по формуле (11.33), в нашем выбранном базисе, где верно (11.36), оператор

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}\hat{s}_+ + \frac{1}{2}\hat{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (11.44)$$

Аналогично,

$$\hat{s}_y = \frac{1}{2i}\hat{s}_+ - \frac{1}{2i}\hat{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ +\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & +\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (11.45)$$

Матрица осталась эрмитовой, хотя все компоненты теперь чисто мнимые, но при транспонировании и комплексном сопряжении она переходит сама в себя.

Теперь, с помощью выражений (11.36), (11.44) и (11.45), у нас явно выстроены матрицы оператора спина, аналог матриц Паули для матриц 3×3 . Так что любой оператор спина частицы с единичным спином можно записать как оператор, матричный вектор матрицы 3×3 , с такими тремя компонентами.

Мы работаем в базисе из состояний с определённым значением оператора \hat{s}^2 . Все базисные состояния – собственные вектора данного оператора с собственным значением $s(s + 1)$, где $s = 1$. То есть оператор \hat{s}^2 – удвоенный единичный оператор 3×3 :

$$\hat{s}^2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (11.46)$$

В этом можно убедиться и явно, возведя каждый из операторов \hat{s}_x , \hat{s}_y и \hat{s}_z в квадрат по правилу матричного умножения, то есть умножив матрицы сами на себя, и вычислив выражение $\hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$.

Это конкретный механизм построения спиновых матриц с точностью до унитарного преобразования. Любые три матрицы \hat{s}'_x , \hat{s}'_y , \hat{s}'_z , полученные из матриц \hat{s}_x , \hat{s}_y , \hat{s}_z синхронным унитарным преобразованием, то есть операторы

$$\hat{s}'_x = \hat{u}\hat{s}_x\hat{u}^+ \quad (11.47)$$

$$\hat{s}'_y = \hat{u}\hat{s}_y\hat{u}^+ \quad (11.48)$$

$$\hat{s}'_z = \hat{u}\hat{s}_z\hat{u}^+, \quad (11.49)$$

где \hat{u} – любая унитарная матрица 3×3 , тоже можно использовать в качестве компонент оператора спина, но уже в другом базисе, полученном данным унитарным

преобразованием из выбранного в начале. Это естественный произвол, который можно использовать, если он понадобится.

Можно явно построить оператор проекции спина на произвольную ось \vec{n} в пространстве, заданную сферическими углами ϑ и φ :

$$\hat{s}_{\vec{n}} = n_x \hat{s}_x + n_y \hat{s}_y + n_z \hat{s}_z \quad (11.50)$$

Если расписать декартовы компоненты единичного вектора \vec{n} со сферическими углами ϑ и φ , из (11.50) получится

$$\sin \vartheta \cos \varphi \hat{s}_x + \sin \vartheta \sin \varphi \hat{s}_y + \cos \vartheta \hat{s}_z \quad (11.51)$$

Подставив в (11.51) построенные операторы (11.36), (11.44) и (11.45), мы получим матрицу 3×3 , где в верхнем левом углу будет стоять $\cos \vartheta$, в центре 0, а в правом нижнем углу $-\cos \vartheta$ от оператора \hat{s}_z . В правом верхнем и левом нижнем углах останутся нули, потому что \hat{s}_x и \hat{s}_y будут давать вклады в оставшиеся четыре места. В верхней строке по центру будет $\sin \vartheta (\cos \varphi - i \sin \varphi)$, то есть $\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{-i\varphi}$. В центре левого столбца возникнет сопряжённый к нему элемент $\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$. В центре правого столбца и нижней строки будут стоять аналогичные выражения, потому что у операторов \hat{s}_x и \hat{s}_y центральные элементы в левом столбце и нижней строке, а также в верхней строке и правом столбце совпадают друг с другом. Так что из (11.51) получится, что полный вид оператора проекции спина частицы со спином $s = 1$ на произвольный вектор \vec{n} , то есть $\hat{s}_{\vec{n}}$, это

$$\begin{pmatrix} \cos \vartheta & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{-i\varphi} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{i\varphi} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (11.52)$$

Определим как состояние со спином, ориентированным вдоль оси z, состояние $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, то есть такое, в котором с вероятностью единица при измерении проекции спина \hat{s}_z получим +1. Вычислим, чему равно среднее значение проекции спина на ось \vec{n} , измеренной в этом состоянии. Когда мы будем усреднять матрицу (11.52) между $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, будем получать элемент этой матрицы с индексом 11, то есть $\cos \vartheta$. То есть опять произойдёт простое геометрическое проецирование.

Однако у частицы с $s = 1$ помимо состояний со спином по оси z и против неё есть ещё состояние, где проекция спина на ось z имеет определённое значение, равное нулю.

Можно придумать для него какое-то название, например, что это состояние со спином, перпендикулярным оси z . Но это не очень хорошо, потому что при этом само направление спина не будет являться определённым, только его проекция на ось z , равная нулю. И тем более, если будет $s = \frac{3}{2}, 2$ и т. д., число проекций, которые не являются максимальными, $+s$ и $-s$, будет только увеличиваться. Станет появляться всё больше состояний, про которые мы не будем говорить, что спин куда-то ориентирован.

Договоримся, что для частицы с произвольным спином мы будем понимать выражение, что спин ориентирован вдоль оси \vec{n} , всё равно как состояние, в котором проекция спина на это направление $\hat{s}_{\vec{n}}$ с вероятностью единица имеет значение $+s$. А против оси \vec{n} – как то, в котором она с вероятностью единица имеет значение $-s$. Поэтому только для частиц со спином $\frac{1}{2}$ любое состояние с определённой проекцией на ось \vec{n} является состоянием со спином, ориентированным по или против этой оси. Об этом нужно помнить, когда сообщаем что-то про спиновые состояния частиц высших спинов, как мы их будем называть.

Есть два простых спина. Самый простой из целых $s = 0$, это скалярные частицы, у которых спина просто нет, их волновая функция – просто координатная, без спиновой части. И спин $s = \frac{1}{2}$, самый маленький из полуцелых, для случая которого мы всегда можем сказать, куда направлены спины для любого из базисных спиновых состояний. Для $s = 0$ фраза про ориентацию спина просто не нужна, для $s = \frac{1}{2}$ она имеет строгий смысл, а для остальных спинов её нужно использовать очень аккуратно.

Данную схему можно развить для произвольного спина и решать задачи. Но для этого есть семинар, и на нём мы посмотрим, как применять все алгебраические подходы к произвольным состояниям из нашего базиса для произвольного спина. И сможем убедиться, что вся алгебра работает универсально.

Другие наблюдаемые, не имеющие классического аналога

Вспомнив физику микромира, скажем, что спин – это не единственная наблюдаемая, не имеющая классического аналога, то есть которую нельзя переписать, опираясь на аксиому соответствия, через операторы координаты и импульса, выбранные в том или ином представлении. Введение других величин обычно идёт от физического смысла. В ядерной физике и физике частиц популярной наблюдаемой является изоспин, или изотопический спин. Слово «спин» в его названии присутствует не случайно, ведь изоспин ввели в физику частиц как наблюдаемую с точно такими же алгебраическими свойствами, как и спин.

То есть оператор изоспина \hat{I} – тоже векторный оператор, компоненты которого подчиняются тем же коммутационным соотношениям, что и оператор спина и орбитального момента,

$$[\hat{I}_i, \hat{I}_j] = i\varepsilon_{ijk}I_k \quad (11.53)$$

$$[\hat{I}, \hat{I}^2] = 0 \quad (11.54)$$

Также в физике частиц мы считаем, что изоспин никак не связан с движением частицы в обычном координатном пространстве, то есть этот оператор ещё и коммутирует с операторами координаты и импульса частицы,

$$[\hat{I}_i, x_j] = [\hat{I}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (11.55)$$

Однако, если бы не было и физических отличий, не было бы смысла вводить такую наблюдаемую. Мы считаем, что у неё иной физический статус. В физике частиц очень многие адроны можно рассматривать как разные состояния единого образования с разными проекциями изотопического спина. Наборы таких адронов обычно называют изотопическими мультиплетами.

Например, можно рассмотреть изотопический дублет, который состоит из протона и нейтрона $\begin{pmatrix} p \\ n \end{pmatrix}$. Или взять изотопический триплет π -мезонов $\begin{pmatrix} \pi^+ \\ \pi^0 \\ \pi^- \end{pmatrix}$. π^+ , π^0 , π^- – разные частицы, у них разный электрический заряд. Они скорее описываются в квантовой теории поля, чем в нерелятивистской квантовой механике. Хотя если их скорости будут много меньше скорости света, можно описывать и в ней.

Рассмотрим единое образование, которое назовём пионом,

$$\begin{pmatrix} \pi^+ \\ \pi^0 \\ \pi^- \end{pmatrix} \equiv \pi, \quad (11.56)$$

которое обладает дополнительным изотопическим спином в каком-то дополнительном пространстве. Мы договорились, что спин – это вращение в особенном пространстве. То есть с геометрической точки зрения мы как бы дополняем обычное координатное пространство не только спиновым, но и изоспиновым, и говорим, что у пиона наблюдаемые свойства изменяются в зависимости от проекции изоспина в этом пространстве. Данная проекция как-то связана с электрическим зарядом.

Из физики частиц известно, что, если вводить оператор электрического заряда, он часто подчиняется соотношению Гелл-Мана – Нисидзимы:

$$\hat{Q} = \hat{I}_3 + \frac{1}{2} \hat{Y}, \quad (11.57)$$

где \hat{I}_3 – третья проекция изоспина частицы, а \hat{Y} – оператор гиперзаряда.

Для пионов последний просто ноль, так что у них электрический заряд совпадает с третьей проекцией изоспина. Мы фактически опять вводим выделенное направление в изоспиновом пространстве, ось номер 3, аналог оси z в обычном координатном. Математическое описание изоспина будет таким же, как описание спина. Но всякая наблюдаемая важна из-за физических свойств. Главная мотивация, из-за которой мы ввели понятие изоспина, связана с особым поведением этой наблюдаемой по отношению

к физике сильного ядерного взаимодействия. Мы обнаружили, что в нём эта величина является интегралом движения.

То есть если бы мы написали некий гамильтониан адронной системы, учитывая только сильное взаимодействие и пренебрегая наличием у адронов других, например, электромагнитного и слабого, у получившегося гамильтониана оператор изоспина был бы интегралом движения и явно коммутировал с гамильтонианом. Соответственно, генерируемое оператором изоспина вращение в изоспиновом пространстве было бы симметрией динамики нашего гамильтониана и системы в отсутствие слабого и электромагнитного взаимодействия.

И действительно, у всех компонент одного изотопического мультиплета, например, у π^+ , π^0 , π^- , различие энергий покоя, то есть масс покоя, составляет десятые доли процента по отношению к средней массе мультиплета. Аналогично, хоть протон p и нейтрон n очень разные частицы, у них $\Delta m \approx 940 - 938$ МэВ в процентном соотношении такая же. То есть можно высказать точку зрения, что, если бы получилось выключить в мире электромагнитное и слабое взаимодействия, то π^+ , π^0 , π^- или p и n бы тождественными друг другу частицами, которые нельзя отличить друг от друга никакими измерениями. Ведь мы бы выбросили из физики все наблюдаемые, у которых они имеют различные собственные значения, например, электрический заряд, так как мы не смогли бы измерять эту наблюдаемую.

Это важный момент, потому что группы симметрии динамики влияют на описание системы. Поясним, почему мы время от времени стараемся посмотреть на некоторые разбираемые вещи с точки зрения теории групп, то есть математической теории симметрий. На ранней стадии развития физики частиц физики представляли, что помимо обычного координатного пространства есть особое спиновое пространство, вращение в котором приводит к наличию у частиц спина, особое изоспиновое, вращение в котором приводит к наличию изоспина. На все наблюдаемые такого типа можно смотреть с такой геометрической точки зрения.

Но есть наблюдаемые вроде гиперзаряда, у которого подобная интерпретация будет не очень естественной. Впоследствии у адронов появились наблюдаемые странность, очарование, для которых её предложить тоже не очень легко. Но можно считать, что всякий интеграл движения – это генератор группы симметрии динамики нашей системы. При описании поведения систем мы в первую очередь будем смотреть на то, какие величины в них сохраняются, то есть на эти симметрии. Тогда, если мы будем говорить, что изоспин – это генератор некой группы симметрии динамики нашей системы сильно взаимодействующих частиц, сразу будем понимать, какую роль играет данная наблюдаемая в физике и как эту симметрию использовать в решении конкретных задач. То есть геометрический язык восприятия наблюдаемых, не имеющих классического аналога, был и остаётся очень удобным во многих ситуациях, но подход на уровне симметрий динамики, язык теории групп, в большинстве случаев в физике микромира более естественный, то есть физичный, и понятный. Поэтому мы будем

иногда делать отступления в сторону теории групп. Все задачи курса можно решить без неё, но с ней многие вещи будут восприниматься проще.

После того, как мы разобрались, что у частиц бывают орбитальные моменты, спины, изотопические спины, можем изучать системы, в которых некоторые из этих моментов могут иметь даже общую физическую природу. И спин, и орбитальный момент с точки зрения механики частиц – это компоненты момента количества движения данной системы. Поэтому для частиц со спином, совершающих ещё и движение в обычном трёхмерном пространстве, естественно вводить полный механический момент, являющийся суммой орбитального и спинового. Такие операторы легко определить в пространстве спиновых волновых функций.

Правда, при этом окажется, что состояния с определёнными значениями этого суммарного момента не обязательно будут являться состояниями с определёнными значениями моментов, которые складываются. В атомной и ядерной физике показывали, что состояние даже одного электрона в атоме с полным моментом, являющимся суммой орбитального и спинового, равным $\frac{3}{2}$, не обязательно состояние, например, с орбитальным моментом, равным 1, и спиновым $\frac{1}{2}$. Оно вполне может быть состоянием с $l = 2$ и $s = \frac{1}{2}$.

Чтобы детально выстраивать базисы состояний частиц при учёте разных по своей природе моментов, которые дают вклад в одну и ту же физическую величину, как в случае орбитального и спинового моментов, дающих вклад в полный момент, характеризующий механические свойства данного состояния, нужно уметь складывать моменты количества движения. Мы можем ввести некую математическую теорию моментов, описывающую все величины с алгебраическими свойствами как у операторов моментов, и это будет её разделом.

Сложение моментов

Сформулируем задачу сложения моментов в общем виде. Пусть физическая система состоит из двух «подсистем» I и II (рис. 11.2). Это означает, что пространство состояний всей системы может быть построено как прямое произведение пространств состояний подсистем. А значит, в гильбертовом пространстве чистых состояний системы H существует факторизованный базис, то есть составленный из упорядоченных произведений базисных элементов из H_I и H_{II} соответственно.

Пусть для каждой подсистемы мы можем ввести базисы, являющиеся собственными векторами каких-либо операторов моментов. То есть можно ввести некий момент \hat{J}_I , относящийся к первой подсистеме, и \hat{J}_{II} , относящийся ко второй (рис. 11.2). Говоря, что есть момент \hat{J}_I , относящийся к первой подсистеме, мы имеем в виду, что у первой подсистемы есть наблюдаемая \hat{J}_I , состоящая из трёх компонент, и алгебра операторов этих компонент – это уже знакомая алгебра операторов момента.

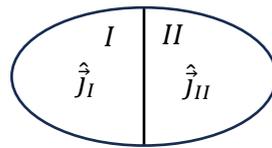


Рис. 11.2. Система из двух подсистем

При этом можно ввести величину полного момента всей системы, векторную сумму

$$\hat{J} = \hat{J}_I + \hat{J}_{II} \tag{11.58}$$

Задача сложения моментов ставится следующим образом. Нужно построить базис в пространстве состояний всей системы с определёнными значениями полного момента в виде линейной комбинации состояний факторизованного базиса. То есть собственные вектора операторов \hat{J}^2 и \hat{J}_z , в идеале полный ортонормированный базис из них, через собственные вектора составляющих моментов, $\hat{J}_I^2, \hat{J}_{Iz}, \hat{J}_{II}^2, \hat{J}_{IIz}$.

Надо построить два оператора через четыре. Для каждой пары мы строим свои собственные вектора. Общие собственные вектора операторов $\hat{J}_I^2, \hat{J}_{Iz}$ – это $|j_I m_I\rangle$. Аналогично, для $\hat{J}_{II}^2, \hat{J}_{IIz}$ – это $|j_{II} m_{II}\rangle$. Если строим их упорядоченные произведения, получаются вектора, занумерованные набором из четырёх квантовых чисел:

$$|j_I m_I j_{II} m_{II}\rangle \equiv |j_I m_I\rangle \cdot |j_{II} m_{II}\rangle \tag{11.59}$$

Это то самое факторизованное состояние, его волновая функция – произведение соответствующих волновых функций.

У \hat{J}^2 и \hat{J}_z мы тоже вводим квантовые числа j и m , но их всего два. Чтобы один базис пересчитывался в другие, у них должно быть одинаковое количество квантовых чисел. Мы можем добавлять квантовые числа, то есть добавлять в каждый набор наблюдаемые, которые коммутируют со всеми введёнными. Это всегда можно делать, когда хотим зафиксировать состояние системы, до тех пор, пока не получится полный набор наблюдаемых. И дальше новую независимую наблюдаемую, коммутирующую с уже введёнными, добавить будет нельзя.

Но мы пока не станем говорить про другие степени свободы и будем считать, что произведение (11.59) однозначно описывает некое состояние нашей системы. Там четыре квантовых числа, поэтому к операторам \hat{J}^2 и \hat{J}_z надо добавить ещё два оператора, коммутирующих с ними. Операторы момента в силу своей природы коммутируют со всеми скалярными операторами по отношению к вращению в том же пространстве. А операторы \hat{J}_I^2 и \hat{J}_{II}^2 , скалярные квадраты операторов момента, это скаляры по отношению к вращению в соответствующих пространствах.

Тогда, если мы к \hat{j}^2 и \hat{j}_z добавим \hat{j}_I^2 и \hat{j}_{II}^2 , ничего не испортим, поскольку эти скалярные операторы коммутируют с $\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z$, а значит, коммутируют с \hat{j}_z и с \hat{j}^2 , составленным из них.

То есть мы обнаруживаем возможность сопоставления двух базисов. Вектора одного нумеруются квантовыми числами $j_I j_{II} j m$, а другого – числами $j_I m_I j_{II} m_{II}$. Базис с векторами $|j_I m_I j_{II} m_{II}\rangle$ мы строим легко, поскольку он строится из базисных элементов двух подсистем. Мы предполагаем, что выстроили описание в каждой подсистеме, а теперь хотим выстроить его для полной системы.

Мы должны дописать линейную связь, разложение векторов первого базиса по векторам второго. Поскольку у них есть совпадающие квантовые числа, они должны совпадать в этом соотношении справа и слева. А сумма должна вестись по несовпадающим, которых нет в первом, по $m_I m_{II}$. И коэффициенты разложения должны зависеть от всех квантовых чисел. Напишем внизу от коэффициента C новые квантовые числа j, m , относящиеся к полному моменту, а вверху квантовые числа m_I, m_{II} , которые являются индексами суммирования и должны пропасть после него. Ещё коэффициент может зависеть от общих квантовых чисел j_I, j_{II} , поэтому напишем их в качестве аргумента. Тогда соотношение для коэффициентов разложения

$$|j_I j_{II} j m\rangle = \sum_{m_I m_{II}} C_{jm}^{m_I m_{II}}(j_I j_{II}) |j_I m_I j_{II} m_{II}\rangle \quad (11.60)$$

Если базисы из векторов $|j_I j_{II} j m\rangle$ и $|j_I m_I j_{II} m_{II}\rangle$ ортонормированные, то коэффициенты разложения всегда можно записать как скалярное произведение. Так что выполняется численное равенство

$$C_{jm}^{m_I m_{II}}(j_I j_{II}) \equiv \langle j_I m_I j_{II} m_{II} | j_I j_{II} j m \rangle \quad (11.61)$$

Поэтому дальше будем говорить, что эти обозначения синонимичные. Они обозначают один и тот же объект, коэффициент разложения состояний первого базиса по состояниям второго. Такие коэффициенты в русскоязычной литературе называют коэффициентами Клебша – Гордана, а на сленге теоретиков «клебшами». Ещё до появления компьютеров были составлены большие таблицы клебшей, они были посчитаны для всех интересующих значений коэффициентов. После появления компьютеров были написаны программы, которые умеют вычислять любые клебши, поэтому их сейчас считают не вручную, а стандартной процедурой, чаще всего на компьютере.

Однако для того, чтобы понимать, откуда они берутся, как устроена вычислительная процедура, мы потренируемся их вычислять. А поняв один раз, вернёмся к общей практике и будем говорить, что их можно найти в таблицах или посчитать с помощью соответствующей программы.

Научиться это делать и вообще понять, как устроена рассмотренная выше процедура, очень важно, потому что именно построение базиса (11.62) и является с точки

зрения квантовой механики решением задачи о сложении двух операторов момента в общий момент. При этом сама процедура определяется только алгебраическими свойствами данных операторов и не зависит от того, что и во что мы складываем. Например, орбитальный и спиновый момент в единый полный момент движения частицы, или два спиновый момента разных частиц в общий спиновый, или орбитальные моменты всех электронов в электронной оболочке атома в общий орбитальный момент электронной оболочки. Более того, если понадобится сложить два изоспина двух разных частиц в составной системе, если, например, нас будет интересовать изотопический момент связанного состояния протон-нейтрон, дейтрона, мы будем пользоваться этой же процедурой. Мы займёмся этим на следующей лекции.

Лекция 12. Сложение моментов

Обратим внимание на два обстоятельства, которые помогут разобраться с этой темой.

Использование арифметики

Первое сводится к прямолинейной арифметике, то есть просто к подсчёту состояний. Пусть есть система, состоящая из двух подсистем, каждая из которых характеризуется оператором момента некоторой физической природы (рис. 12.1).

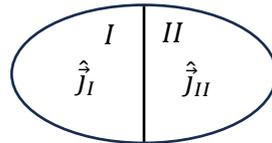


Рис. 12.1. Система из двух подсистем

Важно, что его компоненты удовлетворяют коммутационным соотношениям оператора момента и что для всей системы можно в соответствии с физическим смыслом определить полный момент

$$\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2 \tag{12.1}$$

У нас есть базис, построенный для каждой подсистемы состояний с определёнными значениями квадрата составляющего момента и его проекции на ось z . Пространство состояний системы есть прямое произведение пространств состояний подсистем. Поэтому, упорядоченно перемножая базисные элементы, мы получим базис в пространстве состояний системы, у которого вектора нумеруются квантовыми числами j_1, j_2, m_1, m_2 и, возможно, ещё какими-то дополнительными скалярными квантовыми числами, на которые пока не будем обращать внимания.

Мы хотим построить базис $|jj_1j_2m\rangle$, у которого набор квантовых чисел включает квантовые числа j, m , которые традиционным образом задают квадрат и проекцию на ось z суммарного момента j . Наша задача – научиться строить этот базис из собственных векторов составляющих моментов $|j_1m_1\rangle$ и $|j_2m_2\rangle$. У коэффициентов разложения, которые мы назвали коэффициентами Клебша – Гордана, внизу будут стоять индексы, которые в левых векторах, вверху – которые в правых, а в скобках будут квантовые числа, принадлежащие обоим векторам:

$$|jj_1j_2m\rangle = \sum_{m_1m_{II}} C_{jm}^{m_1m_2}(j_1j_2) |j_1m_1\rangle |j_2m_2\rangle \tag{12.2}$$

Подпространство $|j_1m_1\rangle$ имеет размерность $2j_1 + 1$, а $|j_2m_2\rangle$ размерность $2j_2 + 1$. Поэтому размерность общего пространства состояний, число его независимых базисных элементов – произведение $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. Это число при произвольных j_1 и j_2 не представляется в виде $2j + 1$ ни при каком j . Поэтому не все вектора базиса $|j_1m_1\rangle |j_2m_2\rangle$ принадлежат только одному значению j , есть некий набор значений j , которые

допустимы у векторов базиса $|jj_1j_2m\rangle$. То есть при фиксированных j_1, j_2 общего вида j пробегает некий ограниченный набор значений, точно не равный одному, для этого вместо квантовых чисел придётся поставить нули.

Если в состоянии (12.2) есть некий набор j , для каждого j проекции принимают $2j + 1$ значение. Поэтому должно быть

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = \sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1), \quad (12.3)$$

где j_{\min} и j_{\max} – допустимые значения квантового числа j , которое задаёт собственные значения квадрата момента для суммарного момента при заданных j_1 и j_2 .

Мы уже пользовались этим правилом в атомной и ядерной физике, поэтому знаем, чему равны j_{\min} и j_{\max} . Однако есть ещё одно простое соображение. Связь оператора \hat{j}^2 с операторами \hat{j}_1^2 и \hat{j}_2^2 сложная из-за того, что, когда мы расписывает \hat{j}^2 , там попадаете скалярное произведение $(\hat{j}_1\hat{j}_2)$. А оператор z-проекции суммарного момента \hat{j}_z – просто сумма операторов z-проекции составляющих моментов:

$$\hat{j}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z} \quad (12.4)$$

Более того, это линейный оператор, и вообще, проекция момента, в отличие от его квадрата, аддитивная величина. Так что (12.4) – аддитивная линейная наблюдаемая. Максимальное значение \hat{j}_{1z} – это $+j_1$, максимальное значение \hat{j}_{2z} – это $+j_2$, поэтому максимальное значение их суммы $\hat{j}_{z\max}$ – это $+j_1 + j_2$. Большей проекции у суммарного момента быть не может, но такая есть, и она принадлежит в (12.3) значению $j = j_1 + j_2$. Поэтому верхний предел в сумме в (12.3) – это

$$j_{\max} = j_1 + j_2 \quad (12.5)$$

После этого можно найти j_{\min} чисто арифметически. В (12.3) справа стоит арифметическая прогрессия, и, зная её сумму и последнее слагаемое, несложно подобрать начальное. Мы просто по количеству состояний можем обнаружить, что

$$j_{\min} = |j_1 - j_2| \quad (12.6)$$

На языке линейной алгебры эта арифметика фиксируется следующим образом. Если мы берём пространство состояний нашей подсистемы с определённым значением квантового числа j_1 и прямое произведение на пространство состояний второй подсистемы с определённым значением квантового числа j_2 , это пространство распадается в прямую сумму. В отличие от прямого произведения, где базисы строятся из упорядоченных произведений базисных элементов перемножаемых пространств, прямая сумма – просто пространство, где все складываемые базисы объединены в общий в результате рассмотрения пространства всех возможных линейных комбинаций всех базисных элементов. Оказывается, что эта прямая сумма пространств состояний с определённым значением j как раз в интервале от $|j_1 - j_2|$ до $j_1 + j_2$:

$$(j_1) \times (j_2) = \bigoplus_{|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} (j) \quad (12.7)$$

Можно проверить, что соответствующая сумма арифметической прогрессии (12.3) всегда даёт правильный результат.

Записью (12.7) очень удобно пользоваться, даже если ничего не знать о линейной алгебре, как некоторым мнемоническим правилом сложения моментов.

Задача 1. Полный момент системы двух частиц в состоянии с определённым орбитальным моментом

Пусть есть система из двух частиц, у одной из которых спин $s_1 = \frac{1}{2}$, а у второй $s_2 = \frac{3}{2}$. Мы описываем её в системе отсчёта, связанной с центром масс этих двух частиц, поэтому характеризуем состояния орбитального движения орбитальным моментом относительного движения частиц l . Таким образом, в системе отсчёта центра масс есть три величины, момента, которые характеризуют механический момент этой системы.

Определим оператор полного момента системы как сумму всех составляющих моментов

$$\hat{j} = \vec{l} + \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \quad (12.8)$$

Какими могут быть значения полного момента, квантового числа j , например, у p -состояния этой пары? По спектрографическим обозначениям p -состояние означает, что квантовое число для орбитального момента имеет определённое значение $l = 1$.

Для ответа на вопрос берём прямое перемножение пространств состояний с определёнными значениями составляющих моментов. Нужно сложить $l = 1$ с $s = \frac{1}{2}$ и $s = \frac{3}{2}$. Сначала применим формулу (12.7) к первой паре. $(1) \otimes (\frac{1}{2})$ разлагается в прямую сумму подпространств с определённым суммарным моментом для этой пары моментов, от разности $(\frac{1}{2})$ до суммы $(\frac{3}{2})$. Получается

$$(1) \otimes (\frac{1}{2}) \otimes (\frac{3}{2}) = \left\{ (\frac{1}{2}) \oplus (\frac{3}{2}) \right\} \otimes (\frac{3}{2}) \quad (12.9)$$

Раскроем скобки, работая по тому же принципу. $(\frac{1}{2})$ из скобки умножается на $(\frac{3}{2})$, получается сумма от разности, равной (1), до суммы, равной (2). Для $(\frac{3}{2}) \otimes (\frac{3}{2})$ выходит сумма всех возможных выражений от разности (0) до суммы (3). Тогда из (12.9) получается

$$(1) \oplus (2) \oplus (0) \oplus (1) \oplus (2) \oplus (3) \quad (12.10)$$

Из этого видно, что суммарный момент j системы может принимать значения 0, 1, 2, 3. Также можно понять, что, например, (0) в прямой сумме (12.10), это состояние с определённым моментом $j = 0$, его проекция тоже ноль. То есть это $2j + 1$ состояние содержит одно состояние с моментом ноль. А с полным моментом $j = 1$ три состояния,

но в (12.10) единиц две, поэтому их всего шесть. С полным моментом $j = 2$, аналогично, десять состояний, а с $j = 3$ семь.

То есть, когда мы начинаем думать, как построить базис из состояний с определённым значением суммарного момента, выполнив операцию (12.9), сразу узнаем, какие моменты могут получиться, и сколько базисных состояний приходится на каждое значение момента. Возникает возможность производить это просто на арифметическом уровне.

Умение производить подсчёт состояний очень важно, особенно когда мы начнём изучать многочастичные квантовые системы. Например, в электронной оболочке атома лития три электрона, у них будут складываться три спиновых момента, возникнут разные орбитальные моменты. Из атомной физики известно, что, когда мы изучаем слабые поправки, связанные с релятивистскими эффектами, так называемую тонкую структуру атомных уровней, куда включаются и некоторые другие поправки того же порядка, используем, например, приближение LS -связи. И там при классификации состояний электронной оболочки атома мы прямо выделяем электронные термы, то есть состояния с определёнными значениями суммарных орбитальных и суммарных спиновых моментов электронной оболочки. Это уже связано с физикой того, как между собой взаимодействуют ядро и электроны. Но мы видим, что для реальных систем, с которыми имеем дело, тех же оболочек атомов, процедура сложения моментов оказывается очень важна при классификации реальных физических состояний, которые нам нужны при изучении того же атомного спектра. То есть эта процедура в атомной спектроскопии используется постоянно и должна быть хорошо наработана у тех, кто ей занимается.

Использование алгебры для подсчёта коэффициентов Клебша – Гордана

Это, по сути, использование того, что наши операторы момента имеют строго определённые коммутационные соотношения. Для любого оператора момента

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{j}_k \quad (12.11)$$

$$[\hat{j}_i, \hat{j}^2] = 0 \quad (12.12)$$

Более того, \hat{j}_i коммутирует со всеми скалярными операторами в нашем пространстве.

Также есть повышающий и понижающий операторы для проекции момента, \hat{j}_+ и \hat{j}_- , для которых мы разобрались, как они действуют.

Данная алгебра может быть использована для подсчёта клебшей. Сейчас мало кто считает коэффициенты Клебша – Гордана вручную, потому что они все давно подсчитаны, но в процессе понимания, как всё устроено, надо уметь разбирать хотя бы простейшие примеры с их вычислением. И самый удобный с технической точки зрения путь как раз опирается на алгебраические свойства операторов моментов.

Общая схема выглядит следующим образом. Если происходит сложение моментов подсистем, каждая из которых находится в состоянии с определёнными j_1 и j_2 ,

$(j_1) \otimes (j_2)$, и может получиться набор разных состояний j , технически удобно начать с его максимального значения (12.5). Для этого j_{\max} максимальное значение m тоже равно

$$m_{\max} = +j_1 + j_2 \quad (12.13)$$

Проекция момента m – аддитивная наблюдаемая, сумма j_{1z} и j_{2z} . У векторов значения m , m_1 и m_2 , пробегают значения от $+j_1$ до $-j_1$ и от $+j_2$ до $-j_2$. Набрать такую проекцию можно единственным способом, взяв из (j_1) базисное состояние с определённым моментом j_1 и проекцией $+j_1$, а из (j_2) базисное состояние с моментом j_2 и проекцией $+j_2$.

Договоримся, что состояние с определёнными j_1, m_1, j_2, m_2 мы будем писать как произведение двух векторов. А где четыре индекса в одном векторе, будет состояние с определённым значением полного момента. Тогда единственный способ записать упомянутое состояние

$$|j_1 + j_2 \ j_1 \ j_2 \ j_1 + j_2\rangle = |j_1 + j_1\rangle |j_2 + j_2\rangle \quad (12.14)$$

Вектора $|j_1 + j_1\rangle$ и $|j_2 + j_2\rangle$ из разных пространств, мы просто построили новый базисный вектор $|j_1 + j_1\rangle |j_2 + j_2\rangle$ в пространстве состояний всей системы из прямых произведений векторов состояний подсистем. Первое $j_1 + j_2$ слева – это значение j , второе – значение m вектора слева, а j_1, j_2 посередине тоже входят в полный набор. Справа $+j_1$ в первом векторе – это значение m_1 , а $+j_2$ во втором – значение m_2 .

Коэффициент перед правым выражением в (12.14) единица, мы не можем просуммировать, потому что нет ни одного другого вектора из правого базиса, который сумел бы набрать проекцию, стоящую слева, при этом значении j . Таким образом, для любых j_1, j_2

$$C_{j_1+j_2 \ j_1+j_2}^{j_1 j_2} (j_1 j_2) = 1 \quad (12.15)$$

В верхних индексах (12.15) j_1 – это m_1 , j_2 – это m_2 , в нижних первое $j_1 + j_2$ – это m , второе – это j .

Стоит сказать, что бывают состояния без определённого значения составляющего момента.

Подействуем на равенство (12.14) оператором \hat{j}_- . Он действует на собственный вектор оператора момента $|jm\rangle$ по правилу

$$\hat{j}_- |jm\rangle = \sqrt{(j+m)(j+1-m)} |j \ m-1\rangle \quad (12.16)$$

Применив эту формулу к (12.14), получим вектор, где в наборе из четырёх индексов четвёртый понизился на единицу,

$$\sqrt{(j_1 + j_2) \cdot 1} |j_1 + j_2 \ j_1 \ j_2 \ j_1 + j_2 - 1\rangle \quad (12.17)$$

С другой стороны,

$$\hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y, \quad (12.18)$$

а \hat{j}_x и \hat{j}_y – тоже аддитивные наблюдаемые, то есть можно записать $\hat{j}_x = \hat{j}_{1_x} + \hat{j}_{2_x}$ и $\hat{j}_y = \hat{j}_{1_y} + \hat{j}_{2_y}$. Тогда

$$\hat{j}_- = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-} \quad (12.19)$$

Когда мы подействуем суммой (12.19) на правую часть (12.14), получим два слагаемых. \hat{j}_{1-} подействует только на $|j_1 + j_1\rangle$, а \hat{j}_{2-} только на $|j_2 + j_2\rangle$. По формуле (12.16) они выдадут

$$\sqrt{2j_1}|j_1 j_1 - 1\rangle|j_2 j_2\rangle + \sqrt{2j_2}|j_1 j_1\rangle|j_2 j_2 - 1\rangle \quad (12.20)$$

Видно, что вектор из (12.17), у которого проекция на единицу меньше максимальной, уже не является однозначно записанным через произведение. Он распадается в сумму двух, потому что $j_1 + j_2 - 1$ теперь можно набрать двумя способами, как $j_1 - 1 + j_2$ и $j_1 + j_2 - 1$. Разделим (12.20) на общий множитель из (12.17) и получим

$$|j_1 + j_2 j_1 j_2 j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 j_1 - 1\rangle |j_2 j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2 - 1\rangle \quad (12.21)$$

Корни $\sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}$ и $\sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}$ – это коэффициенты Клебша – Гордана, посчитанные в общем виде, с произвольными j_1 и j_2 :

$$\sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} = C_{j_1 + j_2 j_1 + j_2 - 1}^{j_1 - 1 j_2} (j_1 j_2) \quad (12.22)$$

$$\sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} = C_{j_1 + j_2 j_1 + j_2 - 1}^{j_1 j_2 - 1} (j_1 j_2) \quad (12.23)$$

Если подействуем оператором \hat{j}_- ещё раз, уже на (12.21), построим вектор, у которого четвёртым коэффициентом будет $j_1 + j_2 - 2$. Теперь мы будем действовать суммой $\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ на сумму двух слагаемых, и в результате может возникнуть до четырёх, в зависимости от конкретной конструкции.

Оператор \hat{j}_- , не трогая квантовое число j , понижает проекцию. Поэтому, действуя им, мы постепенно пройдем все возможные проекции для значения $j = j_1 + j_2$. Если j целые, то мы в какой-то момент попадем в 0 и пойдём дальше до $|j_1 - j_2|$, если полуцелые, то перешагнем через него. Но писать коэффициенты Клебша – Гордана для отрицательных проекций отдельно уже не нужно, их можно записать просто по симметрии. То есть мы можем выстроить все коэффициенты Клебша – Гордана для полного $j = j_1 + j_2$.

Но ведь есть и другие значения момента j . Например, проекция $j_1 + j_2 - 1$ есть у состояния $|j_1 + j_2 - 1 j_1 j_2 j_1 + j_2 - 1\rangle$. И его мы не разложили, действуя оператором \hat{j}_- . Но это комбинация тех же самых базисных векторов. Мы ориентируемся на проекцию и говорим, что это линейная комбинация двух проекций из факторизованного базиса. Ведь

мы строим вектора нефакторизованного базиса с определённым значением полного момента через вектора факторизованного базиса, состоящего из произведений. Чтобы набрать полную проекцию $j_1 + j_2 - 1$, можно складывать либо $j_1 - 1 + j_2$, либо $j_1 + j_2 - 1$. Так что всё равно будет

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \alpha |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + \beta |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle, \quad (12.24)$$

α и β – некие коэффициенты.

Вектор $|j_1 + j_2 - 1, j_1 j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$ ортогонален $|j_1 + j_2, j_1 j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$, поскольку это два собственных вектора, относящихся к разным собственным значениям $j_1 + j_2$ и $j_1 + j_2 - 1$ одного эрмитова оператора \hat{j}^2 . Поэтому их скалярное произведение равно нулю. А оно через координаты в евклидовых пространствах вычисляется как сумма соответствующих произведений координат, $(a\vec{e}_x + b\vec{e}_y)(c\vec{e}_x + d\vec{e}_y) = ac + bd$. Поэтому

$$\alpha \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} + \beta \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} = 0 \quad (12.25)$$

$\frac{1}{\sqrt{j_1 + j_2}}$ будет общим множителем,

$$\alpha \sqrt{j_1} + \beta \sqrt{j_2} = 0 \quad (12.26)$$

Ещё из условия нормировки известно, что сумма квадратов модулей коэффициентов разложения нормированного на единицу базисного вектора по нормированным базисным векторам

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (12.27)$$

Уравнений (12.26) и (12.27) хватит, чтобы найти α и β с точностью до общего фазового множителя, а его у базисных элементов всегда можно переопределить, это не повлияет на пригодность базиса к использованию для разложения произвольного вектора.

Таким образом, схема очень простая. Мы сначала пишем состояния с максимальным моментом и максимальной проекцией момента, для которого коэффициент Клебша – Гордана равен единице, его мы просто записываем. Дальше, действуя оператором \hat{j}_- , проходим весь ряд, отвечающий одному значению j и всем его возможным проекциям. А потом для соседнего j начинаем строить разложение через коэффициенты, опираясь на свойства ортогональности и нормировки. Когда мы построим хотя бы один вектор (12.24), найдём α и β , дальше опять вооружимся оператором \hat{j}_- и построим ещё один столбик коэффициентов Клебша – Гордана, уже отвечающих суммарному моменту $j = j_1 + j_2 - 1$. А когда захотим строить $j = j_1 + j_2 - 2$, нужно будет делать вектора нового базиса ортогональными уже к двум векторам. Начинает появляться всё больше уравнений. В действительности они все выстраиваются алгебраически.

Ради этого мы изучали данную схему в общем виде, хоть это долго и неудобно. Теперь мы видим, что процедура состоит из того, что мы стартуем с одного очевидного состояния, а потом, пользуясь понижающими операторами и соотношениями ортогональности и нормировки, выстраиваем все остальные, действуя чисто алгебраическими методами.

Теоретики вручную посчитали не только все коэффициенты Клебша – Гордана, использующиеся в алгоритме сложения двух моментов, но и их аналоги для сложения трёх моментов, $3j$ -символы, а потом и $4j$ -символы. Таблица $3j$ -символов есть даже в учебнике Ландау-Лифшица, он их использует в некоторых примерах.

Правда, чем больше j_1 и j_2 , тем больше будет векторов базиса, и тем длиннее будет описанная процедура. Однако она очень алгоритмична, её легко запрограммировать, и в современных пакетах все программы для подсчёта этих коэффициентов написаны.

Приведём ещё один пример того, как можно работать с подобными процедурами в разных задачах, чтобы ещё раз увидеть, что вся эта алгебра работает для произвольного оператора момента, не обязательно момента количества движения.

Задача 2. Сложение изоспинов и сечение рассеяния для рождения частиц

Для описания процессов рассеяния экспериментаторы часто используют такую величину, как сечение рассеяния. Пусть есть изотопически симметричная нуклонная мишень, то есть в ней почти поровну нейтронов и протонов. На ускорителе сформировали пучок π^+ -мезонов, и им просвечивают мишень, вызывая в ней какие-то реакции (рис. 12.2).



Рис. 12.2. Пучок пионов попадает в нуклонную мишень

Мы будем видеть в основном реакции π^+n и π^+p , но их результат сильно зависит от энергии налетающего пучка π^+ -мезонов. Из физики частиц известно, что можно подобрать энергию так, чтобы возник резонанс. Какая-нибудь частица, энергия покоя которой будет равняться энергии пары в системе центра масс π^+ и нуклона, скорее всего барион, может рождаться с увеличенной частотой. У сечения в этом случае будет резонансное возрастание.

Пусть энергия налетающих π^+ -мезонов подобрана так, что мы наблюдаем резонансное рождение Δ^+ -резонансов. В соответствии с законом сохранения зарядов, при столкновении π^+ и протона p рождается Δ^{++} -резонансный барион, а при столкновении π^+ и нейтрона n рождается Δ^+ :



Выход будет пропорционален сечению.

Попасть одновременно в резонанс не сложно, потому что пионы, нуклоны и Δ -резонансы – изотопические партнёры. Расщепление масс между Δ^+ и Δ^{++} очень маленькое, десятые доли процента, как и у n и p , а в налетающем пучке только π^+ . Поэтому вполне возможно наблюдать резонансное рождение одного и другого.

Но экспериментаторы могут спросить теоретиков, чего будет больше и во сколько раз при одинаковом числе n и p в мишени. Казалось бы, это задача физики элементарных частиц, надо писать лагранжианы и гамильтонианы, чтобы понять, какое взаимодействие работает. Но на самом деле из неё известно, что во взаимодействии адронов всегда доминирует сильное взаимодействие. Δ -резонансы – одни из самых низших по энергиям барионные резонансы, это физика лёгких кварков. И там вклад электромагнитного и слабого взаимодействия гораздо меньше вклада сильного.

Поэтому при расчёте сечения можно будет пользоваться в основном последним. А оно, как учили в физике ядра и частиц, обладает свойством изотопической инвариантности, не различает изотопических партнёров. С точки зрения изотопического сильного взаимодействия реакции (12.28) и (12.29) совершенно одинаковые.

Сечение будет одинаковым у всякой пары, у которой открыт канал сильного взаимодействия для рождения соответствующего резонанса. И в сильном взаимодействии сохраняется изоспин, так что, чтобы оно сработало, изоспин конечного состояния должен равняться изоспину начального. В канале, который идёт с изменением изоспина, реакции по сильному взаимодействию не будет, только существенно меньшие вклады других взаимодействий, например, слабого или электромагнитного.

Все частицы в данной задаче обладают изотопическим спином. Изодублет из протона и нейтрона (n, p) – это состояние с изоспином $I = \frac{1}{2}$, так как у протона проекция $I_3 = +\frac{1}{2}$, а у нейтрона $I_3 = -\frac{1}{2}$. Пионы на самом деле – триплет (π), три состояния π^+, π^0, π^- , состояние с изоспином $I = 1$ и проекциями изоспина $I_3 = +1, 0, -1$.

Дельта-резонансов бывает четыре, помимо Δ^+ и Δ^{++} ещё существуют Δ^0 и Δ^- . Они образуют изотопический квадруплет и отвечают изоспину $I = \frac{3}{2}$. У Δ^{++} проекция изоспина $I_3 = +\frac{3}{2}$, у Δ^+ $I_3 = +\frac{1}{2}$, у Δ^0 $I_3 = -\frac{1}{2}$, у Δ^- $I_3 = -\frac{3}{2}$.

Кстати, для всех адронов работает соотношение Гелл-Мана – Нисидзимы

$$Q = I_3 + \frac{Y}{2}, \quad (12.30)$$

где Q – электрический заряд, Y – гиперзаряд. Причём для нашего сектора лёгких кварков, где фактически только u - и d -кварки, можно написать вместо Y барионное число B . Барионный заряд у пионов равен нулю, поэтому для них $Q = I_3$.

Это соотношение – одно из основных полуэмпирических соотношений, которое было написано ещё до появления кварковой модели. Потом при её построении Гелл-

Манн использовал его как информацию, на которую можно опереться, потому что оно выполнялось для всех известных ему адронов. Это соотношение связывает электрический заряд с третьей компонентой изоспина у каждого изотопического мультиплета.

Все изомультиплеты характеризуются очень малым расщеплением масс внутри мультиплета, на уровне десятых долей процента, и одинаковостью свойств разных частиц по отношению к сильному взаимодействию. То есть возникает ощущение, что, если бы мы выключили электромагнитное и слабое взаимодействия, то π^+ , π^0 , π^- стали бы неразличимыми частицами. Сильное не различает ни их, ни нейтроны и протоны, ни Δ^+ и Δ^{++} .

Но посмотрим на изоспин, который у дельта-резонансов $I = \frac{3}{2}$. Рассказанного до этого и знания, что изоспин обладает такой же алгеброй, как операторы момента, достаточно для решения заявленной задачи. Пионы имеют изоспин $I = 1$, нуклоны $I = \frac{1}{2}$, поэтому состояния системы взаимодействующих частиц пион-нуклон – те, которые получаются при их суммировании. То есть система $|\pi N\rangle$ может иметь значения изоспинов от разности до суммы с шагом через единицу, то есть $I = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$.

Разберёмся, какие это состояния, с точки зрения значений изоспина $|\pi^+ p\rangle$. Здесь могут быть состояния с изоспином $I = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$, но посмотрим на его проекцию. У π^+ проекция $I_3 = +1$, у p проекция $I_3 = +\frac{1}{2}$. Это аддитивная наблюдаемая, поэтому у $|\pi^+ p\rangle$ $I_3 = +\frac{3}{2}$. У изоспина $I = \frac{1}{2}$ такой проекции быть не может, поэтому

$$|\pi^+ p\rangle = \left| I = \frac{3}{2}, I_3 = +\frac{3}{2} \right\rangle \quad (12.31)$$

Получилось состояние пион-нуклонной системы с максимальным моментом и максимальной проекцией, которое реализуется единственным образом, как

$$\left| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle = |\pi^+\rangle \cdot |p\rangle \quad (12.32)$$

Подействуем на (12.32) оператором \hat{I}_- для суммарного изотопического момента:

$$\hat{I}_- \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle = \sqrt{\left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2}\right)\left(\frac{3}{2} + 1 - \frac{3}{2}\right)} \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{3} \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \quad (12.33)$$

С другой стороны, \hat{I}_- можно записать как сумму понижающего оператора для проекции пионного и нуклоного изоспинов:

$$\hat{I}_- = \hat{I}_{\pi-} + \hat{I}_{N-} \quad (12.34)$$

Когда $\hat{I}_{\pi-}$ подействует на $|\pi^+\rangle$ в (12.32), он переделает его в $|\pi^0\rangle$, вытаскив $\sqrt{(1+1)(1+1-1)} = \sqrt{2}$. А \hat{I}_{N-} , действуя на $|p\rangle$, превращает проекцию $+\frac{1}{2}$ в $-\frac{1}{2}$,

получается нейтронное состояние $|n\rangle$ с коэффициентом $\sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2} + 1 - \frac{1}{2}\right)} = 1$. Из (12.32) получается

$$\sqrt{2}|\pi^0\rangle \cdot |p\rangle + |\pi^+\rangle \cdot |n\rangle \quad (12.35)$$

Таким образом, мы узнали, что состояние с изоспином $I = \frac{3}{2}$ и проекцией изоспина $I_3 = +\frac{1}{2}$ может быть как $|\pi^0\rangle \cdot |p\rangle$, так и $|\pi^+\rangle \cdot |n\rangle$, причём мы знаем, с какими весами:

$$\left|\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|\pi^0p\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|\pi^+n\rangle \quad (12.36)$$

Также проекция $+\frac{1}{2}$ может быть у состояния $\left|\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right\rangle$. В системе пион-нуклон, чтобы её набрать, всё равно нужно взять либо $|\pi^0p\rangle$, либо $|\pi^+n\rangle$. Так что вектор $\left|\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right\rangle$ тоже будет разлагаться по этим двум состояниям с какими-то коэффициентами α и β . При этом он должен быть ортогонален вектору (12.36) и нормирован на единицу, то есть сумма квадратов коэффициентов должна быть равна единице. Первое условие (12.25) даёт

$$\alpha\sqrt{\frac{2}{3}} + \beta\sqrt{\frac{1}{3}} = 0, \quad (12.37)$$

из чего получается

$$\beta = -\alpha\sqrt{2} \quad (12.38)$$

А второе (12.27) даст

$$|\beta|^2 + 2|\alpha|^2 = 1 \quad (12.39)$$

Выберем фазу так, чтобы β было вещественным положительным числом, тогда единственный вариант

$$\left|\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}}|\pi^0p\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|\pi^+n\rangle \quad (12.40)$$

Если нужно, можно перевернуть эти соотношения. Если умножить (12.36) на $\sqrt{\frac{2}{3}}$, а второе на $-\sqrt{\frac{1}{3}}$ и сложить, из первых слагаемых получится $\left(\frac{2}{3} + \frac{1}{3}\right)|\pi^0p\rangle = 1|\pi^0p\rangle$, а вторые слагаемые сократятся. То есть можно построить обратные соотношения, которые скажут, что

$$|\pi^0 p\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left| \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left| \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle \quad (12.41)$$

А чтобы получить интересующее нас состояние системы $|\pi^+ n\rangle$, нужно умножить (12.36) на $\sqrt{\frac{1}{3}}$, а (12.40) на $\sqrt{\frac{2}{3}}$. Будет

$$|\pi^+ n\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \left| \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left| \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle \quad (12.42)$$

Теперь мы знаем, что в реакциях (12.28) и (12.29) Δ -резонанс всегда обладает изоспином $I = \frac{3}{2}$. Реакция идёт по каналу сильного взаимодействия, если начальное состояние тоже обладает изоспином $\frac{3}{2}$. В реакции (12.28) состояние $|\pi^+ p\rangle$ с вероятностью 100% состояние с изоспином $I = \frac{3}{2}$. Поэтому все сталкивающиеся пары $\pi^+ p$ имеют разрешение родить Δ -резонанс по каналу сильного взаимодействия.

А пары $\pi^+ n$ с вероятностью $\frac{1}{3}$ имеют изоспин $I = \frac{3}{2}$, а с вероятностью $\frac{2}{3}$ – изоспин $I = \frac{1}{2}$, квадраты модулей коэффициентов в (12.42). То есть только третья часть пар $\pi^+ n$, сталкивающихся в мишени, может родить Δ^+ , для остальных это запрещено законом сохранения изоспина для сильного взаимодействия.

При изотопически симметричной мишени количество столкновений будет одинаково, но Δ^{++} всегда будет рождаться, если провзаимодействовали π^+ и p , а Δ^+ только в одной трети случаев, если столкнулись π^+ и n . Ошибка в этой области энергии от силы процент, постоянная тонкой структуры, энергии достаточно низкие.

Мы использовали для расчёта только ту физическую информацию о взаимодействии, что в сильном взаимодействии сохраняется изоспин, и что сильное взаимодействие в этой области энергий намного сильнее электромагнитного и тем более слабого. А остальное получилось с помощью процедуры нахождения коэффициентов Клебша – Гордана.

Этот пример показал, как можно на основе тех громоздких выкладок с множеством букв и индексов посчитать в компактном виде что-то, имеющее прозрачный практический смысл, и как умение складывать моменты может пригодиться в практических задачах.

Мы должны будем существенно расширить понимание процедуры вычисления коэффициентов Клебша – Гордана в следующем семестре, потому что при рассмотрении многочастичных систем довольно часто придётся строить состояния с определёнными значениями суммарных моментов. Когда мы будем строить состояния, например, систем электронов, должны будем вспомнить ещё и про то, что в квантовой теории называют принципом неразличимости тождественных частиц.

Таковыми в микромире мы будем называть частицы с определёнными значениями массы, спина и зарядов по отношению ко всем взаимодействиям. Масса в релятивистской теории – квадрат собственной энергии, и спин – квадрат собственного момента количества движения, это операторы Казимира группы Пуанкаре, группы пространства временных симметрий нашей теории. Заряды – это операторы, которые строятся из генераторов преобразований внутренних симметрий. Мы видели, что, например, оператор электрического заряда строился из изотопического спина I и гиперзаряда Y – генераторов группы симметрии динамики стандартной модели в электрослабом секторе. У модели Салама-Вайнберга группы симметрии динамики SO_2 – изотопическая группа изоспина на Y_1 гиперзарядовую. Это четырёхмерная группа, у которой четыре генератора имеют именно такой смысл, I_1, I_2, I_3, Y .

И когда мы будем строить всё по-настоящему, должны будем учитывать ещё и неразличимость тождественных частиц, то есть запретить существование наблюдаемых, измерение которых помогло бы отличить один электрон от другого, потому что в эксперименте это не получается. Как выражались 1930-е годы, мы не можем поставить на электрон метку. Если мы увидим два электрона в системе, отвернёмся на минуту и снова их увидим, не сможем сказать, какой есть какой.

Это повлияет и на многие процедуры, связанные с построением собственных векторов разных наблюдаемых, в том числе операторов момента. Поэтому, если мы будем говорить о теории групп, помимо группы моментов SO_2 , группы спина и изоспина, любой группы, которая допускает целые и полуцелые моменты, появятся разные группы перестановок частиц, которые тоже будут включаться в группы симметрии динамики. А каждый раз, когда в них что-то включается, это накладывает некоторые ограничения на изучаемые нами состояния квантовых систем и в то же время даёт инструмент работы с анализом этих состояний. Таким образом, мы обсудили всё, что нужно знать про сложение моментов, но как только начнём рассматривать многочастичные системы, откроем для себя в этой процедуре много нового.

Стоит сказать, что весь алгоритм симметрично выворачивается. Мы стартовали с состояния с максимальной проекцией момента и понижали её понижающим оператором, а можно было стартовать с минимальной и повышать с помощью повышающего. Получились бы точно те же базисы и коэффициенты Клебша – Гордана.

Начнём обсуждение следующей темы, которая пристыковывается к главе про сложение моментов. Мы уже немного обсудили её в качестве частного примера. В этом семестре мы в основном изучаем одночастичные задачи и, казалось бы, обречены складывать, например, орбитальный и спиновый моменты одной частицы. Но из опыта понятно, что многие двухчастичные задачи можно свести к одночастичной, если это не система тождественных частиц, где надо знать, какие требования на состояния системы накладывает принцип неразличимости.

Сведение системы двух разных частиц, чувствительных к спину, к одночастичной

Чтобы зафиксировать, что частицы разные, можно сделать так, чтобы они по-разному входили в гамильтониан, например, чтобы их характеризовали разные константы. Пусть у них будут разные массы m_1 и m_2 и, соответственно, разные кинетические энергии $\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1}$ и $\frac{\hat{p}_2^2}{2m_2}$. Чтобы система была нетривиальной, добавим в неё потенциальное взаимодействие между частицами. Потенциальная энергия зависит только от расстояния между частицами, $V(|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|)$, где \hat{r}_1 и \hat{r}_2 – их операторы координаты.

Пусть частицы имеют спин $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$. Мы хотим, чтобы их взаимодействие было чувствительно к спину. Для этого нужно составить оператор, который будет содержать спиновые операторы этих частиц, но при этом являться скаляром, чтобы не нарушить фундаментальные симметрии в модели, вводить слабые взаимодействия пока рано. Способов построить скаляр из двух спиновых операторов не очень много. Квадрат каждого спинового оператора является скаляром, но это не интересно, потому что в пространстве состояний частиц с таким спином он оказывается кратен единичному оператору. Так что добавим во взаимодействие конструкцию $1 + \alpha \hat{s}_1 \hat{s}_2$, где \hat{s}_1 и \hat{s}_2 – операторы спина частиц. Теперь частицы с сонаправленными и противоположно направленными спинами будут взаимодействовать по-разному. Если α – маленькое число, это будет маленькая поправка, но мы не будем накладывать на него ограничений.

В целом гамильтониан получится

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|)(1 + \alpha \hat{s}_1 \hat{s}_2) \quad (12.43)$$

Это стационарная система. Рассмотрим, как исследовать её состояние. Как и в теоретической механике, первым делом мы хотим свести эту двухчастичную задачу к одночастичной. Задача о движении двух тел всегда сводится к задаче о движении μ -точки.

У нас есть набор операторов $\hat{r}_1, \hat{p}_1, \hat{s}_1, \hat{r}_2, \hat{p}_2, \hat{s}_2$, характеризующий эту систему. Он не очень удобный, поэтому введём другие операторы. Вместо \hat{r}_1 и \hat{r}_2 введём оператор координаты центра масс

$$\hat{R} = \frac{m_1 \hat{r}_1 + m_2 \hat{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (12.44)$$

Из теоретической механики известно, что канонически сопряжённой импульсной переменной к координате центра масс является полный импульс системы. Тогда канонически сопряжённым оператором, таким, у которого коммутатор с компонентами \hat{R} будет как раз каноническим коммутационным соотношением, то есть чтобы $[X, P]$ коммутировали на $i\hbar$, будет оператор суммарного импульса

$$\hat{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad (12.45)$$

Дополним координату (12.44) координатой

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (12.46)$$

и построим канонически сопряжённый оператор импульса, который будет импульсом относительного движения,

$$\hat{p} = \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2} \quad (12.47)$$

Мы хотим, чтобы это была каноническая замена переменных, то есть чтобы новые переменные обладали правильными каноническими коммутационными соотношениями

$$[\hat{R}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (12.48)$$

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (12.49)$$

и чтобы разделились координаты, то есть чтобы вместо координат первой и второй частиц, \vec{r}_1 и \vec{r}_2 , появилась относительная координата \hat{R} и координата центра масс \vec{r} .

Можно выполнить преобразование, но мы его просто запишем. Например, сумма кинетических энергий $\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2}$ преобразуется в $\frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu}$, где $M = m_1 + m_2$, полная масса системы, а $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$, её приведённая масса. А в потенциальной энергии возникнет просто $V(|\vec{r}|)$. То есть для μ -точки движение в центрально-симметричном поле, а для центра масс свободное движение:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(|\vec{r}|)(1 + \alpha \hat{s}_1 \hat{s}_2) \quad (12.50)$$

Но в спиновой части гамильтониана (12.50) частицы по-прежнему перепутаны. То есть мы вроде перешли к изучению движения центра масс и μ -точки по-отдельности, но конструкция $1 + \alpha \hat{s}_1 \hat{s}_2$ мешает, потому что по-прежнему различает частицы, – спиновые операторы \hat{s}_1 и \hat{s}_2 как были независимыми, так и остались. Логично воспользоваться процедурой сложения моментов и перейти к новым спиновым операторам.

Введём оператор полного спина

$$\hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2 \quad (12.51)$$

Возведём его в квадрат, воспользовавшись биномом Ньютона. Это можно сделать, так как операторы \hat{s}_1 и \hat{s}_2 относятся к разным нетождественным частицам и точно независимы, вследствие чего коммутируют. Так что в перекрёстном слагаемом будет $2\vec{s}_1 \vec{s}_2$, а не $\vec{s}_1 \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \vec{s}_1$, как для некоммутирующих переменных, и получится

$$\hat{S}^2 = \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\vec{s}_1 \vec{s}_2 \quad (12.52)$$

Если спины частиц нам известны, то есть, например, как здесь, $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$, то оператор \hat{S}_1^2 – это $\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)$, то есть произведение $\frac{3}{4}$ на единичный оператор в нашем пространстве состояний. Также выражается и \hat{S}_2^2 . Тогда

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{2} + 2\vec{S}_1\vec{S}_2 \quad (12.53)$$

И (12.50) можно записать как

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(|\vec{r}|) \left(1 - \frac{3}{4}\alpha + \frac{\alpha}{2}\hat{S}^2 \right) \quad (12.54)$$

Теперь действительно можно говорить, что стационарные функции, то есть собственные функции этого гамильтониана, можно факторизовать и записать как произведение координатной части, являющейся функций от \vec{r} и \vec{R} , – а поскольку гамильтонианы явно распадаются, мы сможем ещё и разделить в этой задаче переменные, – на некую спинорную конструкцию, которая описывает спиновое состояние системы как состояние с определённым значением полного спина S и его проекцией на ось z M_S . Будет

$$\psi = \phi(\vec{r}, \vec{R}) X_{SM_S} \quad (12.55)$$

Возьмём этот базис, который строится по нашей процедуре через коэффициенты Клебша – Гордана. Частицы спина $s = \frac{1}{2}$, ставим каждой в соответствие базисные спиноры $\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ и из их комбинации строим любое спиновое состояние одной частицы. Пространство спиновых состояний двух частиц будет составлено из упорядоченных произведений двух спиноров, то есть состояний

$$X = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix}, \quad (12.56)$$

где мы договорились, что первый спинор описывает состояние первой частицы, а второй – состояние второй.

Мы можем построить конструкции, которые будут собственными конструкциями операторов \hat{S}^2 и \hat{S}_z , и тогда все спиновые части в (12.55) будут не из базиса (12.56), а из базиса с определённым значением суммарных моментов (12.51). Это уже будут не произведения отдельных спиноров, а какие-то их комбинации, но зато мы сможем строить в виде (12.56) все собственные функции нашего гамильтониана.

Мы ещё вернёмся к этому примеру, но уже на следующих занятиях.

Лекция 13. Приближённые методы решения задач

На прошлых занятиях мы подробно разбирали процедуру сложения моментов. И поскольку там сосредоточились на алгебре, связи базисов, немного отвлеклись от основной темы семестра – стационарных квантовых систем. Главной задачей при их изучении является стационарное уравнение Шредингера,

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (13.1)$$

Уже умея работать со сложением моментов, рассмотрим пример, который напомним, что нам надо уметь строить полные ортонормированные базисы, гамильтонианы и наборы удобных для нас операторов, коммутирующих с этим гамильтонианом. И надо, чтобы этот базис был полным ортонормированным, чтобы могли по нему разложить любое чистое состояние системы. Ведь если мы такое сделали для некой стационарной системы, то фактически знаем про неё всё, ведь остальное становится делом даже не алгебры, а арифметики.

Задача. Базис общих собственных функций наблюдаемых для нерелятивистского позитрония

Вернёмся к одному из примеров, которые мы начинали разбирать, сделав его более конкретным. Возьмём систему, которую называют нерелятивистский позитроний. Позитроний – это связанное состояние электрона и позитрона e^-e^+ . Данная система не является по-настоящему нерелятивистской, ведь даже если энергии частиц таковы, что их скорости много меньше скорости света, и они действительно двигаются как нерелятивистские частицы, то, если у них есть какое-либо перекрытие волновых функций, всегда есть вероятность аннигиляции. А когда электрон и позитрон аннигилируют с порождением, например, пары гамма-квантов, это точно не нерелятивистский процесс.

Но мы сейчас пренебрежём аннигиляцией. Тогда низшие энергетические состояния такой системы можно рассматривать как нерелятивистские, ведь мы фактически предлагаем приближение, в рамках которого нестационарную с учётом возможности аннигиляции систему превратили в стационарную. Задачу о нерелятивистском позитронии обычно и решают именно в рамках нерелятивистской механики.

e^- и e^+ – разные частицы, в нерелятивистском случае у них доминирует кулоновское притяжение. Гамильтониан этой системы в нерелятивистском приближении состоит из суммарной кинетической энергии и потенциальной энергии взаимодействия, сводящейся к кулоновскому притяжению:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|} \quad (13.2)$$

Заряды частиц одинаковые по модулю, массы тоже, но они не тождественны. Спин обеих частиц $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$. Строя собственные функции гамильтониана, можно построить много разных волновых функций, но нам во многих ситуациях удобно изучать замкнутые квантовые системы в состояниях с определённым полным моментом количества движения. Здесь оператор полного момента количества движения – сумма орбитального момента, который, если вспомнить нерелятивистскую механику, можно разбить на орбитальный момент относительного движения, который здесь обозначим \hat{l} , и орбитальный момент системы \hat{L} , связанный с движением центра масс, и спиновых моментов обоих электронов:

$$\hat{J} = \hat{l} + \hat{L} + \hat{s}_1 + \hat{s}_2 \quad (13.3)$$

Для замкнутой системы всегда возможно перейти в систему отсчёта, в которой орбитальный момент равен нулю. И даже в ту, где её импульс равен нулю. Надо перейти в систему отсчёта, связанную с центром масс. Мы всегда можем применить такую опцию, ведь пока мы не учитываем внешнее влияние на эту пару, изучать движение центра масс данной системы даже не интересно. В классическом случае будет равномерное прямолинейное движение, в квантовом она будет находиться в состоянии с определённым полным импульсом системы как целого.

Итак, перейдём в систему центра масс, где (13.3) редуцируется до

$$\hat{l} + \hat{s}_1 + \hat{s}_2 \quad (13.4)$$

Поставим задачу следующим образом. Будем искать состояния с определённым значением \hat{J}^2 и \hat{J}_z , как обычно для момента количества движения. Рассмотрим, какие ещё наблюдаемые, отличные от нуля в системе центра масс, могут быть определены одновременно с этими. Раз мы туда включили \hat{J}^2 и \hat{J}_z , надо брать величины, скалярные по отношению ко всем вращениям и в координатном, и в спиновом пространствах. Таковыми удобно выбрать оператор квадрата орбитального момента количества движения \hat{l}^2 и оператор полного спина

$$\hat{S} \equiv \hat{s}_1 + \hat{s}_2 \quad (13.5)$$

Мы считаем, что значения \hat{s}_1^2 и \hat{s}_2^2 полностью определены, потому что это частицы спина $s = \frac{1}{2}$. Но здесь даже не будем включать его в полный набор наблюдаемых, как бы говоря, что, раз это система частиц спина $\frac{1}{2}$, мы подразумеваем, что \hat{s}_1^2 и \hat{s}_2^2 с собственными значениями $\frac{3}{4}$ уже в него включены. Ведь мы их не можем поменять: если изменим спин, частицы перестанут быть электроном и позитроном, это будет уже другая по физическому содержанию система.

Итак, надо найти полный ортонормированный базис общих собственных функций набора наблюдаемых $\hat{H}, \hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2$, то есть базис, каждая волновая функция которого является собственной функцией полного набора наблюдаемых.

Как мы уже обсуждали на прошлой лекции, проще всего перейти к новым переменным, чтобы переменные в этой задаче разделялись. Из опыта классической механики мы знаем, как неразделяющиеся переменные $\hat{r}_1, \hat{r}_2, \hat{p}_1, \hat{p}_2$ превратить в разделяющиеся.

Координата центра масс с учётом равенства масс частиц

$$\hat{R} = \frac{\hat{r}_1 + \hat{r}_2}{2} \quad (13.6)$$

Относительная координата

$$\hat{r} = \hat{r}_1 - \hat{r}_2 \quad (13.7)$$

Мы сами выбираем, какую координату из какой вычитать, на ход рассуждений это принципиально не влияет.

Канонически сопряжённые импульсы

$$\hat{P} = p_1 + p_2 \quad (13.8)$$

$$\vec{p} = \frac{\hat{p}_1 - \hat{p}_2}{2} \quad (13.9)$$

Даже не выполняя преобразований, мы знаем, что гамильтониан в новых переменных примет следующий вид. Кинетическая энергия разобьётся на энергию движения центра масс, записанную через (13.8), и энергию относительного движения, записанную через (13.9):

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{r}|}, \quad (13.10)$$

где полная масса системы $M = 2m$, а приведённая $\mu = \frac{m}{2}$. Координата центра масс становится циклической, гамильтониан от неё не зависит, импульс является интегралом движения.

В (13.10) произошло чёткое разделение на гамильтониан движения центра масс $\frac{\hat{P}^2}{2M}$ и гамильтониан относительного движения $\frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{r}|}$. К тому же оператор \hat{H} не зависит от спиновых операторов. Поэтому собственные функции такого гамильтониана удобно строить, воспользовавшись методом разделения переменных.

Возьмём $\Phi(\vec{R})$, координатную волновую функцию, описывающую движение центра масс. По виду гамильтониана (13.10) понятно, что это свободное движение, так что мы можем характеризовать каждое состояние просто определённым значением импульсом центра масс \vec{P} . $\phi(\vec{r})$ будет волновой функцией относительного движения.

Видно, что для координатной части относительного движения мы имеем кулоновскую задачу притяжения. Частица движется в кулоновском поле, поэтому стационарные состояния можно занумеровать квантовыми числами n, l, m , где l – квантовое число, задающее собственные значения нужного нам оператора \hat{l}^2 , а m – ненужное квантовое число, задающее собственные значения оператора \hat{l}_z , не входящего в искомый набор. \hat{l}_z нельзя включить в набор вместе с \hat{j}^2 , потому что \hat{j}^2 содержит операторы \hat{l}_x и \hat{l}_y , с которыми \hat{l}_z не коммутирует. Однако пока в индексе ϕ напишем все три числа.

Дальше будет стоять некая спинорная конструкция X . Для двух частиц спина $\frac{1}{2}$ спиновую часть волновой функции можно записывать в виде произведения двух двухкомпонентных спиноров. В искомом наборе есть оператор \hat{S}^2 , поэтому будем брать состояния с определённым полным спином S . В этом случае мы знаем состояния с определённым S и его проекцией M_S от спиновых переменных первой и второй частиц s_1 и s_2 .

То есть волновая функция запишется как

$$\Psi = \Phi_{\vec{P}}(\vec{R}) \cdot \phi_{nlm}(\vec{r}) \cdot X_{SM_S}(s_1 s_2) \quad (13.11)$$

Все конструкции в (13.11) нам хорошо известны. Разберём их по порядку.

а) $\Phi_{\vec{P}}(\vec{R})$. Состояние с определённым полным импульсом – это плоская волна. Можно перейти к пределу непрерывного спектра, записав

$$\Phi_{\vec{P}}(\vec{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\vec{P}\vec{R}}, \quad (13.12)$$

где \vec{R} – это (13.6).

Тогда разрешённые значения энергии движения центра масс от 0 до ∞ , и волновые функции (13.12) нормированы на дельта-функцию по \vec{P} .

Но если нас интересуют локализованные состояния и мы хотим строить настоящие физические волновые функции с единичной нормой, можно поступить по-другому. В волновой функции относительного движения $\phi(\vec{r})$ могут быть состояния дискретного спектра, и, если мы его изучаем, логичней иметь функции, нормированные на единицу.

Оператор $\hat{P}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, то есть он с точностью до множителя есть оператор Лапласа Δ . Можно ввести макроскопически большую область и наложить для соответствующего стационарного уравнения граничные условия. Например, сказать, что позитроний помещён в ящик размером $L \times L$, где L – очень большая по сравнению с характерными размерами системы величина. Если мы точно знаем, что позитроний в нём находится, можно вернуться к нормальному дискретному спектру и сказать, что на

стенках ящика будут нулевые граничные условия. И задача будет решить уравнение на собственные значения и собственные функции оператора Лапласа с нулевыми граничными условиями на некоторой большой поверхности, ограничивающей макроскопически большой объём.

В этом случае можно написать $\Phi_{\vec{P}}$, например, как

$$\Phi_{\vec{P}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \cdot e^{i\vec{P}\vec{R}}, \quad (13.13)$$

нормировав (13.12) на единицу в смысле интегрирования по объёму ящика. Правда, теперь \vec{P} не какие попало, это не непрерывный спектр. Они пробегают такие значения, чтобы между стенками ящика укладывалось целое число длин полуволн. То есть \vec{P} – набор импульсов, отвечающих собственным волнам, собственным колебаниям нашего объёма.

Это просто другой подход. В реальной задаче, изучая поведение позитрония, мы обычно будем в конечных результатах устремлять объём к бесконечности, говоря, что на какой-то локальный процесс, происходящий с позитронием, наличие стенок ящика где-то далеко не влияет. То есть (13.13) с пределом $V \rightarrow \infty$ в конечных ответах.

Обоими способами можно работать с движением центра масс. Оно, по сути, простое, но, изучая систему, его нельзя выбрасывать, надо говорить, как его описывать.

б) $X_{SM_S}(s_1s_2)$. Начнём со спиновой части, потому что нам эти функции известны, мы знаем, как записать соответствующие спинорные конструкции. На семинаре мы строили все коэффициенты Клебша – Гордана для сложения моментов, равных $\frac{1}{2}$, и для каждой конструкции строили соответствующие базисные функции. Здесь есть четыре независимые конструкции, которые образуют полный базис в пространстве спиновых состояний системы из двух частиц спина $\frac{1}{2}$:

$$X_{00} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad (13.14)$$

$$X_{1+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (13.15)$$

$$X_{10} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad (13.16)$$

$$X_{1-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (13.17)$$

Договоримся, что первый спинор всегда описывает спиновое состояние электрона, а второй – позитрона, однозначно определив физический смысл каждой конструкции. Теперь всегда можно записать выражение $X_{SM_S}(s_1s_2)$ в качестве одной из них.

в) $\phi_{nlm}(\vec{r})$. Задача для него выглядит как

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}\right)\phi_{nlm}(r) = \varepsilon_n\phi_{nlm}(\vec{r}) \quad (13.18)$$

В кулоновской задаче есть дополнительное вырождение, поэтому все уровни энергии можно нумеровать одним квантовым числом n .

Нас интересует дискретный спектр. У этой системы есть ещё и непрерывный для энергии $E > 0$, но позитронием обычно называют именно связанное состояние электрона с позитроном, то есть принадлежащее дискретному спектру. Мы строим базис, описывающий часть спектра в области энергии относительного движения $E < 0$. Тогда собственные значения гамильтониана задачи (13.18)

$$\varepsilon_n = -\frac{\mu e^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{me^2}{4\hbar^2 n^2} \equiv -\frac{e^2}{4an^2}, \quad (13.19)$$

где $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ – борковский радиус. Это выражение отличается от спектра атома водорода только наличием множителя 2 внизу из-за приведённой массы.

Соответствующие собственные функции удобно записывать в сферических координатах:

$$\phi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{nl}(\vartheta, \varphi) \quad (13.20)$$

$Y_{nl}(\vartheta, \varphi)$ – стандартные сферические гармоники, ϑ, φ – полярные углы вектора \vec{r} (13.7), а $R_{nl}(r)$ – кулоновские радиальные части.

Предполагается, что мы их хорошо знаем. Например, для случая наинизшего значения, основного состояния $n = 1, l = 0$ $R_{10} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$, где a – борковский радиус, $\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$ – нормировочный множитель, чтобы интеграл от квадрата модуля по всему пространству давал единицу. И в целом, радиальные части $R_{nl}(r)$ – всегда произведения экспонент на полиномы. Мы можем записать их через гипергеометрическую функцию Гаусса, через полиномы Риккати и т. д. То есть при каждом конкретном nl они записываются через элементарные функции, экспоненты и полиномы, но в общем случае мы их обычно пишем через стандартные спецфункции для произвольных nl .

Тогда мы построили волновую функцию

$$\Psi_{\vec{P} nlm S M_S}, \quad (13.21)$$

которая является произведением функций (13.13), (13.20) и одной из (13.14–13.17) в зависимости от значений S и M_S . Тем самым мы построили базис в пространстве состояний в области дискретного спектра, которую подразумевали, спрашивая про позитроний. Но это общий базис наблюдаемых гамильтониана \hat{H} , импульса движения центра масс \vec{P} , энергии относительного движения $\hat{l}^2, \hat{l}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$. Здесь нет операторов \hat{j}^2 и \hat{j}_z .

Тут опять наступает роль правила сложения моментов. Мы его один раз уже использовали, так как воспользовались функциями (13.14–13.17), которые построили,

решая задачу сложения двух спиновых моментов $s = \frac{1}{2}$ в общий спин. Повторим процедуру по стандартной схеме сложения моментов.

Будем ставить у волновой функции индекс «цм», подразумевая, что из функций (13.21) рассматриваем только те, у которых полный импульс $\vec{P} = 0$. То есть мы переходим в систему отсчёта, где центр масс позитрония покоится, говоря, что всегда можем вернуться туда, где он движется, и легко учесть энергию его движения. Дальше в индексах надо взять наблюдаемые, которые коммутируют с нашими операторами, являются скалярами. Берём nl , взяв гамильтониан относительного движения. Из его записи (13.18) видно, что это скаляр по отношению к вращению в координатном и спиновом пространствах, в последнем так как он не содержит спиновых операторов. Также берём S , а вместо S и M_S возьмём J и M_J .

Напишем над функциями этого базиса ещё знак волны, чтобы сразу их отличать, когда будем подставлять конкретные значения. Это стандартная задача сложения моментов, то есть мы должны записать эти функции как сумму по исчезнувшим индексам mM_S , под которой будут стоять коэффициенты Клебша – Гордана с общими моментами l, s в скобках, умноженные на уже построенные функции. У них в индексах тоже напишем «цм», так как и здесь переходим к $\vec{P} = 0$. Получится

$$\tilde{\Psi}_{\text{цм } nls JM_J} = \sum_{mM_S} C_{JM_J}^{mM_S}(ls) \tilde{\Psi}_{\text{цм } nls SM_S} \quad (13.22)$$

Теперь можно сказать, что мы решили поставленную задачу, так как коэффициенты Клебша – Гордана при необходимости можно вычислить. А волновые функции интересующего нас базиса строятся из волновых функций базиса, который мы уже построили.

Конкретные волновые функции для нерелятивистского позитрония

Не будем ограничиваться общим выражением, напишем конкретные формулы для конкретных интересующих нас состояний, как это делается в реальных работах. Там мы пишем общее выражение, а дальше производим конкретные расчёты с конкретными волновыми функциями, считаем матричные элементы по базису из этих функций от каких-то операторов. И для этого нужны конкретные выражения для этих функций.

Начнём с того, что есть две «простые» ситуации, когда не нужны коэффициенты Клебша – Гордана.

1) Первая простая ситуация – случай, когда квантовое число $S = 0$. Тогда спиновая часть волновой функции, входящей в (13.21), чётко известна. А ещё, так как спин $S = 0$, при любом l J принимает единственное значение $J = l$, тогда $M_J = m$. Функция $\tilde{\Psi}_{\text{цм } nl0 JM_J}$ реально существует, только если $J = l$, тогда $M_J = m$. В выражении неё будет $\frac{1}{\sqrt{V}}$ из волновой функции для центра масс (13.13), дальше будет волновая функция относительного движения (13.20), и спиновая часть:

$$\tilde{\Psi}_{\text{цм } n l 0 \text{ } l m} = \frac{1}{\sqrt{V}} R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad (13.23)$$

Это все волновые функции, у которых на месте S стоит 0.

2) Второй простой случай – когда $l = 0$. Тогда $J = S$ и $M_J = M_S$. Напишем волновую функцию $\tilde{\Psi}_{\text{цм } n 0 S \text{ } J M_J}$ с учётом этого. В общем случае стандартная сферическая гармоника – произведение нормировочного множителя на присоединённый полином Лежандра:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = N_{lm} P_l^{(m)}(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (13.24)$$

Но при $l = 0$, $m = 0$ этот полином константа, а нормировочный множитель подбирается так, чтобы интеграл по всей норме для сферических углов, то есть $d\vartheta \sin \vartheta d\varphi$ от квадрата модуля этого выражения, давал единицу. И поскольку интеграл от единицы даёт 4π , нормировочный множитель для $Y_{00}(\vartheta, \varphi)$ будет $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$.

А дальше будет стоять X_{SM_S} для нужных значений SM_S , любая из (13.14–13.17). Какую поставим, такие же J и M_J получатся в функции $\tilde{\Psi}_{\text{цм } n 0 S \text{ } J M_J}$, которую расписываем. То есть волновая функция

$$\tilde{\Psi}_{\text{цм } n 0 S \text{ } S M_S} = \frac{1}{\sqrt{V}} R_{n0}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} X_{SM_S} \quad (13.25)$$

Теперь рассмотрим «более общий» случай, когда ни полный спин, ни орбитальный момент относительного движения не равны нулю. Для всех состояний с $S = 0$ мы уже записали простую формулу, поэтому здесь рассматриваем $S = 1$. А l будет произвольный, кроме нуля, то есть $l = 1, 2, \dots$. Здесь уже нужно пользоваться коэффициентами Клебша – Гордана. Их можно взять готовыми из таблиц, но мы хотим рассмотреть их конкретный вид, поэтому будем вычислять их по нашей схеме.

Начинаем с максимального момента J и его проекции M_J . При $S = 1$ максимально возможное значение $J = l + 1$ при каждом l . Соответственно, максимальная проекция в этом случае $M_J = +l + 1$. Коэффициент Клебша – Гордана для максимального момента с его максимальной проекцией всегда равен единице. Тогда волновая функция центра масс

$$\tilde{\Psi}_{\text{цм } n l \text{ } l+1 \text{ } l+1} = \frac{1}{\sqrt{V}} R_{nl}(r) Y_{l+l}(\vartheta, \varphi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (13.26)$$

в спиновой части нужно было обязательно написать состояния со спином 1 и проекцией спина +1.

Рассмотрим случай $l = 1$, чтобы записать волновую функцию с совсем конкретным набором индексов. Произвольным останется только n , поскольку $l = 1$, n будет пробегать значения, начиная с 2, дальше могут быть любые значения за счёт радиальных возбуждений. $Y_{1+1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$, где присоединённый полином Лежандра

$P_{l=1}^{m=1}(\cos \vartheta) = \sin \vartheta$, а дальше $e^{im\varphi}$ при $m = +1$, нормировочный множитель $\sqrt{\frac{3}{8\pi}}$ можно вычислить. Получится

$$\tilde{\Psi}_{\text{цм } n11 \ 2+2} = \frac{1}{\sqrt{V}} R_{n1}(r) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (13.27)$$

В данном выражение всё, кроме $R_{n1}(r)$, расписано явно. А если посмотреть в справочнике по кулоновским частям, как выглядят $R_{21}(r)$ и другие, фактически будет произведение r на экспоненту, и выражение станет совсем конкретным.

Но мы это делать не будем, нам интереснее другое. Выражение (13.27) выписано для максимального при данном l момента J и максимальной проекции M_J . Теперь рассмотрим другие функции, например, $\tilde{\Psi}_{\text{цм } n11 \ 2+1}$, у $J = 2$ может быть $M_J = +1$. Чтобы получить эту функцию, надо подействовать на (13.27) оператором \hat{J}_- . Он, не тронув J , понизит M_J и вытащит в качестве нормировочного множителя $\sqrt{(2+2)(2+1-2)} = 2$. Поэтому получится

$$\hat{J}_- \tilde{\Psi}_{\dots 2+2} = 2 \tilde{\Psi}_{\dots 2+1}, \quad (13.28)$$

на месте ... справа и слева стоят одни и те же индексы.

Так что, чтобы получить $\tilde{\Psi}_{\text{цм } n11 \ 2+1}$, можно расписать её как $\frac{1}{2}$ и того, что получается действием на правую часть (13.27) оператора $\hat{J}_- = \hat{l}_- + \hat{s}_-$. Выражение слева будет содержать два слагаемых. В первом \hat{l}_- подействует на стандартную сферическую гармонику Y_{1+1} . Это собственная функция операторов \hat{l}^2 и \hat{l}_z , поэтому по формуле, как в (13.28), будет $\sqrt{(1+1)(1+1-1)} = \sqrt{2}$. Поэтому

$$\hat{l}_- Y_{1+1} = \sqrt{2} Y_{10} \quad (13.29)$$

То есть вместо $\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$ из (13.27) в $\tilde{\Psi}_{\text{цм } n11 \ 2+1}$ будет стоять $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta e^{im0}$. Добавим $\sqrt{2}$ в числитель и 2 из (13.28), чтобы получить общий коэффициент первого слагаемого.

Второе слагаемое получится, когда оператор \hat{s}_- подействует на спиновую часть. Он вытащит $\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}} = 1$ и переведёт её в состояние с проекцией спина, равной нулю:

$$\hat{s}_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad (13.30)$$

Здесь тоже будет общий множитель $\frac{1}{2}$ из (13.28). Так что в целом получится волновая функция

$$\tilde{\Psi}_{\text{цм } n11 \ 2+1} = \frac{1}{\sqrt{V}} R_{n1}(r) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cos \vartheta \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (13.31)$$

Действуя оператором \hat{J}_- ещё раз, уже на (13.31), можно построить функцию $\tilde{\Psi}_{\text{цм } n11 \ 20}$. Далее можно будет по симметрии догадаться, какое выражение будет для $\tilde{\Psi}_{\text{цм } n11 \ 2-1}$ и $\tilde{\Psi}_{\text{цм } n11 \ 2-2}$. А потом из соображений нормировки и ортогональности построить волновые функции, отвечающие другим допустимым значениям J . Когда складывается $S = 1$ с произвольным l , J будет пробегать значения от $l - 1$ до $l + 1$. То будут ещё функции для $J = l \pm 1$, только с другими коэффициентами Клебша – Гордана.

Здесь всё свелось к алгебре, потому что мы знали решение уравнения для относительного движения. Задачи относительного движения, как правило, задачи о движении в центрально-симметричном поле, там всегда происходит выделение стандартных сферических гармоник. У других задач уже не с кулоновским, но по-прежнему не зависящим от спинов взаимодействием, просто будут другие радиальные части. А вся использованная процедура справедлива для любого взаимодействия в паре частиц одинаковой массы, связанных взаимодействием притяжения.

Также мы посмотрели, как строить конкретные выражения. Задача о нерелятивистском позитронии достаточно известная, её общее решение легко найти в литературе. Если мы будем действовать по шаблону, но осмысляя, как и что делать, все стоящие там коэффициенты Клебша – Гордана для сложения орбитального момента l с полным спиновым $S = 1$ можно вычислить в явном виде через константы, через J, l, S . В литературе можно найти общее выражение для собственных функций нерелятивистского позитрония с определённым J .

Мы подошли к важному логическому рубежу. После того, как мы поняли, как в стационарных нерелятивистских задачах работает правило сложения моментов, мы фактически изучили общие принципы решения всех таких одночастичных и сводимых к ним задач. То есть достигли цели, которую изначально заявляли как цель первого семестра. Но программа семестра не закончилась по естественной для теоретической физики причине, что точно решаемые аналитически задачи составляют относительно небольшую часть всех задач, с которыми она имеет дело. В других начинает работать один из главных функциональных навыков профессионального теоретика – умение решать их приближёнными методами. Оставшаяся часть семестра будет посвящена приближённым методам решения задач в квантовой теории.

Приближённые методы

Приближённые методы, которые активно используются в квантовой теории, в основном можно разделить на три класса.

1) Квазиклассические методы. Уже из названия понятно, что здесь речь идёт о задачах, в которых классическое описание с неплохой точностью позволяет разобраться с поведением системы. Но есть принципиально квантовые эффекты, которые из него

вытащить нельзя и надо вычислить для системы с помощью приближённых квантовых методов решения.

Например, дискретность уровней связанных состояний. Из классической динамики можно понять, в каких диапазонах может меняться энергия связанного состояния системы, но нельзя вычислить набор уровней, для этого нужно какое-то условие квантования. Сюда же можно отнести вычисление коэффициента прохождения потенциального барьера, который выше, чем энергия налетающей частицы. В физике микромира такое бывает и называется туннельным эффектом или туннелированием частицы через потенциальный барьер, но с классической точки зрения это принципиально невозможно. Поэтому нужно искать ответ на этот вопрос, исходя из квантовой теории.

Но в ней, например, для нахождения спектра надо решать спектральную задачу для гамильтониана. А для вычисления коэффициента прохождения честно решить уравнение на стационарную волновую функцию частицы, если мы рассматриваем стационарный процесс, в котором частицы в похожем состоянии налетают на препятствие, и нас интересует, с какой вероятностью они его пройдут. Мы будем должны, как это делали в стационарных задачах, построить стационарную волну, выделить в ней прошедшую часть, посмотреть поток вероятности в прошедшей волне и отнормировать его на поток вероятности в падающей. Всё это предполагает точное решение. Значит, надо найти какие-то приближённые решения.

В данном случае речь идёт об изучении каких-то «малых» квантовых эффектов, в основном связанных с исследованием дискретности уровней или с вычислением коэффициентов прохождения и отражения в местах, где они должны быть, например, нулями с точки зрения классической физики. А в квантовой физике будут эффекты туннелирования, подбарьерного прохождения, или надбарьерного отражения.

Одна из базовых идей такого подхода состоит в том, что мы будем искать стационарную волну, отвечающую конкретной энергии, например, в координатном представлении, как

$$\psi_E(x) = a(x)e^{\frac{i}{\hbar}S(x)}, \quad (13.32)$$

потому что при изучении волны важно изучить поведение амплитуды и фазы. Стационарные волны практически всегда представимы в таком виде.

Мы хотим изучить слабые квантовые эффекты. Мериллом квантовых эффектов всегда является постоянная Планка. Это не безразмерный параметр. Если мы в математике строим разложение по какому-то малому параметру, обычно считаем, что он малый, чтобы ряд по его степеням быстро сходился. Но в физике, если параметр размерный, его величина зависит от выбранных единиц измерения, и говорить, большой он или малый, бессмысленно. Поэтому в ней обычно работают либо с безразмерными параметрами, по которым что-то разлагают, либо знают, как эту величину обезразмерить.

Если мы строим ряды по размерным параметрам, подразумевая, что знаем, как в каждом порядке обезразмерить используемую величину, будем называть разложение формальным. Один из популярных подходов состоит в том, что $a(x)$ и $S(x)$ строим в виде формального разложения по степеням постоянной Планка:

$$a(x) = a_0(x) + \hbar a_1(x) + \dots \quad (13.33)$$

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \dots \quad (13.34)$$

Мы подразумеваем, что в (13.33) и (13.34) происходит обезразмеривание, что функции $a_1(x)$ и $S_1(x)$ определены таким образом, что содержат множитель вида $\frac{1}{\hbar}$. Но на самом деле при решении мы подставляем эти решения в (13.32), раскладываем и начинаем приравнивать слагаемые с одинаковой степенью \hbar , подразумевая, что переход $\hbar \rightarrow 0$, исходя из принципа соответствия, должен быть переходом классической динамики. Как мы увидим, здесь надо будет довольно много размышлять над тем, чтобы всё сделать аккуратно и не создать технических противоречий самой процедурой. Но сам подход вполне применим для использования.

Его обычно называют методом ВКБ (Вентцеля – Крамера – Бриллюэна), и мы его будем называть также. Это будет основной метод квазиклассических вычислений, который мы будем изучать.

II) Теория Возмущений. Это самый простой и очень эффективный класс приближённых методов. Его идея состоит в том, что в гамильтониане стационарной системы есть некий маленький параметр. То есть гамильтониан может быть разбит на два слагаемых:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V}, \quad (13.35)$$

где \hat{H}_0 называют невозмущённым гамильтонианом, а $\varepsilon \hat{V}$, где ε – очень маленький безразмерный параметр, возмущением.

В этом случае собственные значения и собственные функции полного гамильтониана (13.35) являются какими-то функциями ε , в физических задачах обычно достаточно гладкими функциями параметров, от которых зависит гамильтониан. Если ε очень мало, а функция от него достаточно гладкая, её можно эффективно разложить в ряд по степеням ε .

Поэтому для $\varepsilon \ll 1$ можно искать решение задачи

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (13.36)$$

в виде рядов, которые называют рядами теории возмущений.

Соответствующее собственное значение E_n , где n – набор индексов, нумерующих уровни энергии, может быть построено в виде

$$E_n = E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \dots \quad (13.37)$$

$E_n^{(0)}$ – собственные значения гамильтониана \hat{H}_0 из (13.35), а дальше стоят слагаемые, которые называем поправками, они уже будут ненулевыми степенями малого параметра ε .

Аналогично строится собственная функция ψ_n гамильтониана (13.35). Уровни энергии бывают вырожденными, поэтому для нумерации собственных функций гамильтониана \hat{H}_0 при заданном собственном значении $E_n^{(0)}$ может потребоваться ещё одно квантовое число или их набор, который обозначим индексом α . Как правило, поскольку отличие небольшое, собственные функции точной возмущённой задачи можно занумеровать такими же квантовыми числами, что и собственные функции невозмущённой. Тогда тоже возникает ряд по степеням ε

$$\psi_n = \psi_{n\alpha}^{(0)} + \varepsilon \psi_{n\alpha}^{(1)} + \dots \quad (13.38)$$

Дальше вместо правильных выражений всюду подставляем их разложения по ε , а потом все уравнения разбиваем на цепочку уравнений, когда из правой и левой частей берём слагаемые одного порядка по ε .

Это классический рецепт, уже хорошо известный нам по другим разделам теоретической физики, который носит название теории возмущений. В данном случае её называют стационарной теорией возмущений, потому что в таком виде мы будем её применять для решения стационарной задачи (13.36). В следующем семестре мы познакомимся и с нестационарной и увидим, какие отличия там возникнут.

Самое удивительное в стационарной теории возмущений – её простота. Мы фактически подставляем в сколь угодно сложное уравнение разложения (13.37) и (13.38), приравняем слагаемые при одинаковых степенях ε справа и слева и всегда получаем набор простых линейных уравнений. То есть для решения задач в рамках этой теории не надо быть большим специалистом в математике. Паули, который был выдающимся теоретиком, в письме к кому-то из известных физиков-теоретиков, занимающихся квантовой теорией, оценивая то, что происходит в теоретической физике, написал, что в 30-е годы под деморализующим влиянием теории возмущений математические требования к образованию физика-теоретика свелись к рудиментарному владению латинским и греческим алфавитом.

И вместе с тем данным методом были решены очень многие задачи. И вообще квантовая теория примерно до 1960-х годов пользовалась в основном этим инструментом. Только после этого она стала осторожно подступать к непертурбативным задачам, в которых нельзя получить ответ, пользуясь стационарной теорией возмущений.

Чтобы понять, что существуют задачи, в которых в принципе нельзя получить ответ в виде разложения по степеням малого параметра, нужно хотя бы немного знать математику. Пусть энергия системы E_n в точной задаче зависит от ε как

$$E_n = E_0 e^{-\frac{1}{\varepsilon}} \quad (13.39)$$

Это замечательная функция, очень гладкая. Она имеет с нулём касание бесконечного порядка, при $\varepsilon \rightarrow 0$ стремится к нулю быстрее любой степени ε (рис. 13.1). А при $\varepsilon \rightarrow \infty$ она $\rightarrow 1$. Однако если в задаче с таким правильным ответом мы будем пользоваться теорией возмущений, пытаясь найти его в виде ряда по степеням ε , ничего хорошего не получится.

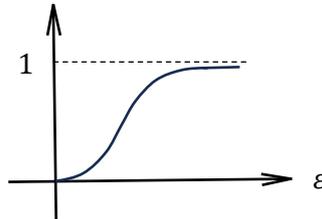


Рис. 13.1. Функция, которую нельзя раскладывать в ряд по степеням малого параметра

Поэтому всегда надо помнить, что у теории возмущений есть чёткие границы применимости. И вообще в приближённых методах чаще важно не уметь посчитать этим методом какую-либо величину, а узнать, при каких условиях результат может быть оценён как корректный. Нужно всегда исследовать, можно ли полученное приближённым методом объявить ответом.

III) Вариационные методы. Данный класс методов сильно пригодится в следующем семестре. Они получили такое название, потому что все строятся на вариационном принципе. У нас есть задача (13.36) на собственные значения и собственные функции, в которой мы подчиняем решение условию, что оно нормируемая на единицу функция, то есть говорим, что норма ψ , которая обычно определяется через интеграл от $\psi^*\psi$ по всем переменным,

$$\|\psi\| = 1 \quad (13.40)$$

Вместо операторной задачи из (13.36) и (13.40) на собственные значения и собственные функции для оператора \hat{H} построим вариационную, функционал энергии

$$E[\psi] = \int \psi^* H \psi \alpha dV, \quad (13.41)$$

написав dV , подразумевая, что интегрируем по всем переменным, находящимся в аргументе ψ . Мы как бы посчитали среднее значение наблюдаемой энергии по состоянию, описываемому волновой функцией ψ .

Если мы будем решать задачу на условный экстремум этого функционала

$$\frac{\delta E(\psi)}{\delta \psi^*} = 0 \quad (13.42)$$

при условии (13.40), можно вспомнить, что в вариационном исчислении такого рода задачи, используя метод неопределённых множителей Лагранжа, сводят к операторным. Оказывается, что соответствующей операторной задачей для вариационной (13.42, 13.40) будет именно интересующая нас задача (13.36, 13.40).

Математик для решения этой вариационной задачи сведёт её к той операторной. Но физик-теоретик, у которого не получилось решить операторную задачу, может попробовать решить в принципе эквивалентную вариационную. Для точного решения сводить операторную задачу к вариационной безумие, при точном решении вариационная задача обычно сложнее. Но при приближённом задаче на поиск минимума конкретного функционала может оказаться проще, чем честная операторная задача. И тогда её можно использовать как приближённый метод.

Способ, как сделать вариационную задачу проще операторной, состоит в том, чтобы искать минимум функционала (13.41) не в классе всех возможных нормируемых на единицу функций, для чего реально надо решить операторную задачу, а подобрать класс функций, в котором решение будет найдено легко. Мы не найдём честное решение операторной задачи, но можем найти в выбранном классе функций ту, которая к нему ближе всего.

Теоретики любят объяснять сущность вариационного метода, сопоставляя его с житейской задачей о поиске потерянного ключа, который обронили где-то на тёмной улице. Согласно житейскому методу, мы ищем этот ключ под фонарями не потому, что уверены, что там его обронили, а потому что в другом месте всё равно его не увидим и не найдём. Поэтому мы на этой улице обходим все фонарные пятна, собираем все найденные там ключи, а потом из них выбираем тот, который больше всего похож на наш. Даже если он не наш, если он похож, то, возможно, подойдёт.

Та же идея, реализованная в математике, состоит в том, что мы выбираем класс пробных функций и в нём приближённо решаем вариационную задачу, пользуясь тем, что класс зафиксирован и функционал превращается во что-то более простое. А после этого думаем, насколько это похоже на то, что было нужно.

Вариационных методов существует очень много, и все они различаются по способу выбора класса пробных функций. В самом простом подходе, который называют прямым вариационным методом, мы просто выбираем конкретную функцию ψ , зависящую от какого-то параметра. После этого вычисляем интеграл (13.41), и функционал превращается в функцию числового параметра, минимизировать которую обычно достаточно просто.

Однако надо понимать, что чем уже мы возьмём фонарное пятно, тем проще будет его обыскать и найти все ключи, которые в него попали, но тем меньше шансов, что мы найдём что-то хорошее. Поэтому расширяя и сужая фонарное пятно, мы пытаемся выбрать золотую середину между сложностью решения вариационной задачи и точностью. Сами методы мы начнём изучать со следующей лекции, которая будет посвящена квазиклассическому подходу.

Лекция 14. Метод ВКБ

Сегодня мы начинаем большую тему – «приближённые методы». И, как и говорили, первым разделом будет квазиклассика. Наша цель в рамках метода Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна – рассмотреть решение уравнения Шредингера. Мы будем стараться построить его в первую очередь для стационарной системы, в виде произведения некоторого предэкспоненциального множителя на экспоненту, то есть разделить эволюцию волновых функций на эволюцию амплитуды и эволюцию фазы.

Решение уравнения Шредингера методом ВКБ

Рассмотрим одномерный случай, чтобы записи были короче, поскольку обобщение на трёхмерный устроено достаточно просто. Пусть частица массы m совершает одномерное движение в потенциальном поле $u(x)$. Её координатная волновая функция должна подчиняться уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + u(x) \cdot \psi \quad (14.1)$$

Мы хотим записать его решение в виде

$$\psi = a \cdot e^{i\hbar S}, \quad (14.2)$$

a и S – амплитуда и фаза волны.

Сама подстановка довольно громоздкая, потому что надо аккуратно разобраться со второй производной от кинетической энергии в (14.1). При взятии первой производной от (14.2) возникнут слагаемые с дифференцированием a и S :

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial a}{\partial x} e^{i\hbar S} + \frac{i}{\hbar} a e^{i\hbar S} \frac{\partial S}{\partial x} \quad (14.3)$$

Нужно сразу обратить внимание, что при всех дифференцированиях экспонента будет оставаться. Поэтому она останется при подстановке (14.2) в (14.1) общим множителем, и на него можно будет сократить, так как экспонента нигде не равняется нулю, и проблем это не вызовет. В целях сокращения записей уберём её сразу. Подставим в (14.1) выражения (14.2) и (14.3). В скобках справа будут множители от дифференцирования $\frac{\partial a}{\partial x}$ из первого слагаемого в (14.3), от $e^{i\hbar S}$, такой же от a из второго, поэтому перед предыдущим множителем поставим 2, от $e^{i\hbar S}$ и от $\frac{\partial S}{\partial x}$:

$$i\hbar \left(\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} a \frac{\partial S}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left[\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + 2 \frac{i}{\hbar} \frac{\partial a}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} - \frac{1}{\hbar^2} a \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + a \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \frac{i}{\hbar} \right] + ua \quad (14.4)$$

Особенно аккуратно надо выписывать множители, содержащие \hbar , потому что мы потом собираемся искать решение в виде формального разложения по данному параметру.

Здесь мы, во-первых, исходим из соображения, что классическая динамика должна каким-то образом проявляться из более общих квантовых уравнений в пределе

$\hbar \rightarrow 0$. Эта идея исходит даже из факта, что постоянная Планка присутствует в соотношениях неопределённости координаты и импульса, а в классической динамике её быть не должно. Ограничения на неопределённость измерения координаты и импульса должны исчезнуть, а это формально предел $\hbar \rightarrow 0$. Во многих других соотношениях мы также можем на это посмотреть.

Кроме того, здесь обычная волновая динамика. Уравнение (14.1) не совсем такое, как было в классических теориях, но это всё равно уравнение гиперболического типа, и решения у него во многих случаях получатся в виде бегущих волн. Поэтому работа с ними должна напоминать обычную работу с волновыми решениями. В электродинамике или волновой оптике возникает предел очень маленьких длин волн, когда они значительно меньше всех размеров, мы получаем предел геометрической оптики. Здесь также должно возникнуть нечто похожее. Длина волны $\lambda = \frac{\hbar}{p}$, и переход к пределу геометрической оптики формально тоже является пределом при $\hbar \rightarrow 0$. Это указания на то, что такой подход может быть корректен.

Уже видно, что в (14.4) справа получаются слагаемые с разной степенью постоянной Планка: \hbar^2 , \hbar^1 , и \hbar^0 . Так что формальное разложение по \hbar будет работать эффективно. Запишем функции a и S в виде

$$a = a_0 + \hbar a_1 + \dots \quad (14.5)$$

$$S = S_0 + \hbar S_1 + \dots \quad (14.6),$$

Начнём с самого низшего порядка, появляющегося в уравнении (14.4), \hbar^0 . К ним относится второе слагаемое слева, чтобы оставить в нём \hbar^0 , надо брать a_0 и S_0 . А справа третье слагаемое в скобке и слагаемое вне её. Получится уравнение

$$-a_0 \frac{\partial S_0}{\partial t} = + \frac{1}{2m} a_0 \left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \right)^2 + a_0 u \quad (14.7)$$

В нём a_0 оказалось общим множителем. Амплитудный множитель для нашей волны не должен быть нулём, поэтому на него здесь можно разделить. То есть в этом порядке получается уравнение для S_0

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \right)^2 + u = 0 \quad (14.8)$$

Из теоретической механики известно, что это уравнение Гамильтона – Якоби. Его решение – так называемая функция классического действия для нашей системы.

$$S_0 \equiv S_{\text{кл}} \quad (14.9)$$

которая является решением уравнения Гамильтона – Якоби.

Более того, для стационарных систем, где u является функцией только координаты и не зависит от t , оно легко решается. Функция классического действия для стационарной системы в состоянии с определённой заданной энергией E будет содержать $-Et$. Из (14.8) можно явно выразить $\left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \right)^2$, которое можно записать в форме

$$\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2 = 2m(E - u(x)) \quad (14.10)$$

Справа в (14.10) стоит квадрат классического импульса, выраженного через энергию и координату при движении в заданном потенциальном поле, поэтому $\frac{\partial S_0}{\partial x}$ – классический импульс, взятый со знаком «+» или «-». Так что получится

$$S_0 = -Et + \int p_{\text{кл}} dx, \quad (14.11)$$

где

$$p_{\text{кл}} = \sqrt{2m[E - u(x)]} \quad (14.12)$$

– выражение импульса из закона сохранения энергии для стационарного решения, описывающее состояние нашей системы с заданной энергией E . Или, на классическом уровне, движение частицы с энергией E .

Видно, что принцип соответствия работает, и мы в этом случае действительно приходим к теоретической механике. Более того, здесь можно найти целую цепочку смыслов. Запишем

$$\frac{1}{\hbar} S_0 \equiv -\frac{E}{\hbar} t + \frac{1}{\hbar} \Phi(x), \quad (14.13)$$

то есть выделим явно стационарную фазу Φ как функцию координаты, чтобы первое слагаемое в (14.11) сразу ушло. При этом там окажется $-\omega t$.

Разделив импульс (14.10), превратим его в k^2 . То есть для Φ из (14.8) получится уравнение

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x}\right)^2 = k^2(x), \quad (14.14)$$

где уже зависимость от x волнового числа k для волны вероятности. Волновое число, закон дисперсии, следует из конкретного волнового уравнения, которому подчиняются данные волны. Здесь, так как $\vec{p} = \hbar \vec{k}$,

$$k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - u(x)]} \quad (14.15)$$

В волновой теории так выводили приближение геометрической оптики. Мы получили уравнение для волнового фронта как поверхности постоянной фазы. Именно оно является уравнением, в котором в эйкональном приближении происходит переход от волновой оптики к геометрической. То есть мы действительно увидели, что переход от настоящих квантовых задач к квазиклассическим с точки зрения волн вероятности и переход от волновой оптики к геометрической выполняются по сходным математическим принципам. Только волновые уравнения разные, в оптике уравнение Максвелла, а здесь Шредингера, поэтому другой закон дисперсии выражение для k^2 . Мы здесь не будем это использовать, просто хотели показать.

Мы теперь знаем, как написать уравнение для S_0 , и нас интересует предэкспоненциальный множитель a_0 . Нам хочется получить уравнение для волновой функции хотя бы в низшем порядке в нашем квазиклассическом приближении. Уравнение (14.4), где мы собрали слагаемые с \hbar^0 , уже использовалось, дальше надо написать уравнение с \hbar^1 .

Чтобы взять из первого слагаемого слева в (14.4) \hbar^1 , нужно написать там a_0 . Второе слагаемое слева, где стояло \hbar^0 , даст два слагаемых, с a_1 и S_0 и с S_1 и a_0 . Первое слагаемое справа взять не получится, там стоит \hbar^2 . Во втором \hbar^1 , поэтому нужно оставить нулевые функции по a и S . В третьем слагаемом \hbar^0 , оно даст два с a_1 и с S_1 при втором нулевом. Для второго нужно вместо $\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2$ написать $\frac{\partial S_0}{\partial x} + \hbar \frac{\partial S_1}{\partial x}$, и чтобы выделить слагаемое первой степени, надо взять перекрёстное произведение $2 \frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_1}{\partial x}$. В четвёртом слагаемом справа \hbar^1 , там будут только a_0 и S_0 . И в последнем будет a_1 . Получится уравнение

$$i \frac{\partial a_0}{\partial t} - a_1 \frac{\partial S_0}{\partial t} - a_0 \frac{\partial S_1}{\partial t} = -\frac{i}{m} \frac{\partial a_0}{\partial x} \frac{\partial S_0}{\partial x} + \frac{1}{2\pi} a_1 \left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{m} a_0 \frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_1}{\partial x} - \frac{i}{2m} a_0 \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} + u a_1 \quad (14.16)$$

Выделив в нём слагаемые, содержащие a_1 , мы обнаружим, что при a_1 получится то же уравнение (14.7), которое раньше получили при a_0 для функции S_0 . Оно уже выполнено, поэтому a_1 из (14.16) выпадает. Если бы оно не выпало, мы бы не смогли явно выделить из (14.16) нулевой порядок, как хотели. Без него получится уравнение

$$i \frac{\partial a_0}{\partial t} - a_0 \frac{\partial S_1}{\partial t} = -\frac{i}{m} \frac{\partial a_0}{\partial x} \frac{\partial S_0}{\partial x} + \frac{1}{m} a_0 \frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_1}{\partial x} - \frac{i}{2m} a_0 \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} \quad (14.17)$$

Перенесём в левую часть все слагаемые из (14.17), не содержащие S_1 – первое слева и первое и третье справа, а справа оставим содержащие его. Будет

$$i \frac{\partial a_0}{\partial t} + \frac{i}{m} \frac{\partial a_0}{\partial x} \frac{\partial S_0}{\partial x} + \frac{i}{2m} a_0 \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} = a_0 \frac{\partial S_1}{\partial t} + \frac{1}{m} a_0 \frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_1}{\partial x} \quad (14.18)$$

S_0 мы уже нашли, но a_0 из (14.18) найти не можем, так как правая часть содержит тоже неизвестную функцию S_1 . То есть в данном случае такое приближение оказывается запутанным, мы не можем выделить уравнение нулевого порядка для a_0 и S_0 по отдельности. Рассмотрим, в каком случае оно действительно будет работать как система последовательных приближений, то есть когда мы реально сможем выделить отдельно нулевое приближение, а потом исследовать следующие.

Видно, что это будет только в случае, если $S_1 = 0$. То есть если разложение фазы S по степеням \hbar (14.6) идёт как разложение только по чётным степеням, если в действительности строится разложение по \hbar^2 . Вообще, если мы честно выпишем всю цепочку равенств и начнём строить преобразования, обнаружим, что эта цепочка может

быть согласованной только в том случае, если все нечётные степени \hbar в выражении для S выпадают. Но мы сейчас не будем тратить время на полный анализ приближения, ограничившись тем, что нам известно, что это приближение нормально выстраивается. Поэтому положим $S_1 = 0$ и будем в дальнейшем утверждать, что S в таком формальном разложении раскладывается только по чётным степеням \hbar .

Тогда правая часть (14.18) равна нулю, и сразу получается готовое уравнение для a_0

$$i \frac{\partial a_0}{\partial t} + \frac{i}{m} \frac{\partial a_0}{\partial x} \frac{\partial S_0}{\partial x} + \frac{i}{2m} a_0 \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} = 0 \quad (14.19)$$

Можно сделать ещё одно упрощение этого равенства. Если мы решаем стационарную задачу, где S_0 содержит множитель $-Et$ (14.11), то у точного уравнения Шредингера есть известное нам свойство, что состояние с определённой энергией зависит от t только как энергетический множитель $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$. То есть для стационарных состояний

$$(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad (14.20)$$

где $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ уже вошёл в S_0 .

Тогда в предэкспоненциальном амплитудном множителе, в a (14.2), зависимости от t для стационарных состояний уже быть не должно, только от координаты:

$$\frac{\partial a_0}{\partial t} = 0 \quad (14.21)$$

А поскольку мы уже написали для них S_0 , нет смысла исследовать общее уравнение для нестационарной динамики для гамильтонианов, явно зависящих от времени. Ведь тогда надо начинать с предыдущего шага, на котором мы уже перешли к рассмотрению стационарной.

Тогда для (14.19) из (14.10) и (14.12) мы помним, что $\frac{\partial S_0}{\partial x}$ – это $p_{кл}$, мы так изначально выписали. Мы берём его со знаком «+» или «-», но этот знак будет одинаковым во втором и третьем слагаемых. Поэтому после сокращения на $\frac{i}{m}$ и умножения на 2 всё равно получится уравнение

$$2 \frac{da_0}{dx} p_{кл}(x) + a_0 \frac{dp_{кл}}{dx} = 0 \quad (14.22)$$

В нём мы уже написали обычные производные, так как фигурирующие в нём функции зависят только от x .

Такое уравнение очень легко интегрируется, потому что у него уже разделённые переменные. Перенесём их в разные стороны, получив

$$2 \frac{da_0}{a_0} = - \frac{dp_1}{p_1}, \quad (14.23)$$

проинтегрируем, возникнут логарифмы, и мы обнаружим, что $a_0 \sim p_{\text{кл}}^{-\frac{1}{2}}$, а с учётом (14.12)

$$a_0(x) = \frac{1}{\sqrt{p_{\text{кл}}}} = \frac{1}{\left(2m(E - u(x))\right)^{\frac{1}{4}}} \quad (14.24)$$

Для $\frac{\partial S_0}{\partial x}$ мы получали выражение $+p_{\text{кл}}$ или $-p_{\text{кл}}$, соответственно, в S_0 помимо $-Et$ присутствует, согласно (14.11), $\int p_{\text{кл}} dx$ со знаком «+» или «-», умноженный на $\frac{i}{\hbar}$, что вполне естественно, так как исходное уравнение (14.7) было второго порядка. Тогда приближённое решение

$$\psi_E^{(0)}(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \left\{ \frac{A}{\sqrt{p_{\text{кл}}(x)}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p_{\text{кл}} dx} + \frac{B}{\sqrt{p_{\text{кл}}(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p_{\text{кл}} dx} \right\}, \quad (14.25)$$

A и B константы, множитель $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ естественен для состояния с определённой энергией. Это общее квазиклассическое решение в низшем порядке по постоянной Планка.

Можно продолжить исследование, строя уже, например, a_1 и S_1 , то есть исследуя поправки. Выражение с поправками получится гораздо более сложным, поэтому сейчас рассмотрим, когда ими можно пренебречь, то есть в каком случае (14.25) является разумным приближённым решением для волновой функции стационарного состояния нашей частицы.

По-хорошему надо исследовать уравнение для поправок и написать условие, что они по модулю много меньше основного вклада. Но мы можем применить аналогию, упростить себе задачу геометрической оптикой, так как математически это тот же приём. Геометрическая оптика хорошо работает, когда длина волны оказывается достаточно маленькой по сравнению с какими-то характерными размерами. А характерные размеры, определяющие динамику нашей частицы, это расстояния, на которых импульс, а значит та же длина волны, существенно изменяется. То есть здесь то же условие, что и у эйконального приближения в геометрической оптике, что длина волны вероятности λ является медленно меняющейся величиной:

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \quad (14.26)$$

Это условие можно переписать, умножив скорость изменения классического импульса $\frac{dp_{\text{кл}}}{dx}$ на длину волны λ , и сказав, что на одной длине волны данное выражение будет много меньше исходного $p_{\text{кл}}$. Напишем выражения по модулю, чтобы сравнивать числа:

$$\left| \frac{dp_{\text{кл}}}{dx} \right| \lambda \ll |p_{\text{кл}}| \quad (14.27)$$

Так как $\lambda = \frac{\hbar}{p_{\text{кл}}}$, (14.27) можно переписать в виде

$$\hbar \left| \frac{dp_{\text{кл}}}{dx} \right| \ll p_{\text{кл}}^2 \quad (14.28)$$

Если это условие выполнено, выражение (14.25) можно считать разумным приближённым решением уравнения Шредингера.

Разные конкретные задачи в постановке (14.1) различаются только функцией $u(x)$. Она входит в выражение для $p_{\text{кл}}$ (14.12) и таким образом во все выражения в (14.25). И чтобы понять, как ведёт себя решение, нужно сначала понять, какое здесь $u(x)$.

Пусть $u(x)$ – функция, график которой нарисован на рис. 14.1. Из общей теории известно, что в этом случае, например, уровни дискретного спектра могут лежать в области, где частица не может уйти на бесконечность. Отмеченное значение энергии E в принципе должно принадлежать области, где возможен дискретный спектр. Впрочем, в квазиклассическом пределе мы понимаем, что все дискретные уровни должны идти очень плотно. Считая, что яма очень широкая, и в ней очень много дискретных уровней, мы будем такой иметь практически около каждого значения E . Если бы справа был какой-то предел значений, то выше данного были значения, для которых возможен уход на бесконечность, то есть состояния, принадлежащие непрерывному спектру. Но формально для всех этих ситуаций из-за плотного расположения уровней можно писать наше уравнение.

Из формулы (14.25) сразу надо обратить внимание, что поведение решения очень разное в классически допустимых и классически недоступных областях. Само выражение для $p_{\text{кл}}$ (14.12) обнаруживает, что эта величина является нормальной вещественной функцией, а соответственно, волновая функция будет осциллирующей волной в случае, когда $E \geq u(x)$. Эту область для движения классической частицы обычно и называют классически допустимой. Например, для нижнего значения E на рис. 14.1 такая область $a \leq x_{\text{кл}} \leq b$, то есть классическая частица с данной энергией двигалась бы между этими двумя точками и не вышла за её пределы. В этой области экспоненты ψ являются осциллирующими, правда, они комплексные, их график не особо нарисовать, но ψ осциллирует.

В классически недоступной области, в которой $E < u(x)$, тоже можно написать решение (14.25). Но там $p_{\text{кл}}$ (14.12) оказывается мнимой величиной, и осциллирующие экспоненты превращаются в вещественные растущие и убывающие. Классически недоступные области для потенциала с рис. 14.1 простираются в обе стороны до бесконечности. И так бывает довольно часто, ведь если энергия конечная, часто есть ограничение, что частица где-то не может улететь на бесконечность. В этом случае экспонента, описывающая волновую функцию в этой области, должна быть убывающей при стремлении к бесконечности, иначе мы не построим волновую функцию, нормируемую на единицу или даже на дельта-функцию.

То есть мы качественно понимаем, как ведёт себя, например, модуль волновой функции для нашего стационарного решения. График будет примерно как на рис. 14.1.

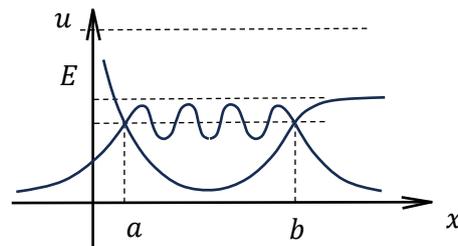


Рис. 14.1. График волновой функции в классически допустимой и недоступных областях

Но в действительности есть одна серьёзная проблема, которая требует отдельного обсуждения, – проблема окрестностей точек a и b . Ведь в этих точках $E = u(x)$, то есть $p_{\text{кл}} = 0$, значит, $\lambda = \frac{\hbar}{p_{\text{кл}}} = \infty$. А бесконечность быть маленькой по сравнению с чем-то быть не может. То есть условие (14.26–14.28) не выполняется в окрестностях точек a и b . Поэтому пользоваться построенным решением (14.25) далеко от этих точек как в классически допустимой, так и в классически недоступной областях можно, но продлять их до данных точек нельзя. Это создаёт проблему для решения конкретных задач, где мы ожидали, что запишем решения в разных областях, а потом сошьём их на границах областей. Над этим надо думать отдельно.

Хотя мы ещё не дошли до конечных формул нашего метода, потому что не разобрались, как будем записывать условие сшивки на границе классически доступных и недоступных областей, обсудим первые впечатления от метода ВКБ и вообще квазиклассического подхода. Во-первых, обратим внимание на ясность происходящего. Мы производим пренебрежение волновыми свойствами волн вероятностей и хотим написать что-то вроде геометрической оптики, уравнения эйконала, и у нас это получается. То есть мы просто изучаем динамику системы, когда частицы движутся как в ньютоновской механике, и на фоне данного движения видим слабые квантовые эффекты, связанные с волновыми свойствами частиц. Это в чистом виде читается на уровне восприятия корпускулярно-волнового дуализма.

Во-вторых, стоит обратить внимание, что при этом производимые нами выкладки, достаточно утомительны, а ведь мы всё время пытаемся взять более простой случай, например, одномерную задачу. Хотя в трёхмерной просто в уравнении Гамильтона – Якоби вместо $\left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2$ будет квадрат градиента S_0 . Это не будет существенным усложнением, хотя выкладки при вычислении всех этих производных станут чуть более громоздкими.

Но мы, например, сослались на корректность подхода и выдали утверждение, что S раскладывается по чётным степеням \hbar , увидев, что, если бы это было не так, нам было бы неудобно пользоваться данным приближением. А построение доказательства сильно удлинило бы наши рассуждения. Мы же при этом на самом деле ещё решаем разные дифференциальные уравнения, впрочем, они пока все легко интегрируются. А сейчас нас

ожидает ещё одна техническая операция, уже нетривиальная, – придумать условие сшивки. Но зато на выходе мы получим очень простые и удобные для практического использования рецепты.

В общем, квазиклассический подход сочетает, физическую ясность, математическую нагруженность и хорошие простые результаты.

Сшивка решения в классически допустимой и недоступной областях

У нас есть некая функция $u(x)$, мы рассматриваем решения с энергией E . Нам надо понять, что делать в ситуации, где надо сшить решения, записанные в классически недоступной и доступной областях. Привычнее рассматривать правый край области классически доступного движения, чтобы частица налетала слева, а экспоненциальное убывание волновой функции, то есть невозможность куда-то уйти, была невозможностью ухода по оси x , направо. Обозначим, как и раньше, правый край классически доступной области как b (рис. 14.2).

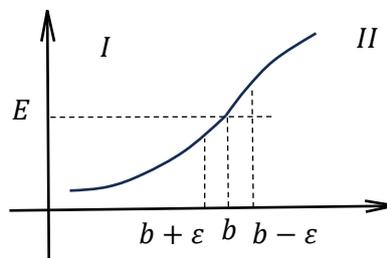


Рис. 14.2. Классически допустимая область, классически недоступная и область сшивки между ними

Решение в классически допустимой области I можно записать в виде (14.25). $p_{\text{кл}}$, с которым уже разобрались, для краткости запишем как p . Интеграл возьмём от b до x , чтобы была уже конкретная точка b . В выбранной области $x < b$, так что данный интеграл отрицательный, но это не так важно. Получится

$$\psi_I = \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} e^{i \int_b^x p(x) dx} + \frac{B}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-i \int_b^x p(x) dx}, \quad (14.29)$$

A, B – константы.

А в решении в классически недоступной области II из двух возможных экспонент, растущей и убывающей, должна выжить только убывающая. Цель условий, накладываемых на решение, в частности в том, чтобы волновая функция в данной ситуации стремилась к нулю при $x \rightarrow +\infty$. Интеграл в решении опять будет от b до x , но теперь $x > b$, он положительный, это соответствует убывающей экспоненте. Получится

$$\psi_{II} = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-i \int_b^x p(x) dx} \quad (14.30)$$

Фазовый множитель, который мог бы вылезти, включён в константу C .

Решения (14.29) и (14.30) нужно сшить. По сути, мы должны научиться понимать, как выражать две константы через третью, которая останется общей нормировочной. Все три константы из уравнения условия сшивки никогда нельзя определить. Здесь удобно выразить A и B через C и понять, как происходит сшивка на точке b .

Проблема в том, что данные решения нельзя до неё продолжить. Решение (14.29) описывает поведение функции чуть-чуть не доходя до этой точки, а дальше точно испортится, а решение (14.30) – чуть-чуть отступив от b . Формально надо взять две точки, $b - \varepsilon$ и $b + \varepsilon$ и считать, что ε – такое ненулевое число, чтобы можно было использовать решения с нужной точностью слева от первой точки и справа от второй. Но их нельзя использовать в интервале между этими значениями x .

Первые исследователи, столкнувшиеся с данной проблемой, действовали очень прямолинейно. Они говорили, что, если потенциал такой, что квазиклассическое приближение можно разумно использовать, размеры областей макроскопически большие, ε , скорее всего, можно будет взять достаточно маленьким, даже формально устремить к нулю. А при таких ε при любой функции $u(x)$ в окрестности точки b можно записать, учитывая, что $u(b) = E$,

$$u(x) = E + u'(b)(x - b) + \dots, \quad (14.31)$$

Дальше в этом ряду пойдут квадратичные и более высокие поправки, но, если ε достаточно мало, можно взять только линейную часть. Тогда в окрестности точки b можно решить точную квантовую задачу, найти для данного E соответствующую точную квантовую волновую функцию, для стандартного линейного потенциала (14.31). Тогда проблема будет решена, ведь внутреннее решение (14.29) в точке $b - \varepsilon$ мы сошьём с точным решением, а потом его в точке $b - \varepsilon$ с внешним (14.30). Дальше можно будет проделать математические преобразования, даже формально сделать $\varepsilon \rightarrow 0$ в ответе. То есть мы сначала вводим регуляризацию нашей некорректно поставленной задачи, введя параметр ε , а таким образом можем снять. И если там не вылезет никаких сингулярностей, и такой регулярный предел будет существовать, получить честный квазиклассический результат, уже общий, не чувствительный к виду потенциала.

Таким образом в данной задаче были впервые получены необходимые условия сшивки. При этом надо иметь в виду следующее. Мы решали задачу про линейный потенциал, про движение в однородном поле. Причём в импульсном представлении, потому что в нём получалась простая функция стационарного состояния с экспонентой, у которой в степени был кубический полином по p . В координатном представлении мы бы получали неэлементарную функцию. То есть точное решение в нашем случае с линейным потенциалом будет функцией Эйри, ну или фурье-образом, экспонентой с кубическим полиномом. Это не очень удобно, придётся активно использовать и изучать свойства функции Эйри, и вся операция получится очень непростой.

Несколько позже теоретики придумали другой подход, который технически выполняется быстрее, но тоже довольно громоздкий. Он состоит в том, чтобы провести

расширение вещественной оси x до комплексной плоскости $z = x + iy$. Решения (14.29) и (14.30) записаны на участках вещественной оси, и мы, разумеется, может организовать с этих участков аналитическое продолжение в комплексную плоскость. Тогда можно сказать, что для получения условия сшивки надо, чтобы в области перекрытия, где перекрываются область и продолжение, они превращались в одно и то же решение в комплексной плоскости.

Этот метод изящней, чем первый, и в нём меньше вычислений, но всё равно их слишком много, чтобы производить на лекции. А разобраться и сделать их самим очень полезно, тем более, в курсе физики не так часто используем ТФКП напрямую. Разве что теорию вычетов, которая удобна для подсчёта определённых интегралов. А те же аналитические продолжения используются очень редко.

Сейчас же мы в целях экономии сил и времени пойдём по упрощённому пути. На самом деле общее решение в области II – это произведение константы C на экспоненту $e^{-\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx}$ плюс произведение константы D на $e^{+\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx}$. И если мы действуем через продолжения, нужно подобрать такие значения A и B в (14.29), такую комбинацию решений, чтобы в пришиваемом к ней решению коэффициент D при растущей экспоненте равнялся нулю.

Пойдём обратным путём. Возьмём убывающую экспоненту $e^{-\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx}$ и посмотрим, из решений с какими A и B её надо составлять. Для упрощения процедуры используем здесь некоторые догадки. Например, скажем, что, наверное, в целом, каждая из решений-экспонент из (14.29) при переходе через комплексную плоскость в область II должна дать примерно одинаковый по модулю вклад в убывающую экспоненту в (14.30). У нас же есть какая-то симметрия, так что, скорее всего, не должно быть чего-то неординарного. Более того, если при движении направо в области II всё закрыто, поток экспоненциально убывает, то в области I падающий поток равен отражённому. То есть амплитуды этих решений, $|A|$ и $|B|$, вроде как должны быть одинаковыми.

Руководствуясь данной идеей, воспользуемся переходом в комплексную плоскость (рис. 14.3). Отметим на вещественной оси точку b . Пусть во внутренней области, при $x < b$, определено решение I , и оно при переходе через комплексную плоскость в область $x > b$ должно дать половину решения (14.30). Когда мы идём через комплексную плоскость, мы проходим либо в области с положительной мнимой частью, либо в области с отрицательной. Интеграл $\int_b^x p(x) dx$ в экспонентах в (14.29) и в (14.30) отличается лишь заменой $p(x)$ на $|p(x)|$, так что, чтобы получать его в (14.30) со знаком минус, нужно в слагаемое с A добавлять $+i$, умноженное на что-то, а в слагаемое с B добавлять $-i$ на что-то.

Поэтому для получения выражения для амплитуды A будем от точки $b - \varepsilon$ проходить через область с положительными значениями мнимой части x , а потом возвращаться на вещественную ось в точке $b + \varepsilon$ (рис. 14.3).

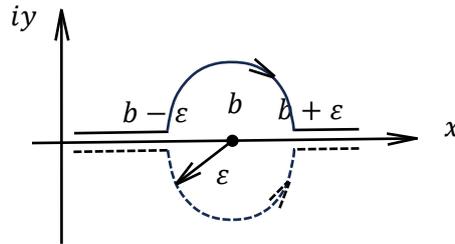


Рис. 14.3. Обходы по контуру в комплексной плоскости

Изящный метод предполагает, что мы честно строим аналитические продолжения решений и накладываем на них условия совпадения результатов. Мы же можем аналитически продолжить решения не во всю комплексную плоскость, искомая область для каждого будет, когда мы нарисуем характеристику уравнения. Они где-то пересекутся, и мы говорим, что в области пересечения должны совпасть. Такой метод не использовал бы догадок. А мы их используем, хоть и стараемся объяснить. В частности, мы считаем, что экспоненты из решения (14.29) должны дать одинаковые вклады в решение (14.30), чтобы те, сложившись, дали написанную в нём убывающую экспоненту. И при этом они должны давать вклады в растущую экспоненту тоже одинаковые по модулю, но с разным знаком, чтобы те сократились.

Тогда просто рисуем траекторию, какую хотим, в комплексной плоскости, которая обходит опасную точку b , не приближаясь к ней ближе, чем на ε . Такое движение комплексной переменной z по такой окружности радиуса ε можно довольно просто параметризовать. Будем писать, что

$$z = b + \varepsilon e^{i\varphi} \tag{14.32}$$

Чтобы старт был из точки $b - \varepsilon$, нужно взять начальное значение $\varphi = 0$. А чтобы финишировать в точке $b + \varepsilon$, взять конечное значение $\varphi = \pi$. То есть мы получим нужную полуокружность, если $\varphi \in [0, \pi]$. Обход идёт в отрицательном направлении отсчёта угла, по часовой стрелке.

При этом обратим внимание, что в решении (14.29) в знаменателе стоит $\sqrt{p(x)}$, то есть $\sqrt[4]{E - u}$, то есть, учитывая (14.31), $\sqrt[4]{x - b}$, а учитывая (14.32), $\sqrt[4]{\varepsilon e^{i\varphi}}$. Так что после перехода из точки $b - \varepsilon$ в точку $b + \varepsilon$ получится выражение с той же разностью $|x - b|$, у нашего выражения будет тот же модуль, $\sqrt{p(x)}$ в (14.29) благополучно преобразуется в $\sqrt{|p(x)|}$ (14.30). Но за счёт множителя $(x - b)$ в (14.31) при данном переходе добавится множитель $(e^{i\pi})^{\frac{1}{4}} = e^{i\frac{\pi}{4}}$. Учтём, что данная экспонента появляется в знаменателе, при делении знак меняется. Следовательно, чтобы получить половину решения (14.30) из части (14.29) с первым множителем, должно выполняться

$$A \cdot e^{i\frac{\pi}{4}} = \frac{C}{2} \tag{14.33}$$

То есть, пройдя от волны (14.29) через комплексную плоскость в область $x > b + \varepsilon$, мы должны получить вклад в волну (14.30), равный половине этой волны. Для этого нужно выбрать коэффициент

$$A = \frac{C}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} \quad (14.34)$$

Сделаем то же самое со второй половиной (14.29), с волной с B , у которой показатель в экспоненте положительный. Раз у i поменялся знак, нужно будет идти через нижнюю половину, взяв контур как показано пунктиром на рис. 14.3. Если здесь станем также отсчитывать угол φ , он будет отсчитываться в положительном направлении, против часовой стрелки. Это нехорошо, так что мы будем должны поменять знак φ в этом обходе. В результате в выражении, аналогичном (14.33), под степень $\frac{1}{4}$ вместо $e^{i\pi}$ попадёт $e^{-i\pi}$, и будет уравнение

$$B \cdot e^{-i\frac{\pi}{4}} = \frac{C}{2} \quad (14.35)$$

То есть точно такие же рассуждения приведут к тому, что нужно будет выбрать

$$B = \frac{C}{2} e^{i\frac{\pi}{4}} \quad (14.36)$$

Таким образом, мы не доказали, но постарались обосновать, что решение в области I , которое при корректной шивке сошьётся с решением (14.30) из области II , если использовать условия связи констант (14.34) и (14.36), должно выглядеть как

$$\psi_I = \frac{C e^{-i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{|p(x)|}} e^{i\int_b^x p(x) dx} + \frac{C e^{i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{|p(x)|}} e^{-i\int_b^x p(x) dx}, \quad (14.37)$$

Получается, что при $\frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}}$ в (14.37) стоит сумма двух экспонент, в одной показатель $\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx - i\frac{\pi}{4}$, а в другой $-\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx + i\frac{\pi}{4}$. $\frac{e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}}{2} = \cos \alpha$. Так что решение (14.30) с классически недоступной области должно сшиваться с решением

$$\frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\int_b^x p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right) \quad (14.38)$$

Мы не должны были обращать внимание на знак интеграла в (14.29), просто подбирали правильный, потому что в (14.38) он тоже есть. То есть мы на самом деле увидели, что по отношению к записанному через модуль подынтегральному выражению в убывающей экспоненте в (14.30) в аргументе косинуса в (14.38) возник фазовый сдвиг на $\frac{\pi}{4}$. С другой стороны, когда мы разбиваем волны (14.29) на два слагаемых, с учётом того, что, в интегралах в показателях экспонент всегда $b < x$, второе представляет собой падающую волну, а первое отражённую. Фактически это означает, что фазовый сдвиг отражённой волны по отношению к падающей – это $-\frac{\pi}{4} - \left(+\frac{\pi}{4}\right) = -\frac{\pi}{2}$. Ведь фаза у

падающей волны «что-то $+\frac{\pi}{4}$ », а у отражённой «что-то $-\frac{\pi}{4}$ », значит, в точке b , где происходит отражение, где интеграл обратится в ноль, у них разность фаз будет $-\frac{\pi}{2}$.

Ещё мы понимаем, что данный фазовый сдвиг зависит от типа граничного условия. Мы рассматривали тип, когда b – это точка, где $E = u(x)$. Обычно такие точки, имея в виду классическую интерпретацию, называют точками поворота. В классической динамике частица долетела бы до точки b , развернулась в ней и полетела бы обратно. Это просто ограничение области классически возможного движения, связанное с тем, что продвинуться дальше не хватает энергии.

А может быть и другой тип граничного условия, если поставить в точке b бесконечно высокую стенку. В её окрестности одно из условий, малость $\frac{dp}{dx}$, точно будет нарушено, потому что $p_{\text{кл}}$ выражается через $u(x)$, а он бесконечно высокий скачок. Также в окрестности такой стенки тоже не будет выполняться условие квазиклассичности. Но там уже не стоит пересчитывать это каким-то хитрым образом, ведь, учтя обнаруженное в примере с точкой поворота, мы сразу догадаемся, что будет. На непроницаемой стенке волновая функция должна обратиться в ноль, а для этого разность фаз между падающей и отражённой волной должна быть равна π . То есть будет выражение (14.38) с $\frac{\pi}{2}$ в скобке.

Кроме точек поворота и бесконечных стенок, область движения частицы может быть ограничена по координате и другими способами. Вспомним азимутальную координату φ . Область движения по φ ограничена от 0 до 2π даже если нет никаких стенок и точек поворота, просто потому что $\varphi = 2\pi$ отождествляется с $\varphi = 0$, в пространстве это та же самая точка, у нас есть условие цикличности. В такой точке не будет происходить никаких отражений, не будет никаких отражённых волн, поэтому там и сдвиг фаз равен нулю. Не должно быть дополнительного сдвига фаз между какими-то ни было волнами при прохождении точки, где нет особенностей потенциала, а просто область движения финитна из-за того, что есть условие цикличности на координату.

Воспользуемся этой наработанной технологией. Сформулируем следующую задачу

Задача. Спектр дискретных уровней частицы в односвязной яме

Пользуясь методом ВКБ (Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна), найдите спектр дискретных уровней энергии частицы массы m в односвязной яме $u(x)$.

Раз спектр дискретный, потенциал, очевидно, должен быть таким, чтобы в интересующей нас области значений энергии E движение было финитно (пример на рис. 14.4а), это должна быть классически допустимая область. Тогда в ней будут какие-то дискретные уровни, и, поскольку мы считаем яму квазиклассической, спектр, скорее всего, будет достаточно плотным.

В принципе, движение частицы можно описывать почти как классическое. Но из классической теории мы никогда не определим дискретный спектр, там не будет

ограничений на допустимые значения энергии. А нам здесь нужно получить спектр энергий исходя из того, что мы должны построить набор состояний, описываемых такими квазиклассическими волновыми функциями.

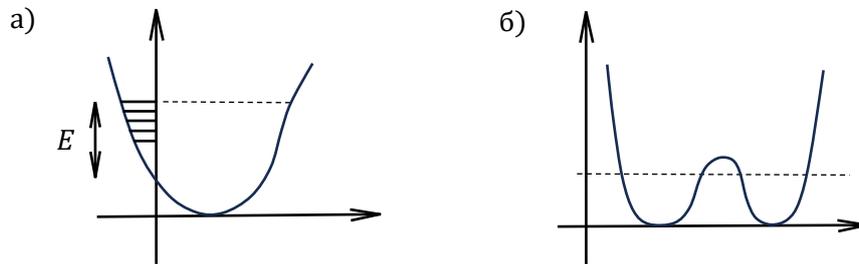


Рис. 14.4. а) Односвязный потенциал с дискретным спектром и б) неодносвязный

Односвязность ямы означает, что мы запрещаем потенциалы вроде того, что на рис. 14.4б, где при заданной энергии E может быть две и больше области классически допустимого движения. С такими вариантами надо разбираться отдельно. А с односвязной ямой мы разберёмся уже на следующей лекции.

Лекция 15. Метод ВКБ – 2

Продолжим тему квазиклассики. Мы успели выяснить две важные вещи. Во-первых, полученные методом ВКБ решения в квазиклассическом приближении для стационарных волновых функций могут быть записаны в виде произведения временной экспоненты на сумму двух сопряжённых решений с некими коэффициентами A и B :

$$\psi_E(\psi) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \left\{ \frac{A}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} + \frac{B}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} \right\} \quad (15.1)$$

В интегралах подразумевается, что верхний предел x , а нижний какая-то фиксированная точка. То есть что решения такого типа всегда могут быть записаны в квазиклассической области.

Также мы поняли, что в окрестности точек, в которых импульс проходит через ноль или меняется скачком, не выполняется квазиклассическое приближение. Поэтому решения нужно подчинять в таких точках каким-то зафиксированным условиям сшивки.

Мы проанализировали эту ситуацию, написали в явном виде некое условие сшивки для точки, у которой с одной стороны классически доступная область, а с другой классически недоступная. И обратили внимание, что можно обобщить все эти граничные условия и записать выражение для величины $\Delta\varphi$, которую будем называть разностью фаз. Чтобы оно было положительным, запишем его как

$$\Delta\varphi = \varphi_{\text{пад}} - \varphi_{\text{отр}} \quad (15.2)$$

Импульс $p(x)$ из (15.1) вычисляется для решения с заданной E как

$$p(x) \equiv \sqrt{2m(E - u(x))} \quad (15.3)$$

Мы назвали точки, где данная конструкция обращается в ноль, исходя из закона сохранения энергии, точками поворота. Для них сдвиг фазы (15.2) между падающей и отражённой волной оказался $\frac{\pi}{2}$. А при столкновении со стенкой, за которой не просто классически недоступная область, а куда частица в принципе не может проникнуть даже в квантовом случае, где точное условие, что волновая функция на этой стенке обращается в ноль, сдвиг фаз оказался π . Также могут быть граничные точки классически допустимых областей, в которых наложено циклическое граничное условие, вроде 0 и 2π для азимутальной координаты φ в полярных или сферических координатах. В этом случае никакого сдвига фазы не будет, поскольку в данной точке не происходит никакого физического отражения, это циклическая точка.

Пользуясь пониманием этого, можно решить задачу, анонсированную в прошлый раз.

Задача 1. Спектр дискретных уровней частицы в односвязной яме

Зависимость потенциальной энергии от координаты – потенциальная яма, для интересующего нас значения энергии есть две точки a и b , ограничивающие область

движения (рис. 15.1). Каждая из них относится к одному из трёх перечисленных типов. Точки с циклическим граничным условием, к слову, проявляются строго парами. От a до b финитная односвязная область движения, в которой частица может двигаться с точки зрения классической механики.

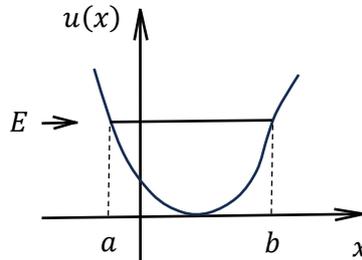


Рис. 15.1. Односвязный потенциал с дискретным спектром

В квазиклассическом случае спектр хоть и дискретный, как при всяком финитном движении, но становится очень плотным. Все линии расположены очень близко, и в окрестности почти любого значения E можно найти соответствующий дискретный уровень. И для этого уровня, если рассмотрим решение (15.1), при любой его записи, если пройдем от точки a до точки a , то есть совершим полный цикл классического механического движения, фаза волновой функции должна будет измениться на целое число, кратное 2π , ведь при попадании в ту же точку волновая функция не должна поменяться.

Сдвиг по фазе при движении от a к b будет следующим. $\Delta\varphi(b)$ будет учитываться со знаком минус, так как мы написали $\Delta\varphi$ (15.2) не как $\varphi_{\text{отр}} - \varphi_{\text{пад}}$, а наоборот, чтобы она была положительной величиной. Фазовый сдвиг при движении от b до a , когда движение классической частицы идет в противоположную сторону, будет содержать импульс $-p(x)$ и просто удвоит выражение для фазового сдвига при движении от a к b . Получится

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx - \Delta\varphi(b) + \frac{1}{\pi} \int_a^b (-p(x)) dx - \Delta\varphi(a) = 2\pi n, \quad (15.4)$$

где n – целое неотрицательное число, то есть $n = 0, 1, 2 \dots$

Это естественное периодическое условие, которое возникает для всякого стационарного состояния. То есть для любого состояния с определённой энергией волновая функция (15.1) должна ему подчиняться. Его можно переписать, сокращая множитель 2 слева и справа и перенося $\Delta\varphi$ вправо, как

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_a^b p(x) dx = n + \frac{\Delta\varphi(a) + \Delta\varphi(b)}{2\pi} \equiv n + \gamma(a, b), \quad (15.5)$$

если обозначить конструкцию

$$\frac{\Delta\varphi(a) + \Delta\varphi(b)}{2\pi} \equiv \gamma(a, b), \quad (15.6)$$

так как она определяется типом граничных условий в точках a и b .

Например, если a и b – точки поворота, как на рис. 15.1, по формуле (15.6) получится $\gamma(a, b) = \frac{\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2}}{2\pi} = \frac{1}{2}$, и (15.7) будет равно $n + \frac{1}{2}$. Минимальное значение γ равно нулю, если граница – циклические точки, а максимальное единице, если две стенки. Так что γ – число, которое $\in [0, 1]$.

Наши выкладки были не точными, мы пользовались квазиклассическим приближением. Так что здесь, с одной стороны, возникает универсальное условие

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \quad (15.7)$$

В то же время мы заметили, что здесь есть прямая аналогия для волн вероятности с переходом к эйкональному приближению в обычной оптике. Так что это условие тут можно сформулировать и немного по-другому. Если взять характерное, среднее значение волны де Бройля в промежутке от a до b , она должна быть маленькой по сравнению с размером области. То есть можно переписать (15.7) как

$$\langle \lambda \rangle \ll |b - a|, \quad (15.8)$$

Когда мы пишем такие условия, число n из (15.5), без учёта фазовых сдвигов, связанных с граничными условиями, по сути, показывает, сколько длин волн должно укладываться на пути туда и обратно. То есть $n \sim \frac{|b-a|}{\langle \lambda \rangle}$. Поэтому условие (15.8) эквивалентно тому, что на этом промежутке должно укладываться много длин волн:

$$n \gg 1 \quad (15.9)$$

Так что добавим в равенство (15.5) ещё одно слагаемое $o\left(\frac{1}{n}\right)$.

Заметим, что поправки, которыми мы пренебрегаем, должны стремиться к нулю при $n \rightarrow \infty$. Это и было условием, которое мы должны выполнить. И в целом для подавляющего большинства задач, если не придумывать очень неординарный потенциал, мы получим, что поправки будут порядка $\frac{1}{n}$, то есть следующий порядок малости. Это можно обнаружить, если проанализировать в приближении ВКБ.

Это задача Штурма – Лиувилля на собственные функции и собственные значения, поэтому можно вспомнить осцилляторную теорему. Но вообще здесь и на уровне физики понятно, что n – количество длин волн, которые укладываются на данном отрезке, когда мы сбегает туда и обратно, без учёта фазовых сдвигов на границе. А учёт фазового сдвига меняет n не больше чем на единицу.

То есть видно, что поправка γ , которую мы постарались учесть в (15.6), мала по сравнению с предыдущим слагаемым n . Но лучше оставлять выражение именно в таком виде, потому что оно даёт реальную точность. Ведь в действительности $p(x)$ при заданном потенциале $u(x)$, согласно (15.3), это некая величина, содержащая энергию уровня E , так что получившееся уравнение (15.5) при заданном $u(x)$ есть уравнение на

энергию E . Мы просто вычисляем интеграл $\int_a^b p(x) dx$ при заданном $u(x)$, и получается алгебраическое уравнение относительно E .

Это способ решения спектральной задачи в квазиклассическом приближении. Выражение (15.5) называется правилом квантования Бора – Зоммерфельда. Оно является одним из первых уравнений квантовой теории вообще, потому что после формул Планка и де Бройля следующей формулой, появившейся в арсенале квантовой теории, было условие Бора, когда он проквантовал круговые орбиты для электрона в атоме водорода. И на основе этой простой идеи, воспользовавшись таким же рассуждением, как мы сейчас, сказал, что на стационарной орбите, в состоянии с определённой энергией должно укладываться целое число длин волн. Правда, тогда он не считал это квазиклассическим приближением настоящей квантовой теории, просто думал, что строит квантовое условие, опираясь на идею де Бройля о волнах материи.

Для нас речь идёт о ситуации, когда мы рассматриваем круговую орбиту, одномерное движение с координатой φ . Канонически сопряжённым импульсом для неё является l_z , z -компонента момента импульса для угла поворота. И интеграл здесь выглядел бы как

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^{2\pi} l_z d\varphi = n, \quad (15.10)$$

где слева внизу 2π , потому что не надо идти туда и обратно, а справа $\Delta\varphi$ нули ввиду цикличности. Условие Бора с нашей точки зрения фактически было бы условием того, что l_z – целая величина, кратная \hbar , мы получили бы условие

$$l_z = n\hbar \quad (15.11)$$

Именно так квантуется орбитальный момент, его z -компонента. Но для Бора это была просто идея про волны материи, реализованная напрямую.

Позднее Зоммерфельд обобщил условие своего учителя для произвольных финитных движений, где не только цикличность, и получилась формула (15.5). Тогда она была записана именно исходя из рассуждений про волны. Зоммерфельд взял переменную длину волны, ведь в интеграле в (15.5), на месте $p(x)$, по сути, стоит $\frac{1}{\lambda(x)}$, и рассмотрел граничное условие. В первой работе у него просто стояла $\frac{1}{2}$, потому что он рассматривал ситуацию с двумя точками поворота на границах. Ведь по формуле де Бройля $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$, $\pi\hbar$ сокращается, и получается обобщение условия квантования Бора на случай одномерного финитного движения.

Потом стало понятно, как его записать более аккуратно (15.8–15.9). И самым замечательным был момент, когда оно было получено уже из правильной квантовой теории как её квазиклассическое приближение. Но для некоторых задач данное условие иногда может попасть в точную квантовую формулу, как это произошло с условием Бора для атома водорода. Там было попадание не в приближённую формулу для (15.9).

Формула Бальмера, с которой, по сути, и начались спектральные квантовые формулы, описывала переходы на уровни с $n = 1, 2, \dots$

Кстати, Бальмер, по сути, был математиком, который по легенде на спор с приятелем подобрал математическую формулу, описывающую реальный наблюдаемый спектр атома водорода. Его опубликовали, это было ещё в 19 веке, и физикам долго было непонятно, как получается такая простая формула для такого сложного явления. И когда Бор, воспользовавшись своим условием, тоже получил формулу Бальмера для частот излучения при переходах между энергетическими уровнями атома водорода, это стало эпохальным событием и считалось многими исследователями едва или не главным его достижением. Хотя главным всё-таки было создание школы, которая стала продвигать то, что теперь называют Копенгагенской трактовкой квантовой теории, которая в итоге стала доминирующей в теоретической физике. То есть Бор, по сути, поменял отношение теоретической физики к миру.

Итак, у нас есть первая и довольно простая формула (15.5). Мы обещали, что квазиклассика – это приближение, ясное по физической сути, из аналогии с переходом к геометрической оптике. Просто из понимания того, что это движение, когда всё в основном описывается законами классической механики, но есть некоторые поправки, которые из неё не получишь, вроде дискретности уровней. Также мы обещали довольно сложный математический аппарат. Чтобы получить граничные условия (15.2), при том, что мы ещё в паре мест обошли сложные моменты какими-то приёмами, всё равно пришлось использовать переход в комплексную плоскость по координате, чтобы прикинуть, как это должно выглядеть.

И, как ожидалось, мы получили простые и ясные конечные ответы. (15.5) – общая формула для определения дискретных спектров в квазиклассической области. Указанные в ней формулы работают для условия (15.9), и рецепт говорит, что, если мы хотим вычислить энергию в главном порядке по n , можем вообще не разбираться с γ , с граничными условиями, надо просто написать справа в формуле n . Если же мы хотим, чтобы ответ был справедлив ещё и в следующем порядке по n , нужно дальше написать γ , вычисленную по описанному рецепту. Если нужны следующие порядки, надо будет анализировать следующие поправки приближения ВКБ. То есть брать не только уравнения, где справа и слева приравнивали слагаемые при h^0 и h^1 , но и следующие.

Таким образом, мы получили чёткий рецепт применения квазиклассического приближения для таких задач. Его можно обобщить и на более сложные. Случай инфинитного движения рассматривать не будем, потому что при нём спектр непрерывный. Область непрерывного движения мы найдём и без уравнений вроде условия Бора – Зоммерфельда, а отдельно выделять уровни там не имеет смысла. Так что в этом случае нам будут важны другие вещи. Например, при решении точных задач для состояний непрерывного спектра при одномерном движении нас в основном интересовали коэффициенты прохождения и отражения для потенциальных барьеров или потенциальных ям, над которыми тоже может происходить отражение в квантовой

физике. Надъямное отражение – как раз один из эффектов, совсем не описываемых классической теорией.

Для случая многомерных задач, нам будет достаточно вспомнить, как в нём поступают в классической механике, ведь мы базируемся на ней и ищем поправки к случаю классического поведения. В классической механике для многомерной задачи можно воспользоваться гамильтоновой формой записи динамики. А если уж говорить о гамильтоне Якоби, о методе Гамильтона – Якоби, там идеальными переменными, в которых надо решить такую задачу, являются переменные типа «действие – угол», в которых сразу все динамические уравнения имеют максимально простой вид. И очень часто такой, что некая величина есть константа, то есть законов сохранения.

И вообще, чтобы в классической динамике выделить конкретную траекторию для системы с s степенями свободы, мы обычно выясняем, можем ли найти s независимых интегралов движения. Потому что тогда, записав s уравнений, что эти интегралы равняются каким-то постоянным значениям, взяв их в качестве переменных интегрирования, мы получаем более простую систему уравнений. Обычно интегралы движения – это функции скоростей и координат, так что мы сразу получаем систему уравнений первого порядка, а не второго. То есть проводим одно интегрирование системы дифференциальных уравнений, которые получаются из уравнений движений. При этом задав значения данных интегралов, мы вырезаем какую-то траекторию.

Точно также в квантовой теории мы можем взять некий полный набор наблюдаемых для системы с s степенями свободы, s наблюдаемых, которые попарно коммутируют между собой. Для стационарной системы очень желательно, чтобы в этот список входил гамильтониан. И тогда получаем некое состояние с определённым значением полной энергии и ещё какого-то набора интегралов движения. То есть в этом случае должно быть не одно условие (15.9) и не одно квантовое число n , нумерующее уровни энергии, как в случае одномерного финитного движения. При таком движении уровни энергии невырождены, поэтому возникает единственное квантовое число, которое пробегает значения $0, 1, 2, \dots$ и нумерует уровни энергии. Мы из уравнения (15.5), решая его, получаем E_n . А в многомерном случае должно появиться s таких уравнений, содержащих s квантовых чисел.

В классической динамике, когда мы работаем в фазовом пространстве (x_i, p_i) , где $i = 1, \dots, s$, то есть в $2s$ -мерном пространстве, где координатами являются соответствующие координаты и канонически сопряжённые к ним импульсы, для вполне интегрируемой системы – то есть такой, где существует s независимых интегралов движения, – интегралы движения уравнения $I_i = const$, где $i = 1, \dots, s$, вырезают некую s -мерную поверхность.

Для финитного движения довольно часто можно перейти к переменным действие-угол, где переменная координаты, или угла, канонически сопряжённым к которой является соответствующий инвариант движения. Мы часто можем так ввести координату,

что этот угол действительно будет пробегать некое компактное циклическое многообразие. То есть в самом деле задать его как угол на какой-то окружности, меняющийся от 0 до 2π . Тогда в таких переменных действие – угол поверхности всегда будет содержать в себе дополнительные циклические координаты. Их часто называют инвариантными циклами соответствующей фазовой поверхности, а саму фазовую поверхность в динамике часто называют инвариантным тором Лиувилля-Арнольда. Ведь если одна из переменных пробегает значения на окружности, в одномерном случае и получается окружность, а в двумерном – либо сфера, либо тор.

Задача 2. Спектр для двумерного движения в плоскости в полярных координатах

Например, возьмём двумерное движение в плоскости и введём полярные координаты. Финитное движение всегда может быть движением между ρ_{\min} и ρ_{\max} , при этом по переменной φ оно может быть совершенно произвольным. Для стационарного состояния, для периодического движения в классическом смысле это будет какая-то замкнутая траектория, лежащая между двумя окружностями (рис. 15.2).

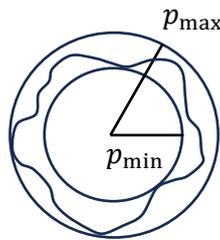


Рис. 15.2. Движение по замкнутой траектории между двумя окружностями

Поэтому в полярных координатах одна пара координат будет ρ и p_ρ , радиальная переменная и радиальная компонента импульса, а вторая φ и момент импульса L , который в случае, если силы радиально симметричны, будет ещё и интегралом движения.

Тогда условие фиксации энергии, которое будет как-то записано через L , p_ρ и внешнюю потенциальную энергию, например, зависящую от ρ , как раз будет задавать выражение для импульса. И поскольку ρ_{\min} и ρ_{\max} – это точки остановки при движении по радиусу, граница изменения ρ , в них p_ρ должно обращаться в ноль. То есть у физической частицы в точке касания внутренней или внешней поверхности импульс, скорее всего, будет направлен по касательной. Это произойдёт не для всех потенциалов, но мы рассмотрим именно такой прямолинейный случай.

Тогда сечение четырёхмерного фазового пространства с координатами ρ, p_ρ, φ, L плоскостью p_ρ будет выглядеть как на рис. 15.3а. Будет случай для движения изнутри наружу между ρ_{\min} и ρ_{\max} , где $p_\rho > 0$, в верхней полуплоскости, и симметричный ему случай, где движение снаружи внутрь, где $p_\rho < 0$. Мы получим некоторый цикл, который

является сечением гиперповерхности с $E = const$ и $L = const$ в четырёхмерном пространстве плоскостью ρp_ρ .

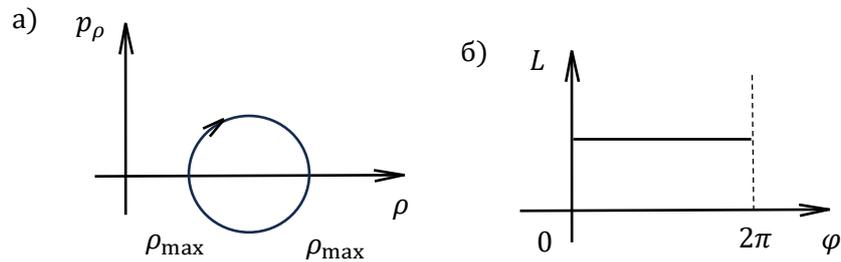


Рис. 15.3. Сечение четырёхмерного фазового пространства плоскостями а) ρp_ρ , б) ϕL

Это один из инвариантных циклов инвариантного тора Лиувилля – Арнольда в терминах математиков, описывающих эту динамику. При этом сечение плоскостью ϕL будет очень специфично. Для центрально-симметричных сил L будет просто иметь какое-то постоянное значение (рис. 15.3б). При этом движение окажется периодическим из-за того, что 2π отождествлено с 0, хоть график и не замкнутая кривая. Поэтому интегралы по $d\phi$ здесь будут легко вычисляться.

И можно записать два условия (15.5). Одно будет условием на квантование L , что L будет целым и кратным \hbar , а второе условием квантования, очень похожим на одномерное, только в формуле вместо n будет появиться квантовое число n_ρ , нумерующее радиальные возбуждения. То есть возникнет система из уравнений

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_{p_{\min}}^{p_{\max}} p(\rho) d\rho = n_\rho + \gamma_\rho + o\left(\frac{1}{n_\rho}\right) \quad (15.12)$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{p_{\min}}^{p_{\max}} L d\phi = \frac{L}{\hbar} = m + 0 + o\left(\frac{1}{m}\right) \quad (15.13)$$

В (15.12) в знаменателе множитель 2 убрался, когда мы складывали интегралы при движении туда и обратно. А в (15.13) это не произошло, так как координата циклическая, когда частица дошла до точки 2π , она снова оказалась в точке 0, возвращаться не надо. Ведь у нас основа – условие, что сдвиг фаз – целое число, кратное 2π , а остальное получается уже для конкретных случаев. γ возникло из-за того, что появились дополнительные сдвиги из-за граничных условий. Также в (15.13) справа $\gamma_\phi = 0$, так как ограничение циклическими точками.

Мы обязаны писать слагаемое $o\left(\frac{1}{m}\right)$, хотя в данном случае это условие, скорее всего, будет точным. Иногда мы получаем уравнение, из которого следует точный ответ, но сам метод ВКБ этого гарантировать не может, поскольку мы оборвали цепочку равенств на каком-то слагаемом, выписали только два первых уравнения в бесконечной рекуррентной цепочке и должны понимать, что в общем случае там могут быть поправки. Пока мы это не исследовали, не знаем, что их нет.

Получается, что для двумерной системы мы записали два уравнения, аналогичных (15.5) для одномерной. Для s -мерной будет аналогичная система из s уравнений, и она будет содержать s квантовых чисел. А будет ли энергия зависеть от них всех, или по каким-то из них станет происходить вырождение, будет определяться конкретными функциями, которые будут стоять в уравнениях, то есть конкретным решением данной системы.

Уравнения (15.12) и (15.13) можно записать в более удобном для обобщения на многомерный случай виде, в котором к тому же сразу будут учитываться все такие особенности. Если мы запишем сумму интеграла от p_ρ в положительном направлении и интеграла от $-p_\rho$ в обратном, можно будет рассматривать двумерную плоскость $p_\rho \rho$ и интеграл, который там получался, просто как контурный по контуру c_ρ от $p_\rho d\rho$ (рис. 15.3а).

Контурный интеграл совмещает в себе сумму двух интегралов, поэтому можно заменить $\int_{p_{\min}}^{p_{\max}} p(\rho) d\rho$ из (15.12) на половину контурного. И переписать уравнение (15.5), написав интеграл от $p_x dx$ как интеграл по линии в фазовой плоскости $x p_x$, определяемой условием, что энергия равняется заданному числу E . Такой контур естественно назвать контуром, отвечающим движению с определённым значением энергии, обозначим его c_E . Поскольку данный контурный интеграл – это удвоенный одномерный, чтобы сохранить в прежнее значение, нужно написать перед ним множитель $\frac{1}{2\pi\hbar}$. Тогда из (15.12) получится

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint_{c_E} p_x dx = n + \gamma + o\left(\frac{1}{n}\right) \quad (15.14)$$

Мы немного сократили запись, но считаем, что помним рецепт вычисления γ по заданным граничным условиям.

Отсюда можно вывести два замечательных следствия. Во-первых, теперь можно сказать, что для произвольной s -мерной системы мы будем находить энергию E и одновременно измеримые с ней величины, входящие в полный набор, определяющий наше состояние, как зависимость от квантовых чисел $n_1..n_s$, из следующей системы уравнений. Чтобы было больше ассоциаций с гамильтоновой динамикой, напишем их через $p_i dq_i$, где q_i – это произвольная координата системы, p_i – канонически сопряжённый с ней импульс. Мы рассматриваем общее фазовое пространство, берём гиперповерхность, определяемую условием равенства константам всех наших наблюдаемых, и её сечение плоскостью $p_i q_i$. Тогда в этой плоскости сечение данной поверхности для финитного движения, где q_i должно меняться от какого-то минимального до максимального значения, а p_i меняется как функция от q_i при зафиксированных значениях всех наблюдаемых, в данном случае $E,..(n_1..n_s)$, всегда представляет какой-то замкнутый контур (рис. 15.4). И именно по нему ведём интегрирование.

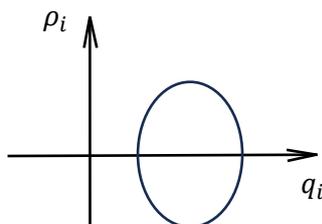


Рис. 15.4. Пример замкнутого контура в сечении гиперповерхности плоскостью $q_i p_i$

Мы так подробно это прописали, чтобы прочувствовать, что это чётко сформулированный рецепт, базирующийся на гамильтоновом подходе классической динамики. То есть мы вычисляем величину $\oint_{c_i} p_i dq_i$ на базе классической динамики. Справа появляются соответствующие квантовые числа n_i для каждого измерения. Также для каждого измерения мы считаем γ_i как величину в интервале от 0 до 1, определяемую граничными условиями на траектории с рис. 15.4. Дальше будет $o\left(\frac{1}{n}\right)$, а не $o\left(\frac{1}{n_i}\right)$, потому что в многомерном случае, чтобы движение было квазиклассическим, оно должно быть таковым по всем измерениям одновременно. Нельзя, чтобы по одной оси частица двигалась квазиклассически, а по другой было существенно квантовое поведение. В реальности подобное может случиться, но тогда для такой системы нужно будет строить синтезированное описание, когда по одной наблюдаемой построим честное решение уравнения Шредингера, а по другой будем писать ВКБ-решение. А в общем случае, если описание квазиклассическое, мы считаем, что движение квазиклассично по всем измерениям в многомерной системе.

В итоге получается система из s уравнений

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint_{c_i} p_i dq_i = n_i + \gamma_i + o\left(\frac{1}{n}\right) \quad (15.15)$$

Интеграл здесь всегда вычисляется как функция, содержащая значения наблюдаемых $E, \dots (n_1, \dots, n_s)$ в данном состоянии. Именно значения наблюдаемых полного набора и определяют это квантовое состояние, значения данных наблюдаемых в нём определяются из уравнений (15.15). В том числе можно найти и энергию, если она входит в этот список, как функцию всех квантовых чисел. Симметрии, которые могут возникать в этой системе, могут приводить к вырождениям, когда от какого-то из квантовых чисел энергия зависеть не будет.

Так как осознать описанное сходило не просто, можно рассмотреть очень полезный пример. Во многих учебниках, где разбирается многомерный случай для квазиклассики, для правила Бора – Зоммерфельда, берётся именно он, потому что он относительно компактный и более-менее понятный. Хотя даже здесь на лекции мы не можем позволить себе его разобрать, потому что на это уйдёт минимум половина лекции.

Там трёхмерный случай, сферически симметричное поле, можно для определённости взять кулоновское, оно даже лучше, потому что с ним сразу получится

пример вырождения. Надо найти рассмотренным методом спектр энергий, предсказываемых для трёхмерного атома водорода. Бор в 1910–1911 годах ограничился круговыми орбитами в одной плоскости, фактически редуцировал трёхмерное движение до одномерного. Одной из первых задач Зоммерфельда как раз и было честно решить эту задачу в трёхмерном случае, что и привело его к подобным рассуждениям. Нужно воспроизвести результат Зоммерфельда с поправкой на то, что он расписан почти во всех учебниках, и можно при необходимости туда посмотреть. Ответ легко проверяется, потому что в этом случае Бор – Зоммерфельд выдаёт точный ответ. Мы должны будем получить $\frac{1}{n^2}$, где n – главное квантовое число, равное $n_r + l + 1$. Ещё одно замечательное свойство этой задачи – что в ней все интегралы считаются в элементарных функциях. Ничего, не укладывающегося в описанную схему, не будет. Полезно увидеть, как это происходит в реальной задаче, с реальным потенциалом и реальными функциями под интегралом, убедиться, что всё работает, и к тому же получить точный ответ.

Отвлекаясь от более сложных записи и рецепта для многомерных систем, нужно понять, что для одномерной системы задача получилась очень простой. Как только мы записываем классическое выражение для импульса, вычисляем интеграл в (15.14), то сразу получаем алгебраическое уравнение для нахождения E как функции n . Причём в записи (15.14) правая часть действительно указывает на то, что это работает для высоколежащих уровней энергии, для которых выполняется условие (15.9). И ещё эта формула даёт рецепт контроля точности. Может случиться так, что реальная точность формулы будет выше, чем даёт этот рецепт, но точно не ниже, то есть мы чётко понимаем, как можем ошибиться.

Следствия для структуры спектра

Кроме этого, у данной формы записи есть два замечательных следствия. Первое состоит в следующем. Мы понимаем, что в нормальной ситуации для финитного движения для одномерной системы фазовая траектория c_E для состояний с большими энергиями E будет более обширной, чем фазовая траектория с меньшими, последние будут как бы лежать внутри неё. С одной стороны, это естественное понимание того, что квантовое число n нумерует уровни энергии в порядке возрастания. Из данного соображения можно утверждать, что с ростом c_E значение интеграла увеличивается, значит, это будет отвечать всё большим n . Именно так мы обычно и действуем, и получается такой результат.

Но ведь это означает, что, если мы посчитали номер n , это будет номер состояния с заданной энергией и одновременно число всех состояний с энергией, не превышающей заданную. То есть число состояний с $E_n \leq E$ можно оценить по порядку величины с помощью формулы (15.14). Величинами γ и $\frac{1}{n}$ в этом случае можно пренебречь, так что

$$N \approx \frac{1}{2\pi\hbar} \oint_{c_E} p_x dx \quad (15.16)$$

Геометрический смысл данного контурного интеграла можно понять сразу или записав его как $\oint_{c_E} p_\rho d\rho$. На самом деле это площадь участка фазовой плоскости внутри соответствующего контура (рис. 15.5).

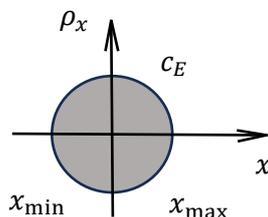


Рис. 15.5. Площадь участка фазовой плоскости внутри контура c_E

То есть нам открывается новый смысл постоянной Планка. Условие (15.16) говорит, что $2\pi\hbar \equiv h$ – это площадь фазовой плоскости, на которой помещается одно квантовое состояние. В следующем семестре начнётся теоретическая статистическая физика, и одним из первых, что попросят вспомнить, будет микроканоническое распределение Гиббса, его гипотеза о том, что число микросостояний, которым реализуется данное макросостояние, пропорционально фазовому объёму системы. Мы только что обосновали эту гипотезу с одной маленькой поправкой: Гиббс сформулировал её задолго до того, как появилась постоянна Планка и тем более результат (15.16). У него эта идея возникла из естественных соображений.

Сейчас мы видим, что с точки зрения квантовой механики это естественное следствие попытки описать на её языке большие макроскопические системы. Количество микросостояний, которым реализуется данное макросостояние, действительно оказывается, например, для одномерной системы, пропорциональным фазовой площади. Причём мы даже знаем размер фазовой клеточки и так и будем говорить, что $2\pi\hbar \equiv h$ – это «фазовая клетка», содержащая одно состояние.

Теперь это можно легко обобщить на случай многомерной системы. Ведь если система допускает факторизацию, и можно независимо описать движение по каждой из осей – а результат, полученный для таких систем, должен быть обобщён на произвольные, – полный фазовый объём будет произведением фазовых площадок по каждой координате, по каждому срезу $p_i q_i$. И полное число состояний будет произведением числа состояний движения по каждой из координат. Это будет полное число состояний движения нашей квантовой системы.

Мы помним, что у квантовых систем бывают наблюдаемые, не имеющие классического аналога, не связанные с их механическим движением. Например, спиновые, изоспиновые состояния или что-то подобное. Тогда нужно будет ещё домножить на число таких состояний.

То есть обобщением результата (15.16) является результат, что полное число квантовых состояний, реализующих некое квазиклассическое макроскопическое состояние нашей системы, равно фазовому объёму этой системы, если это всё-таки

система частиц в трёхмерном пространстве, разделённому на $(2\pi\hbar)^3$, что даст квазиклассическое число состояний движения, и умноженному, например, на $2s + 1$, если частицы ещё имеют спин s :

$$N_{\text{кв}} = \frac{V_{\phi}}{(2\pi\hbar)^3} (2s + 1) \quad (15.17)$$

Это квазиклассическая формула для числа квантовых состояний точечного микрообъекта со спином s , помещённого в обычное трёхмерное евклидово пространство. При этом фазовый объём – это объём в координатно-импульсном пространстве, который соответствует данному макроскопическому состоянию.

Формула (15.17) – это второй замечательный результат квазиклассического приближения, который активно используется при анализе поведения квазиклассических систем. Первым было правило Бора – Зоммерфельда (15.14), записанное через контурные интегралы в фазовой плоскости. И на его базе мы пришли к формуле (15.17), для которой увидим на семинаре, как ей можно воспользоваться и как она принесёт пользу при анализе конкретных систем.

Но мы обещали три замечательных простых результата, которые потом будем использовать на практике. Помимо формулы (15.14) для подсчёта уровней энергии и формулы (15.17) для подсчёта числа состояний есть ещё одна, отвечающая инфинитному движению, то есть случаю, когда надо исследовать коэффициенты прохождения и отражения. Это тоже можно сделать в квазиклассическом приближении.

Если внимательно посмотреть на выражение (15.14), можно сделать ещё одну интересную вещь. Продифференцируем (15.14) по n . В правой части получится единица. p_x на нашем контуре на самом деле зависит от E , ведь сам контур C_E , по которому ведётся интегрирование, содержит зависимость от неё. Поэтому перепишем выражение под интегралом как $\frac{\partial p_x}{\partial E} \frac{dE}{dn} dx$. Предполагается, что мы берём выражение для p_x через E , дифференцируем его по E при прочих постоянных, там же ещё есть зависимость, например, от x , и подставляем. А $\frac{dE}{dn}$ – это уже прямая производная, поскольку уравнение (15.14) связывает E с n однозначно. Тогда из (15.14), если поменять местами право и лево, получится

$$1 = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint_{C_E} \frac{\partial p_x}{\partial E} \frac{dE}{dn} dx \quad (15.18)$$

Номер должен бегать где-то в области больших значений n , так что $\Delta n = 1$ можно считать маленьким его изменением для квазиклассических движений и для него примерно записать

$$\frac{dE}{dn} = \frac{\Delta E}{\Delta n}, \quad (15.19)$$

Тогда из формулы (15.18) соответствующая разность ΔE между соседними уровнями должна удовлетворять равенству

$$2\pi\hbar = |\Delta E| \cdot \oint_{c_E} \left| \frac{\partial p_x}{\partial E} \right| dx \quad (15.20)$$

Модуль взяли, чтобы сейчас не беспокоиться о знаке.

С другой стороны, здесь

$$p_x = \sqrt{2m(E - u(x))} \quad (15.21)$$

Если формально продифференцируем его по E , получится

$$\frac{\partial p_x}{\partial E} = \frac{\sqrt{2m}}{\sqrt{2m(E - u(x))}} \quad (15.22)$$

$E - u(x)$ можно воспринимать как кинетическую энергию $\frac{mv^2}{2}$, тогда (15.22) будет равно $\frac{1}{v}$, где v – скорость движения в данной точке. Соответственно, под знаком интеграла в (15.20) стоит $\frac{dx}{v} = dt$. Интеграл от dt по всему периоду движения – это временной период движения T , $\oint_{c_E} \left| \frac{\partial p_x}{\partial E} \right| dx = T$, и из (15.20) получится

$$2\pi\hbar = |\Delta E| \cdot T \quad (15.23)$$

В результате мы получаем третью замечательную формулу, которая важна не столько для расчётов, сколько для понимания структуры спектра. Ведь после того, как мы отправим T в (15.23) влево, $\frac{2\pi}{T}$ будет классической частотой движения при энергии E . И мы обнаружим, что $|\Delta E|$, то есть расстояние до соседнего уровня от квазиклассического уровня с энергией E , это

$$|\Delta E| = \hbar\omega(E), \quad (15.24)$$

где ω – частота классического движения с энергией E , мы даже подчеркнули это прямой записью в скобках.

То есть расстояние между соседними уровнями, плотность числа состояний в энергетическом спектре определяется классическими частотами, если мы имеем в виду спектр, рассчитанный в квазиклассическом приближении. В области, где они низкие, спектр получается более плотным, а где высокие, уровни расходятся дальше друг от друга, и спектр менее плотный.

Данный принцип часто помогает при качественном анализе вида спектра, мы его может лучше себе представить, понимая прямолинейную связь (15.24). Видно, что и этот итоговый результат очень простой.

Перейдём к третьей формуле, которую обещали. В квазиклассическом приближении частицы ведут себя почти классическим образом. То есть, если энергия инфинитного движения выше потенциальной энергии в любой точке, классическая частица совершает движение в одном направлении. Она никогда не развернётся, потому что у неё нигде не будет точки остановки. И напротив, если у неё есть точка остановки, она обязательно развернётся.

В квантовой теории в качестве слабой поправки как раз есть два принципиально неклассических эффекта. Частица может развернуться, идя с энергией больше максимума потенциальной, то есть высоты потенциального барьера, поставленного перед ней. И может пройти через барьер, обладая энергией меньшей, чем его высота.

Оба этих эффекта описываются очень похожим образом. Более важный с практической точки зрения не эффект надбарьерного или надбарьерного отражения, а эффект подбарьерного прохождения.

Туннельный эффект

Речь идёт о ситуации, когда потенциальная энергия как функция x – некий, сразу скажем, односвязный барьер (рис. 15.6). Пусть частица налетает на него с энергией E . За барьером будет только прошедшая волна, а перед ним падающая и отражённая. Причём мы знаем, что поток вероятности в волне вероятности сохраняется, поэтому поток вероятности в падающей волне будет суммой потоков вероятности в прошедшей и отражённой. С этим мы разбирались ещё в общей, даже не квазиклассической теории.

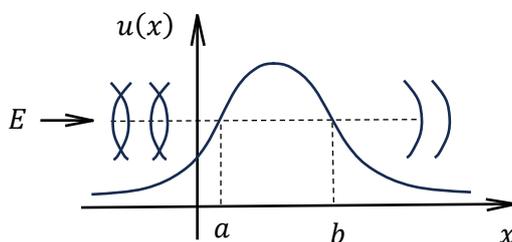


Рис. 15.6. Односвязный потенциальный барьер и волны по обе стороны от него

Можем ли мы посчитать коэффициент прохождения $T(E)$, используя метод ВКБ, $T_{\text{ВКБ}}(E)$?

Ответ можно получить весьма просто. В квазиклассическом решении в классически запрещённой области, выделенной пунктиром на рис. 15.6, мы в такой ситуации должны видеть экспоненциально убывающую волну. Поскольку справа нет волны, приходящей справа, там должна быть только волна, уходящая направо, к ней должно приводить какое-то убывающее экспоненциальное поведение.

Поскольку поток вероятности будет пропорционален квадрату амплитуды, $T_{\text{ВКБ}}(E)$ в рамках такого подхода должен быть примерно равен квадрату модуля отношения амплитуды прошедшей волны к амплитуде падающей:

$$T_{\text{ВКБ}}(E) \approx \left| \frac{A_{\text{прош}}}{A_{\text{пад}}} \right|^2 \quad (15.25)$$

Мы здесь рассматриваем случай, когда асимптотические значения потенциальной энергии на плюс и минус бесконечности одинаковы. И берём их за начало отсчёта, чтобы в формуле (15.25) не появлялось дополнительного отношения k , отвечающего отношению потоков. При желании его всегда можно добавить, но тогда анализ получится более сложным.

А здесь, поскольку амплитуды прошедшей и падающей волн должны быть связаны через упомянутое экспоненциально убывающее решение, вводя границы теперь уже классически запрещённой области a и b , на рис. 15.6 это точки поворота, получим, что (15.25) будет равно

$$\left| e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx} \right|^2 \equiv e^{-\frac{2}{\hbar} S_0}, \quad (15.26)$$

если для краткости обозначим, как обычно,

$$S_0 = \int_a^b |p(x)| dx = \int_a^b \sqrt{2m(E - u(x))} dx \quad (15.27)$$

Это формальное вычисление классического действия на классически запрещённой подбарьерной части траектории. Формальное, потому что честное вычисление $p(x)$ дало бы мнимое значение из-за того, что во всей этой области всегда $E < u(x)$, и $E - u(x) < 0$. Так что формально классический импульс тут получается мнимым, на то она и классически недоступная область, но мы пишем $|p(x)|$, и мнимая единица исчезает.

Если провести аккуратные вычисления, ограничиваясь тем же порядком малости, который мы использовали при построении квазиклассического решения, ответ получится точно таким же.

Такой экспоненциальный характер формулы (15.26) обязывает нас к очень многому. Зависимость $e^{-\frac{2}{\hbar} S_0}$ от S_0 очень резкая. А ведь на самом деле, как мы заметили, квазиклассическое приближение применимо, когда характерная длина волны, что-то вроде $\frac{\hbar}{|p|}$, значительно меньше размеров препятствия, в данном случае $b - a$. На языке интеграла (15.27) данное условие применимости будет выглядеть как

$$S_0 \gg \hbar \quad (15.28)$$

А в показателе экспоненты в (15.26) стоит $-\frac{2}{\hbar} S_0$. То есть, если мы хотим, чтобы точность была хотя бы на уровне 10%, исходя из такого общего критерия, должны будем потребовать, чтобы было хотя бы $S_0 = 10\hbar$. Но тогда в (15.26) получится e^{-20} . Поскольку e^{-3} это уже примерно 10^{-1} , то $e^{-20} \approx 10^{-7}$.

Значит, если мы посчитали коэффициент прохождения для барьера по этой формуле, и результат получился, например, 0,01, его нужно выбросить, он может ошибаться даже по порядку величины. Более-менее правильные порядки получаются, когда $T_{\text{ВКБ}}(E) < 10^{-5}$, а лучше ещё меньше. Совсем хорошо, когда он порядка 10^{-15} , тогда порядок величины почти наверняка правильный.

Есть ещё одна проблема. Как мы помним, для корректности квазиклассического приближения необходимо требование (15.28). Но его недостаточно, потому что существуют граничные условия в точках, разграничивающих классически допустимые и классически недоступные области. В задачах о подбарьерном прохождении, туннельном эффекте, они обязательно есть. Как мы помним, там требованием сводилось ещё к тому, что в окрестности этой точки потенциальная энергия менялась достаточно медленно. Потому что именно это обеспечит то, что изменение импульса на расстояниях порядка дебройлевской длины волны оказывается намного меньше самого импульса. А это было одним из условий, которым мы пользовались при выводе общего квазиклассического решения.

Задача 3. Коэффициент прохождения для прямоугольного барьера

Можно взять какой-то простой барьер $u(x)$. Например, как делается во многих учебниках, прямоугольный высотой u_0 и шириной L (рис. 15.7). Для кусочно-постоянной задачи мы можем честно решить уравнение Шредингера в трёх областях, сшить и получить честное выражение для коэффициента прохождения для любой энергии меньше u_0 . То есть получить честный ответ, а потом сравнивать его с тем, что даёт ВКБ-приближение. Тогда мы убедимся, что реальный ответ может отличаться от ответа ВКБ-приближения при выполнении требования (15.28) хоть и не на порядок, но в несколько раз. Даже для случая, когда, казалось бы, E не подходит слишком близко к u_0 . А чем ближе она подходит к u_0 , тем сильнее падает точность.

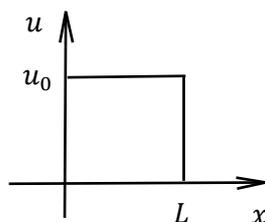


Рис. 15.7. Прямоугольный потенциальный барьер

Это связано с тем, что у данного, казалось бы, простого барьера, мы сделали резкую границу, стенку в нуле, где потенциал меняется на конечную величину на бесконечно узком интервале. Это обеспечивает появление в формуле (15.26) предэкспоненциального множителя, который может довольно существенно отличаться от единицы.

Мы честно вычислили всё для такого прямоугольного барьера. Получилось, что точное (exact) значение коэффициента проницаемости

$$T_{ex}(E) = \frac{16\beta^2}{(1 + \beta^2)(1 + \beta)^2} e^{-\frac{2S_0}{\hbar}} \quad (15.29)$$

$e^{-\frac{2S_0}{\hbar}}$ – как раз интересующая нас величина. Параметром β обозначена величина

$$\beta \equiv \sqrt{\frac{u_0}{E} - 1} \quad (15.30)$$

Предэкспоненциальный множитель $\frac{16\beta^2}{(1+\beta^2)(1+\beta)^2}$, который обозначим символом κ , как функция β выходит из нуля, при $\beta = 1$ имеет максимум, равный 2, а потом довольно плавно убывает, так, что при $\beta \approx 5$ оказывается чуть меньше 0,5 (рис. 15.8). Так что в интервале примерно от 0,2 до 5 он отличается от единицы не более чем в два раза. То есть действительно существует довольно широкий интервал значений β , в котором этот предэкспоненциальный множитель не очень сильно влияет на величину коэффициента прохождения.

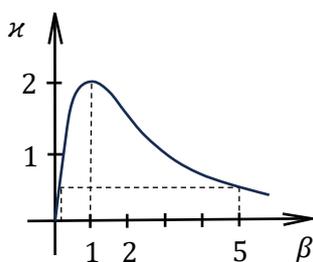


Рис. 15.8. График предэкспоненциального множителя

При этом β ещё будет входить в (15.29) в

$$S_0 = \beta \cdot ka = \beta \frac{2\pi a}{\lambda}, \quad (15.31)$$

где λ – дебройлевская длина волны. Для заданной энергии E она в нашем случае константа. Ведь разность $u_0 - E$ постоянна, и мы формально можем вычислить $|p|$, который является константой. И, приравняв его к $\frac{\hbar}{\lambda}$, посчитать дебройлевскую λ , которая тоже будет константой. То есть β входит в показатель экспоненты в (15.29), но $e^{-\frac{2S_0}{\hbar}} = T_{\text{ВКБ}}(E)$, отличие от него даёт только предэкспоненциальный множитель.

Даже этот пример показывает, что при достаточно резком поведении потенциальной энергии на границе барьера отличие в два раза нужно считать хорошим согласием, потому что оно достигается в некотором конкретном диапазоне значений β . Если же мы взяли слишком маленький или большой β , то есть сделали энергии близкими к 0 или к u_0 , ошибка окажется существенно больше, чем в два раза, может даже отличаться на порядок.

То есть, как показывает опыт, этот результат ВКБ даёт правильное значение по порядку величины для ситуации, когда в районе границ подбарьерной области потенциал меняется достаточно медленно. Тогда ошибки на порядок, как можно узнать

из опыта анализа численных значений для конкретных барьеров, почти исключены. Обычно подбирается барьер, для которого известно точное решение, чаще как раз прямоугольный, и считается по ВКБ, тогда можно увидеть реальную точность данного метода.

То есть вывод следующий. Мы можем пользоваться ВКБ приближением, но должны понимать, что для очень многих барьеров его формула будет давать правильный результат по порядку величины. И требовать от него не оценочное, а точное значение, опираясь на формулу (15.29), нельзя.

Были попытки вывести альтернативные формулы, которые были бы более точными в рамках ВКБ-приближения. Но при их испытании на реальных барьерах всегда приходишь к выводу, что, чтобы действительно получить предсказание не по порядку величины, а которое можно считать корректным числовым предсказанием, обязательно придётся залезть в следующие порядки ВКБ-приближения. Остаться в том порядке, который анализировали мы, и добиться лучшей точности реально невозможно.

Хотя некоторые формулы, претендующие на это, есть. Но они предназначены в основном для того, чтобы получить более правильное поведение $T(E)$ в области больших значений T , когда оно становится несколько сотых или одной десятой. Но в действительности мы должны понимать, что это подгон, изначально наш метод не предполагал, что мы будем пользоваться этой формулой для случая, когда, например, $S_0 = 0,5\hbar$, а $E^{-1} > \frac{1}{3}$. Не говоря уже про $S_0 = 2\hbar$. Формально мы там получим маленький коэффициент прохождения, но порядка нескольких сотых. Это будет не совсем хорошо с точки зрения честной теории.

Лекция 16. Стационарная теория возмущений

Метод теории возмущений в спектральной задаче для гамильтониана

На данной лекции мы рассмотрим самый употребимый метод приближённых вычислений в теоретической физике – стационарную теорию возмущений. Стационарную, потому что мы пока занимаемся стационарными задачами. То есть наша основная задача – спектральная задача для гамильтониана

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (16.1)$$

Мы ищем собственные вектора и собственные значения оператора \hat{H} .

Метод теории возмущений используется в случаях, когда можно разбить гамильтониан \hat{H} на два слагаемых

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (16.2)$$

к которым предъявлены два требования.

Для \hat{H}_0 мы должны знать решения задачи (16.1), то есть его уровни энергии, которые для отличия будем обозначать $E^{(0)}$, и соответствующие собственные вектора $|\psi^{(0)}\rangle$. Для удобства в первую очередь введём мультииндекс n , набор квантовых чисел, нумерующий уровни энергии. Это может быть один индекс или несколько, если система многомерная. Собственные вектора, относящиеся к уровню энергии, тоже можно занумеровать этими индексами. Но, поскольку уровни энергии бывают вырожденными, этих индексов может оказаться недостаточно. Введём дополнительный индекс α , который всегда будет пробегать значения $\alpha = 1, \dots, s_n$, где s_n – кратность вырождения энергии $E_n^{(0)}$:

$$s_n \equiv s(E_n^{(0)}) \quad (16.3)$$

То есть получается

$$\hat{H}_0 |\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle \quad (16.4)$$

В дальнейшем будем называть \hat{H}_0 невозмущённым гамильтонианом, а оператор \hat{V} возмущением. Соответственно, $E_n^{(0)}$ – это невозмущённые уровни энергии, а $|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$ – невозмущённые собственные вектора соответствующего гамильтониана. Такая схема нумерации фиксирована для всех подобных задач, α пробегает совершенно определённый набор значений, зависящий от кратности вырождения уровней.

От возмущения \hat{V} нужно потребовать, чтобы его влияние на решение задачи было мало. Но в таком виде это довольно абстрактное требование. Сказать, что \hat{V} мал, нельзя, потому что, во-первых, это оператор, а мы не вводили понятие его нормы, во-вторых, это размерная величина, размерности энергии, поэтому её величина зависит от единиц измерения, даже если мы говорим о собственных значениях оператора \hat{V} , числах, а не о

нём самом. Поэтому установить требование к оператору \hat{V} , которое обеспечит малость его влияния на решение задачи, мы должны в процессе построения приближённого решения. То есть это задача, которую надо решить вместе с нахождением формул для приближённого решения.

Базовая идея теории возмущений состоит в том, что мы ищем решение точной задачи в виде разложения по степеням влияния возмущения. Во многих книгах можно увидеть технический приём, что к оператору возмущения дополнительным множителем вводят условный параметр ε , признак степени влияния оператора \hat{V} , который даже можно считать впоследствии равным единице. Если в задаче есть свой маленький безразмерный параметр, его можно использовать в данном качестве. Но даже если нет, его можно ввести, приравнять к единице, и тогда мы по его степени будем определять степень данного слагаемого по отношению к оператору возмущения.

Однако мы сейчас просто будем следить за этой степенью, поэтому пользоваться таким формальным параметром разложения не станем. Просто скажем, что наш метод стационарной теории возмущений (СТВ), где термин «стационарной» относится к решаемой задаче (16.1), состоит в том, что мы предполагаем, что изменение решения для точного гамильтониана \hat{H} (16.1) небольшое по отношению к решению, построенному для невозмущённого гамильтониана \hat{H}_0 (16.4). Поэтому предполагается, что уровни энергии гамильтониана \hat{H} можно нумеровать теми же самыми квантовыми числами n и α . Как мы помним, наличие вырождения всегда связано с какой-то симметрией гамильтониана, в данном случае \hat{H}_0 . Добавление оператора \hat{V} может её сохранять, и тогда вырождение, скорее всего, сохранится, а может нарушать, и тогда вырождение будет сниматься, и уровни энергии точной задачи уже могут зависеть от α .

Но мы при этом считаем, что в самом низшем нулевом порядке по возмущению, самом грубом приближении мы получаем решение исходной задачи (16.4) $E_n^{(0)}$, а дальше пойдут поправки, которые в принципе тоже могут зависеть от α :

$$E_{n\alpha} = E_n^{(0)} + E_{n\alpha}^{(1)} + \dots \quad (16.5)$$

Аналогично для собственного вектора

$$|\psi_{n\alpha}\rangle = |\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle + |\psi_{n\alpha}^{(1)}\rangle + \dots \quad (16.6)$$

$|\psi_{n\alpha}^{(1)}\rangle$ – поправки первого порядка по влиянию возмущения.

Сам со себе метод будет очень простой. Мы должны подставить в точное уравнение (16.1) выражение (16.2) и ряды теории возмущений (16.5) и (16.6), а потом разбить их на рекуррентную последовательность уравнений, где мы приравниваем справа и слева слагаемые одного и того же порядка по влиянию возмущений. После подстановки уравнение (16.1) приобретёт вид, где справа, в $(\hat{H}_0 + \hat{V})$, \hat{V} уже слагаемое первого порядка по возмущению:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) \left(|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle + |\psi_{n\alpha}^{(1)}\rangle + \dots \right) = \left(E_n^{(0)} + E_{n\alpha}^{(1)} + \dots \right) \left(|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle + |\psi_{n\alpha}^{(1)}\rangle + \dots \right) \quad (16.7)$$

Выражение получилось длинным, но это простые арифметические действия. Ограничимся порядком V^0 , то есть возьмём только то, что получается, если убрать возмущение, из уравнения (16.7) везде выделим слагаемые нулевой степени – а это \hat{H}_0 и $|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$ слева и $E_n^{(0)}$ и $|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$ справа. Тогда придём к уравнению на собственные функции и собственные значения гамильтониана \hat{H}_0 (16.4), которое по нашему предположению для них уже выполнено. Так что в порядке V^0 получим тождество (16.4), ведь это определение $|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$ и $E_n^{(0)}$, мы их каким-то образом получаем из решения данной невозмущённой задачи.

А для анализа всего дальнейшего удобно будет рассмотреть две разные ситуации. Первая будет более простой, вторая более сложной.

Поправки в случае невырожденного спектра

Случай 1) будет относиться к ситуации, когда $s_n = 1$, то есть когда невозмущённый уровень энергии $E_n^{(0)}$, который мы дальше хотим исследовать, является невырожденным. Тогда индекс α пробегает единственное значение $\alpha = 1$, его можно убрать.

В этом случае в первом порядке по возмущению V^1 получится уравнение, где операторы нулевого порядка из (16.7) действуют на слагаемые первого, а операторы первого на слагаемые нулевого:

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{V} |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (16.8)$$

Оно, по сути, является уравнением для определения поправок первого порядка к энергии $E_n^{(1)}$ и к соответствующему собственному вектору $|\psi_n^{(1)}\rangle$.

Набор собственных векторов эрмитова оператора \hat{H}_0 является полным в гильбертовом пространстве чистых состояний нашей системы. Будем считать, что, решая задачу для данного гамильтониана (16.4), мы не просто получили его собственные вектора $|\psi_n^{(0)}\rangle$, но и произвели процедуру ортогонализации, и теперь $|\psi_n^{(0)}\rangle$ – полный ортонормированный базис. Тогда можно записать вектор $|\psi_n^{(1)}\rangle$ в виде разложения по нему как

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_k c_{nk} |\psi_k^{(0)}\rangle, \quad (16.9)$$

c_{nk} – коэффициент разложения, k – просто другое значение индекса, нумерующего собственные значения энергии и собственные вектора невозмущённого гамильтониана \hat{H}_0 .

Подставим разложение (16.9) в соотношение (16.8), получатся два разложения справа и слева. И их них можно будет выделить нужные слагаемые с помощью скалярного умножения на сопряжённый вектор. При подставлении в первом слагаемом слева в (16.8) гамильтониан \hat{H}_0 пройдёт через сумму и число c_{nk} и подействует на свой собственный вектор $|\psi_k^{(0)}\rangle$, вытащив своё собственное значение $E_k^{(0)}$. Во втором слагаемом нет никакого разложения, там стоит известный вектор $|\psi_n^{(0)}\rangle$. Аналогично произойдёт в правой части, и будет

$$\sum_k c_{nk} E_k^{(0)} |\psi_k^{(0)}\rangle + \hat{V} |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_k c_{nk} E_n^{(0)} |\psi_k^{(0)}\rangle \quad (16.10)$$

Если мы скалярно умножим соотношение (16.10) на сопряжённый вектор, например, на $\langle\psi_n^{(0)}|$, из суммы слева выживет только одно слагаемое, где $k = n$, потому что скалярное произведение $\langle\psi_n^{(0)}|$ на $|\psi_k^{(0)}\rangle$ в силу ортонормированности базиса выдаст символ Кронекера δ_{nk} , и снимется суммирование по k . То есть останется $c_{nn} E_n^{(0)}$.

Дальше от второго слагаемого возникнет матричный элемент оператора возмущения \hat{V} между двумя собственными векторами невозмущённого гамильтониана $|\psi_n^{(0)}\rangle$ и $|\psi_k^{(0)}\rangle$. Его логично для краткости обозначить V_{nk} , это матричные элементы оператора возмущения \hat{V} по базису из собственных векторов невозмущённого гамильтониана. Можно считать и для другого бра-вектора, например $\langle\psi_m^{(0)}|$, тогда получится недиагональный матричный элемент, а у нас получился диагональный.

Справа из первого слагаемого будет $E_n^{(1)}$, а из суммы тоже выживет только слагаемое при $k = n$, и из (16.10) получится

$$c_{nn} E_n^{(0)} + V_{nn} = E_n^{(1)} + c_n E_n^{(0)} \quad (16.11)$$

Слагаемые $c_{nn} E_n^{(0)}$ слева и справа сокращаются. Следовательно, мы нашли поправку к энергии первого порядка. В случае невырожденного невозмущённого уровня энергии $E_n^{(0)}$ она очень естественно является просто средним значением энергии возмущения по невозмущённому состоянию, то есть диагональным матричным элементом матрицы оператора \hat{V} в базисе из $|\psi_n^{(0)}\rangle$:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} \quad (16.12)$$

Также мы понимаем, что на множитель c_{nn} равенство (16.11) не накладывает никаких требований, он остаётся произвольным, от изменения его значения равенство не нарушится.

А если возьмём $n' \neq n$ и скалярно умножим равенство (16.10) на $\langle \psi_{n'}^{(0)} |$, в первом слагаемом получится $c_{nn'}$, так как возникнет $\delta_{kn'}$, и $E_{n'}^{(0)}$. Во втором возникнет недиагональный матричный элемент $V_{n'n}$. Справа будет слагаемое с $c_{nn'}$ и $E_n^{(0)}$, которое останется на месте, потому что изначально там стояло в (16.10). А слагаемое $E^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle$ выпадет при $n' \neq n$, скалярное произведение $\langle \psi_{n'}^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle$ выдаст ноль. То есть получится уравнение

$$c_{nn'} E_{n'}^{(0)} + V_{n'n} = c_{nn'} E_n^{(0)} \quad (16.13)$$

Из чего коэффициенты разложения $|\psi_n^{(1)}\rangle$ по базису из векторов невозмущённого гамильтониана $|\psi_k^{(0)}\rangle$ через недиагональный матричный элемент оператора возмущения и значения невозмущённых уровней энергии

$$c_{nn'} = \frac{V_{nn'}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \quad (16.14)$$

Мы ещё не закончили нахождение поправок первого порядка, потому что остался невыясненным коэффициент c_{nn} в (16.11). Можно сказать, что раз от него ничего не зависит, его можно выбрать как удобно. Но в действительности произвола в этом выборе нет, потому что мы захотим построить и для гамильтониана \hat{H} нормированные на единицу собственные вектора. Так что к этой задаче должно быть добавлено условие нормировки. И здесь, поскольку $|\psi_n^{(1)}\rangle$ – это поправка к значению собственного вектора в первом порядке по влиянию возмущений, логично потребовать, чтобы условие нормировки тоже выполнялось в нём. Требовать от нормировочного коэффициента, чтобы он приводил норму вектора $|\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle$ к единице в произвольном порядке по V опрометчиво и, по сути, бессмысленно, ведь мы сам вектор знаем с точностью только до первых поправок.

Итак, наложим на вектор условие нормировки. Логично записать его в виде

$$\| |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle \|^2 = 1 + o(V^2), \quad (16.15)$$

где $o(V^2)$ – поправки, связанные со второй степенью влияния оператора \hat{V} на структуру решения. Можно написать норму или её квадрат, всё равно это должно равняться единице с точностью до того же порядка поправок.

Подставим в (16.15) разложение (16.9). При векторе $|\psi_n^{(0)}\rangle$ в (16.15) стоит коэффициент 1 в коэффициенте с $k = n$ в (16.9). От второго слагаемого (16.15) выживет только сумма с $k \neq n$. То есть будет

$$\left\| (1 + c_{nn}) |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk} |\psi_n^{(0)}\rangle \right\|^2 = 1 + o(V^2) \quad (16.16)$$

Квадрат модуля нормы – это сумма квадратов модулей коэффициентов разложения по полному ортонормированному базису. Следовательно, должно быть

$$|1 + c_{nn}|^2 + \sum_{k \neq n} |c_{nk}|^2 = 1 + o(V^2) \quad (16.17)$$

Из выражения (16.14) мы видели, что при $k \neq n$ c_{nk} сами по себе величины первого порядка по влиянию возмущения \hat{V} . Так что квадраты их модулей уже величины второго порядка, и, поскольку мы ими пренебрегаем в равенстве (16.17), их можно сразу убрать, включив в $o(V^2)$. Тогда, если c_{nn} будет отлично от нуля в первом порядке, в $|1 + c_{nn}|^2$ из-за перекрёстного слагаемого возникнет слагаемое первого порядка по возмущению, которого нет в правой части равенства. То есть единственный способ выполнить условие нормировки в первом порядке по влиянию возмущения \hat{V} (16.15) – выбрать

$$c_{nn} = 0 \quad (16.18)$$

Его вклады в разложение порядков выше, чем первый, могут быть, но они обнаружатся, когда мы будем писать уравнение, содержащее вклады порядка V^2 . Их надо будет учитывать вместе одновременно, а не по отдельности в нормировке.

Итак, мы полностью нашли $|\psi_n^{(1)}\rangle$. То есть теперь у нас есть готовые формулы для вычисления поправок в первом порядке теории возмущений V^1 . Мы должны получить требование (16.12) и выражение

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} |c_{nk}|^2 \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\psi_k^{(0)}\rangle, \quad (16.19)$$

где $V_{kn} = \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle$.

Эту процедуру можно продолжить. Следующим шагом нужно будет приравнять справа и слева слагаемые порядка V^2 и посмотреть, что будет из них следовать. Сама по себе процедура не будет содержать новых технических элементов, по крайней мере если мы ограничимся задачей нахождения $E_n^{(2)}$. В $|\psi_n^{(2)}\rangle$ возникнет уже более сложная ситуация из-за того, что этот вектор придётся писать как комбинацию $|\psi_n^{(1)}\rangle$, которая в свою очередь будет комбинацией $|\psi_k^{(0)}\rangle$. Будет более сложная структура, двойные суммы.

Но мы такими вещами почти не станем пользоваться по вполне естественной причине. Это приближённый метод решения задачи. Если он работает хорошо, затея имеет смысл, если вместо бесконечного ряда теории возмущений мы можем ограничиться каким-то числом членов ряда, говоря, что достигли нужной нам точности,

и дальше его можно не продолжать. Ответ в виде бесконечного ряда, для построения которого надо проделать бесконечное количество вычислений, никому не нужен. Но для этого все ряды должны быть достаточно быстро сходящимися, то есть следующее слагаемое должно быть много меньше предыдущих. Если это так, после учёта первых поправок, может быть, ошибки ещё великоваты, и мы не достигли нужной точности, но ответ уже разумен.

То есть, как правило, чтобы качественно понять влияние возмущения и получить его разумное количественное описание, пусть даже в самом простом и не очень точном выражении, достаточно вычислить поправки низшего исчезающего уровня. То есть поправки второго порядка считаем только в том случае, если поправки первого обнулились, если в нём их нет. И так до тех пор, пока не наткнёмся на поправки, не равные нулю. Это и будет называться низшей исчезающей поправкой теории возмущений. В большинстве случаев мы будем ограничиваться именно ей. Более того, для решения задач курса достаточно поправок первого порядка и очень редко нужны поправки второго. И в целом построение ряда теории возмущений из большого, но конечного числа слагаемых – очень редко встречающаяся процедура. Это нужно, когда совсем конкретное требование к точности, она должна быть высока, а ряд действительно быстро сходящийся. Например, каждое слагаемое ряда убывает примерно на порядок, а мы хотим посчитать с точностью до пятой значащей цифры. Тогда оценочно можно предположить, что, скорее всего, будет нужен пятый порядок теории возмущений.

В любом случае, при рассмотрении поведения ряда, в тот момент, когда очередное слагаемое уже меньше, чем допустимая ошибка, а сами ряды быстро сходящиеся, можно предположить, что сумма всех остальных слагаемых вряд ли перевесит последнее, которое мы нашли. И тогда можно заявить, что мы достигли необходимой точности. Обычно так и действуют в рамках теории возмущений.

Здесь мы ограничимся приведением формулы, которая получится, если мы проработаем второй порядок и выделим формулу для $E_n^{(2)}$. Будет

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (16.20)$$

Этот ответ вполне естественный, он второго порядка по недиагональным матричным элементам оператора \hat{V} .

То есть, можно считать, что мы построили решение задачи. Но надо помнить, что оно пока имеет два дефекта. Во-первых, мы проанализировали только случай невырожденного невозмущённого уровня, когда $s_n = 1$, и нас ждёт ещё анализ другого случая. И во-вторых, мы с самого начала говорили, что в процессе решения надо не только построить формулы ответа, но и узнать, когда вся эта схема работает. То есть, как теперь понимаем, когда ряды теории возмущений будут достаточно быстро

сходящимися, чтобы следующие слагаемых в них были много меньше, чем предыдущие, в рамках требуемой для нас точности.

Условие «быстрой» сходимости рядов теории возмущений

Внимательно посмотрев на полученные формулы, мы обнаружим, что, например, величина поправки второго порядка (16.20) в сравнении с величиной поправки первого (16.12) определяется, по сути, отношением модуля недиагонального матричного элемента оператора возмущения к модулю разности значений энергий соответствующих уровней.

Такая же величина стоит и в качестве коэффициента разложения в (16.19). То есть, чтобы $\left| \psi_n^{(1)} \right\rangle$ было поправкой с маленькой нормой, достаточно, чтобы величина $\frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$ была мала. Здесь ряды теории возмущений фактически можно рассматривать как степенные по параметру отношения модуля недиагонального матричного элемента оператора возмущения к расстоянию по энергии между невозмущёнными уровнями. «Быстрая» сходимость рядов – понятие относительное, всё зависит от того, какую точность хотим получить. Если достаточно точности, например, $\pm 15\text{--}20\%$, то сокращение следующего слагаемого по сравнению с предыдущим уже на порядок будет нас устраивать. А если нужна точность в 1%, желательно, чтобы ряд сходился побыстрее, чтобы характерный параметр разложения был мал.

Тогда возникает естественное предположение, которое при более детальном анализе подтвердится, что требование быстрой сходимости рядов, условие применимости всего подхода, это

$$|V_{kn}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}| \quad (16.21)$$

Мы взяли оба выражения по модулю, так как слева недиагональный матричный элемент даже эрмитова оператора V_{kn} может быть комплексным числом, а справа величина $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$ хоть и вещественная, но может оказаться отрицательной.

В действительности для конкретной задачи надо анализировать ситуацию чуть внимательней, то есть для корректной оценки точности полученного результата следить за тем, как происходит убывание рядов теории возмущений. Там (16.21) – это доминирующее указание, если данное требование выполнено, то, скорее всего, всё должно замечательно работать. Хотя надо помнить, что мы не произвели доказательство этого в общем виде.

Также надо помнить, что мы говорили, рассказывая об общей классификации приближённых методов, что есть задачи, которые таким образом в принципе нельзя решить. Их называют непротурбативными. Например, есть какая-то формула, в которой в гамильтониане содержится маленький параметр ε , то есть $\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V}$, где \hat{V} – оператор с ограниченной нормой, а ε – формальный параметр, который можно считать маленьким, $\varepsilon \ll 1$. Если окажется, что у такого гамильтониана уровни энергии

$$E_n = c_n \cdot e^{-\frac{1}{\varepsilon}}, \quad (16.22)$$

то ряд теории возмущений будет выдавать степенной ряд по ε , а получить функцию (16.22) в таком виде нельзя в принципе, как мы уже говорили.

Также, если нам нужен аккуратный анализ точности, для каждой конкретной задачи нужно проследить, что происходит в рядах теории возмущений для этой задачи при различном разбиении гамильтониана \hat{H} на \hat{H}_0 и \hat{V} . Его можно по-разному разбивать, строить разные ряды теории возмущений для нужной задачи и сравнивать их между собой, чтобы понять, какой строить корректнее и выгоднее с точки зрения достижения лучшей точности с минимальным количеством вычислений. Но в целом мы всегда будем ориентироваться на требование (16.21) как на базовый критерий применимости стационарной теории возмущений.

В частности, на контрольной работе в каждом варианте будут задачи, посвящённые стационарной теории возмущений. И во всех, где будем использовать приближённые методы, частью решения будет являться доказательство того, что ими можно было воспользоваться. Подробное не нужно, достаточно будет показать, что выполняется требование (16.21). Это как бы правило приличия в теоретической физике, что использование приближённого метода всегда должно сопровождаться доказательством его применимости к данной задаче.

После того, как мы сделали эти уточнения, можно считать, что мы умеем решать задачи с невырожденными уровнями методом стационарной теории возмущений.

Есть ещё один интересный вопрос. Предложенное условие корректности (16.21) никак не ограничивает величину диагонального матричного элемента оператора возмущения, вещественное число V_{nn} этим требованием никак не ограничивается. На самом деле, большой диагональный элемент оператора возмущения никак не мешает строить решения в виде рядов, и мы всё равно сможем воспользоваться стационарной теорией возмущений.

Чтобы доказать этот факт, рассмотрим ситуацию, где $|V_{nk}|$ удовлетворяет требованию (16.21), а $|V_{nn}|$ не является маленьким, например, по сравнению с $|E_n^{(0)}|$. Гамильтониан \hat{H} , который мы исходно разбили на $\hat{H}_0 + \hat{V}$, можно разбить другим образом на невозмущённый гамильтониан \hat{H}'_0 и возмущение \hat{V}' , записав \hat{H}'_0 в виде старого \hat{H}_0 , к которому добавим оператор \hat{V} , матрица которого в базисе из собственных векторов \hat{H}_0 диагональна, и на диагонали как раз стоят V_{nn} , матричные элементы оператора \hat{V} в этом базисе. То есть будет

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \hat{H}'_0 + \hat{V}' \equiv \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{диаг}} + \hat{V}_{\text{недиаг}}, \quad (16.23)$$

где новый оператор $\hat{H}'_0 = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{диаг}}$, а $\hat{V}' = \hat{V}_{\text{недиаг}}$.

Мы просто в матрице оператора \hat{H} стоящие на диагонали матричные элементы \hat{V} теперь тоже включили в невозмущённый гамильтониан. При этом окажется, что у нового

невозмущённого гамильтониана \hat{H}'_0 те же собственные вектора, потому что в базисе из прежних собственных векторов $|\psi_n^{(0)}\rangle$ всё равно \hat{H}'_0 диагонален, его матрица диагональна. А новые собственные значения – сумма старых, к которым добавились диагональные элементы:

$$E_n^{(0)'} = E_n^{(0)} + V_{nn} \quad (16.24)$$

Тогда у нового гамильтониана возмущения $\hat{V}' = \hat{V}_{\text{недиаг}}$ диагональные элементы просто будут нулями и не будут представлять никакой проблемы. Теперь понятно, что проблемы с точки зрения построения рядов теории возмущений доставляют именно недиагональные матричные элементы оператора возмущения, и именно от них нужно требовать малости по сравнению с величиной такой же размерности, разностью энергий между соответствующими невозмущёнными уровнями, между собственными векторами которых вычислен этот матричный элемент оператора.

Теперь мы окончательно разобрались, как работает данный метод. Он очень простой, так как все вычисления арифметические. Операции типа интегрирования могут возникнуть при вычислении матричного элемента оператора \hat{V} , V_{kn} . В общем случае, например, если невозмущённые вектора записаны через свои собственные функции в координатном представлении, а оператор \hat{V} через операторы координаты и импульса, матричные элементы будем считать через интегралы по соответствующим координатным волновым функциям. Но как только мы вычислили V_{kn} в базисе из $|\psi_n^{(0)}\rangle$, дальше мы просто используем готовые формулы для поправок вплоть до нужного порядка, пока не решим, что достигли необходимой точности.

В рамках нашего курса мы в основном будем считать, что достигаем её, дойдя не более чем до второго порядка теории возмущений. Задачи, где нужны более высокие порядки, мы рассматривать не будем, но должны понимать, что принципиально они ничем не отличаются. Там только будет больше объём вычислений и будут возникать более сложные по структуре формулы поправок, а сами вычисления останутся достаточно простыми.

Поправки в случае вырожденного спектра

Случай 2) – когда $s_n > 1$. Теперь индекс α будет нужен. Первым делом рассмотрим, что мешает повторить те же самые выкладки, введя его и работая с чуть более сложными рядами по двум индексам.

Можно понять, что возникнут проблемы, даже не производя выкладок и не дожидаясь, пока они выскочат, если заметить простую вещь. Формально можно перейти к случаю, когда какой-то уровень двукратно вырожденный, взяв гамильтониан с невырожденным спектром и два уровня E_{n1} и E_{n2} и формально устремив E_{n2} к E_{n1} . Таким образом мы получим задачу, в которой у гамильтониана один из уровней двукратно вырожденный.

Но, как мы помним, в формулах поправок и для энергии, начиная со второго порядка, и для собственных векторов, начиная с первого порядка, в знаменателях стоят разности уровней энергии. Соответствующее слагаемое в поправке, например, к волновой функции, которая отвечает уровню $n1$, возникнет с нулевым знаменателем. Ясно, что так получится из-за того, что в наших уравнениях при некоторых интересующих нас переменных, например, при коэффициентах разложения c_{nk} , возникнут нулевые множители, и они не смогут быть определены из этих уравнений. Более того, сами уравнения при этом зачастую могут оказаться несовместными при ненулевом значении недиагонального матричного элемента \hat{V} . То есть мы будем получать уравнения вида «ноль равняется не нулю» и выполнить их никак не сможем.

Итак, видно, что проблема возникнет из-за того, что появятся уравнения, где ненулевой недиагональный матричный элемент оператора возмущений выражен через какую-то конструкцию, тождественно обращающуюся в ноль. Если вспомнить линейную алгебру, можно догадаться, что вместе с проблемой мы получили и путь её решения. Потому что теперь заданному невозмущённому уровню энергии $E_n^{(0)}$ отвечает не один, а несколько собственных векторов $|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$, ведь $\alpha = 1..s_n$.

И, конечно, для нашего линейного уравнения, линейной задачи $\hat{H}\psi = E\psi$ работает простой принцип суперпозиции. Любая линейная комбинация векторов $|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$ тоже является собственным вектором гамильтониана \hat{H}_0 с тем же самым собственным значением $E_n^{(0)}$. То есть на самом деле мы в этом случае получаем не просто набор s_n разных собственных векторов, а получаем в гильбертовом пространстве чистых состояний нашей системы H_n конечномерное линейное подпространство с размерностью s_n . То есть

$$s_n = \dim(H_n), \quad (16.25)$$

где H_n – подпространство гильбертова пространства H , которое содержит все возможные собственные вектора \hat{H}_0 , отвечающие энергии $E_n^{(0)}$.

Тогда оказывается, что выбор из $|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$ в этом подпространстве далеко не единственный. Можно взять любые ортонормированные линейные комбинации $|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$ и объявить их новым выбором, то есть существует бесконечно возможный набор. Возникшая здесь матрица оператора возмущения \hat{V} , которую дальше будем обозначать как $V_{n\alpha n\beta}$, это по определению матричный элемент оператора возмущения между двумя векторами, относящийся к нашему подпространству, то есть к уровню энергии $E_n^{(0)}$, у них n обязательно одинаковое, а α и β – разные значения второго индекса. Для краткости будем это тождественно обозначать $V_{\alpha\beta}$, подразумевая, что раз оставили только эти

индексы, значит, индекс n у соответствующих базисных векторов уже совпал и имеет какое-то определённое значение:

$$V_{n\alpha, n\beta} \equiv \langle \psi_{n\alpha}^{(0)} | \hat{V} | \psi_{n\beta}^{(0)} \rangle \equiv V_{\alpha\beta} \quad (16.26)$$

$V_{\alpha\beta}$ – это матрица $s_n \times s_n$. А конечномерная матрица, как понятно из линейной алгебры, может быть диагонализирована естественным выбором базиса в нашем подпространстве. То есть решение проблемы состоит в том, чтобы использовать «правильный» базис в подпространстве собственных векторов, отвечающих данному невозмущённому уровню энергии $E_n^{(0)}$. Существует некий базис $|\tilde{\psi}_{n\alpha}^{(0)}\rangle$, в котором соответствующая матрица оказывается диагональной, пропорциональной $\delta_{\beta\alpha}$:

$$\tilde{V}_{\alpha\beta} = E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{\beta\alpha} \quad (16.27)$$

Сразу становится понятно, что, когда мы запишем выражение (16.27) с точностью до поправок порядка V^α , обнаружим, что соответствующие собственные значения гамильтониана \hat{H} с точностью до поправок первого порядка будут равны диагональным матричным элементам этой матрицы. Мы, по сути, обобщили результат, который получали для невырожденных уровней энергии. Там поправкой первого порядка был диагональный матричный элемент оператора возмущения в базисе из невозмущённых волновых функций. Тут остаётся в принципе то же самое, только теперь эти диагональные матричные элементы надо считать в правильном базисе:

$$E_{n\alpha}^{(1)} = \tilde{V}_{\alpha\alpha} \quad (16.28)$$

В любом другом базисе получится неправильный ответ, возникнет проблема с занулением. А в правильном всегда будет возникать уравнение «ноль равняется нулю», так как там, где есть нулевые разности энергий, в другой части стоит нулевой недиагональный матричный элемент матрицы \tilde{V} .

Более того, если нам нужны, например, только поправки первого порядка к энергии, то есть только диагональные матричные элементы $\tilde{V}_{\alpha\alpha}$ диагонализированной матрицы \tilde{V} , из линейной алгебры мы умеем делать это из произвольного базиса, даже не строя в явном виде правильный базис $|\tilde{\psi}_{n\alpha}^{(0)}\rangle$. Если нам захочется развивать это дальше и строить приближения следующих порядков по V , второго третьего и т. д., этот базис будет нужно построить, чтобы именно в нём и работать. А если достаточно поправок первого порядка к энергии – а это довольно частая задача при решении стационарных задач методом теории возмущений, потому что, если задача в целом корректна, ряды теории возмущений достаточно быстро сходящиеся, и поправки первого порядка не зануляются, они уже дают правильное описание влияния возмущения. Дальше будет только вопрос, достигли ли мы необходимой точности ответа.

Поправки первого порядка, $\tilde{V}_{\alpha\alpha}$ из (16.28) можно найти, как учили в линейной алгебре, как корни характеристического уравнения для матрицы $V_{\alpha\beta}$. Нужно взять

матрицу $V_{\alpha\beta}$, добавить на диагонали везде $-E$, посчитать определитель получившейся матрицы и приравнять его к нулю:

$$\det \|V_{\alpha\beta} - E\delta_{\beta\alpha}\| = 0 \quad (16.29)$$

При расписывании равенства, где определитель матрицы $s_n \times s_n$ равняется нулю, мы получаем относительно E алгебраическое уравнение степени s_n . В линейной алгебре его называли характеристическим, но в квантовой теории за ним закрепилось название секулярного уравнения. Более того, в старых советских учебниках его можно найти в переводе на русский язык как вековое уравнение. Мы тоже будем называть базисное уравнение (16.29), решающее задачу нахождения поправок первого порядка к энергии в случае вырожденного уровня, секулярным.

Данное название немного странное для физики микромира, в ней временные интервалы в столетие ненормально большие, мы в ней основном оперируем существенно более короткими, характерными в наших квантовых системах. Но это имеет под собой историческое обоснование и связано с самой теорией возмущений, а не с квантовой теорией. Впервые нечто похожее на стационарную теорию возмущений развивалось в ньютоновской механике, и первые громкие применения такой вычислительной технологии были связаны с небесной механикой, когда те астрономы, механики и математики изучали изменение параметров стационарных планетных орбит под влиянием какого-то маленького возмущения. Стационарная орбита планеты или другого небесного тела Солнечной системы в поле Солнца, раз это финитное движение, это эллипс. Но если добавить другие тела, например, другие планеты, их влияние на заданное движение хоть и очень маленькое по сравнению с влиянием Солнца, но всё равно вносит какие-то возмущения, малые поправки. И при их учёте возникнет искажение стационарной орбиты, медленное движение, медленная динамика, вращательный дрейф и т. д. Логика анализа этих искажений полностью соответствовала логике стационарной теории возмущений, которую мы применили в рассмотренной квантово-механической задаче.

Как раз с помощью такого подхода в своё время Леверье проанализировал возмущения, которые вносили две внешние планеты Солнечной системы в движение по стационарным орбитам остальных планет, и из этого сумел определить параметры орбит ещё неизвестных Нептуна и Плутона. В результате они сами были открыты. И для той теории возмущений в задачах небесной механики название «секулярное уравнение» было очень естественным, потому что, чтобы что-то извлечь, нужно было обработать данные по движению нескольких планет Солнечной системы на протяжении времени, значительно превышающего период их вращения. А это даже для внутренних планет Солнечной системы десятки лет, а если подключать Юпитер и Сатурн, то и сотни лет становятся вполне естественным масштабом для анализа данных.

Скорее всего, по аналогии это название перешло и в физику микромира. Речь идёт в основном о математической аналогии, аналогии логики и формальной математической

реализации данного метода, когда мы строим ряды по степеням каких-то маленьких параметров, появившихся в задаче, подставляем эти ряды в общее уравнение и приравниваем справа и слева слагаемые одного порядка малости.

Дальнейший анализ будет формально-математическим. Мы помним из алгебры, что алгебраическое уравнение степени s_n может иметь до s_n различных корней, и с точки зрения физика это и определяет физическую картинку.

Если все s_n корней уравнения (16.29) различны, после учёта поправок первого порядка мы увидим, что все уровни энергии $E_{n\alpha}^{(1)}$ стали разными. То есть уровень энергии $E_n^{(0)}$, который был кратности вырождения s_n , разбился на s_n различных подуровней с энергиями $E_n^{(0)} + E_{n\alpha}^{(1)}$, так как все эти величины теперь различаются. В такой ситуации говорят, что произошло полное снятие вырождения. И поправки следующих порядков уже можно будет считать из логики, применяющихся для невырожденных уровней. То есть можно будет свернуть на путь для случая 1) и строить ряды теории возмущений по уже рассмотренной схеме.

Однако у алгебраического уравнения могут возникнуть и кратные корни. Если есть корни, которые отличаются друг от друга, но они имеют кратность больше единицы, тоже произойдёт некое расщепление. Как часто делают в физике микромира, нарисуем картину уровней (рис. 16.1). Единственный уровень энергии $E_n^{(0)}$ был s_n -кратно вырожден, и когда мы подключили возмущение V в первом порядке, он расщепился на несколько подуровней. Если среди них есть кратные, их количество k будет меньше, чем s_n , поэтому кратности вырождения всех подуровней стали какими-то другими: $s_{n_1}, s_{n_2}, \dots, s_{n_k}$. Сумма всех кратностей вырождения будет $s_{n_1} + s_{n_2} + \dots + s_{n_k} = s_n$, потому что размерность подпространства состояний, относящихся к данному уровню энергии, не изменилась из-за того, что мы стали находить поправки первого, второго или другого порядка.

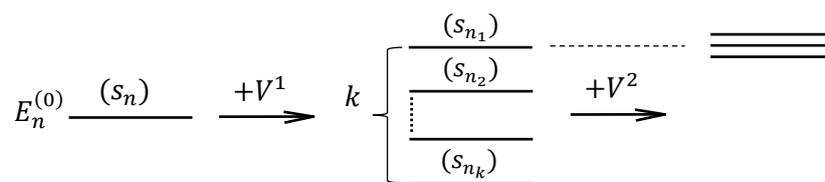


Рис. 16.1. Расщепление невозмущённого уровня под воздействием возмущения

Дальше можно будет учитывать поправки второго и следующих порядков и смотреть, что при этом будет происходить с соответствующими подуровнями. То есть можно будет изучать уже отдельный подуровень, так как мы будем считать, что дальше у каждого из них исследуем дальнейшее расщепление, величина которого будет порядка V^2 , то есть много меньше, чем расщепление на первом шаге. Выделив отдельный подуровень, мы увидим, что он расщепится в тесную группу из близко расположенных

новых подуровней. Этот процесс может повторяться, то есть в этом случае мы работаем таким образом на каждом шаге.

Может случиться, что при учёте поправок очередного порядка произойдёт полное расщепление на невырожденные подуровни. В реалистичных задачах к тому же может оказаться несколько операторов возмущения, и у них может быть разная симметрия. Тогда они будут по-разному производить снятие вырождения, и общая картина может получиться ещё более сложной.

Такая ситуация в действительности возникает довольно часто и хорошо знакома по атомной или ядерной физике. Но, поскольку это относится к многочастичным задачам, мы будем анализировать её уже в следующем семестре при изучении многочастичных квантовых систем. Там использование стационарной теории возмущений станет несколько более громоздким и сложным и будет требовать более вдумчивой работы именно из-за этого обстоятельства.

А в нашей задаче может быть самый последний предельный случай, когда секулярное уравнение (16.29) имеет один корень кратности s_n . Тогда не происходит никакого расщепления, и вырождение полностью сохраняется. Как правило, это означает, что оператор \hat{V} обладает теми же симметриями, что и исходный гамильтониан \hat{H}_0 . И вообще часто оказывается, что при внимательном рассмотрении задачи её можно решить аналитически точно.

Конечно, бывает и такое, что расщепление появляется, но только в следующих порядках, например, во втором. Но если мы столкнулись с такой ситуацией, это уже повод проанализировать задачу на предмет того, не является ли $\left\{ \psi_n^{(0)} \right\}$ честными собственными векторами точного гамильтониана \hat{H} . Возможно, там более сложная формула для уровней энергии $E_n^{(0)}$, но в целом тот же самый базис. Но это уже надо анализировать в отношении каждой конкретной задачи.

В итоге, мы пришли к вполне понятной схеме, как мы должны действовать. В первую очередь, собираясь решать задачу по теории возмущений, нужно обдумать, как разбить гамильтониан \hat{H} на невозмущённый гамильтониан \hat{H}_0 и оператор возмущения \hat{V} . Здесь надо постараться учесть физические особенности данной задачи. То есть выбрать \hat{H}_0 так, чтобы соответствующая стационарная задача была точно решаемой, ответ нам был известен. Если это будет не так, вся затея не сработает. Но при этом нельзя брать первый попавшийся простой гамильтониан, так как нужно обеспечить малость \hat{V} . Надо совместить эти два требования.

А дальше надо честно отработать возникшую задачу по разработанной схеме. То есть в первую очередь посмотреть, будет интересующее собственное значение вырожденным или невырожденным, и в зависимости от этого идти по первому или второму пути до тех пор, пока не доведём анализ ситуации до понимания, как устроен

спектр гамильтониана \hat{H} , пока не готовы предъявить ответ с требуемой для нас точностью. После её достижения можно сказать, что задача решена.

Дальше нам предстоит рассмотреть конкретные задачи, чтобы убедиться, что эта простая схема реально работает.

Лекция 17. Вариационный метод

Для начала закончим цикл обсуждений приближённых методов решения. Мы посмотрели квазиклассическое приближение, стационарную теорию возмущений, и третьим заявленным был вариационный метод.

Вариационный метод для основного состояния осциллятора

С одной стороны, про него почти нечего добавить кроме уже данной общей характеристики. Это целый класс методов, построенных на вариационном принципе, на том, что стандартную операторную задачу для стационарных волновых функций и собственных значений гамильтониана

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (17.1)$$

можно записать как вариационную на условный экстремум функционала. Мы всегда ищем для (17.1) волновые функции, принадлежащие гамильтониану \hat{H} , как нормированные на единицу, с

$$\|\psi\| = 1, \quad (17.2)$$

и стараемся, даже если есть вырожденные собственные значения, построить из них ортонормированный базис.

Задачу (17.1–17.2) можно записать как вариационную, например

$$\frac{\delta}{\delta\psi^*} E[\psi] = 0, \quad (17.3)$$

где обычно функционал энергии $E[\psi] = \int \psi^* \hat{H} \psi$, при том же условии (17.2).

С точки зрения математика, переход от операторной задачи к вариационной – это усложнение. А мы его используем для создания приближённых методов, выбирая среди всех функций некий класс пробных, в который вариационную задачу (17.3–17.2) решить легко.

Сейчас мы это немного конкретизируем, посмотрим, как оно работает на практике и как мы работаем с задачей. Пусть \hat{H} , как обычно, гамильтониан движения точечной квантовой частицы массы m в некотором потенциальном поле $u(\vec{r})$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + u(\vec{r}) \quad (17.4)$$

Решить задачу (17.1–17.2) с данным потенциалом аналитически мы не смогли. Но из физических соображений можем сказать, что он чем-то похож на другой, для которого мы знаем решение задачи. Например, если $u(\vec{r})$ имеет ярко выраженную точку минимума, то основное состояние, малые колебания вблизи этой точки всегда чем-то похожи на гармонический осциллятор. А для колебаний гармонического осциллятора вблизи точки равновесия мы решить задачу сможем.

То есть идея состоит в том, что мы от гамильтониана (17.4) переходим к гамильтониану с некоторым другим потенциалом, который обозначим \bar{u} , содержащим

один или несколько параметров. Для простоты напомним один, α . К $\bar{u}(\alpha, \vec{r})$ предъявляется только требование, чтобы мы при любом α могли решить задачу (17.1–17.2), и чтобы задача с потенциалом $\bar{u}(\alpha, \vec{r})$ по физическим свойствам где-то была похожа на интересующую нас задачу с потенциалом $u(\vec{r})$. Это как раз то, что мы собираем все ключи под фонарными пятнами и выбираем из них наиболее похожий на нужный нам.

Похожесть с точки зрения теоретика может содержать чёткие формальные требования. Например, если точка положения равновесия потенциала $u(\vec{r})$ – начало координат, и при этом $u(\vec{r})$ сферически симметричен относительно него, то выбранный потенциал $\bar{u}(\alpha, \vec{r})$ мы тоже напомним как потенциал изотропного трёхмерного осциллятора, сохранив сферическую симметрию исходного гамильтониана. Это один из базовых принципов вариационного метода: когда мы выбираем пробные функции, стараемся сохранить симметрию точной задачи. Это увеличивает шансы на то, что метод сработает хорошо.

Итак, пусть есть пробный потенциал $\bar{u}(\alpha, \vec{r})$, для которого мы сможем решить задачу (17.1–17.2). Если мы рассматриваем основное состояние, берём какое-то минимальное пробное значение энергии $E_0^{\text{пп}}$, и ему отвечает какая-то пробная волновая функция $\psi_0^{\text{пп}}$. Они будут зависеть от параметра α , который мы оставили неопределённым. Это какой-то параметр, содержащийся в нашем приближённом потенциале. Например, в потенциале изотропного осциллятора это может быть его частота ω , ведь мы её не знаем, в исходном гамильтониане (17.4) частоты нет. Получится

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \bar{u}(\alpha, \vec{r}) \right] \psi_0^{\text{пп}}(\alpha, \vec{r}) = E_0^{\text{пп}}(\alpha) \psi_0^{\text{пп}}(\alpha, \vec{r}) \quad (17.5)$$

Решение для задачи (17.5) мы знаем. Заметим, что $\psi_0^{\text{пп}}(\alpha, \vec{r})$ – это функция, описывающая состояние, которое мы хотим приближённо считать совпадающим с нужным нам. Если мы возьмём точный гамильтониан (17.4) и усредним его по состоянию, описываемому пробной функцией $\psi_0^{\text{пп}}(\alpha, \vec{r})$, получим некую функцию от α . Для этого не нужно решать дифференциальные уравнения, по сути, надо только посчитать в координатном представлении один интеграл с уже известными волновыми функциями. Будет

$$\langle \psi_0^{\text{пп}}(\alpha) | \hat{H} | \psi_0^{\text{пп}}(\alpha) \rangle = \varepsilon(\alpha), \quad (17.6)$$

где $\varepsilon(\alpha)$ – функция вариационной энергии.

Основное состояние – это минимум энергии. Поэтому из всех состояний, описываемых пробными волновыми функциями, наиболее близким к настоящему основному состоянию настоящего гамильтониана (17.4) будет то, в котором вариационная энергия $\varepsilon(\alpha)$ минимальна. Тогда мы решаем стандартную математическую задачу, для одного параметра просто вычисляем $\frac{d\varepsilon}{d\alpha}$ и решаем

$$\frac{d\varepsilon}{d\alpha} = 0, \quad (17.7)$$

из чего получаем некое значение вариационного параметра α , α_0 , отвечающее минимуму вариационной энергии. Кстати, мы проверяем, что (17.7) это минимум. И тогда говорим, что среди всех собранных ключей ключ, отвечающий параметру α_0 , больше всего похож на наш. То есть настоящая энергия основного состояния

$$E_{\text{осн}} \approx \varepsilon(\alpha_0) \quad (17.8)$$

Таким образом, данный метод позволяет приближённо посчитать уровень основного состояния. Можно случайно попасть в точный, если так получилось, что волновая функция пробного состояния при каком-то α совпадает с точной. Это бывает редко, но теоретически может случиться. А в общем случае это приближённое решение. Мы находим наилучший вариант в этом классе пробных функций для точного гамильтониана (17.4). И соответствующую функцию $\psi^{\text{пп}}(\alpha_0, \vec{r})$ тоже считаем приближённым выражением для настоящей функции основного состояния $\psi_{\text{осн}}(\vec{r})$,

$$\psi_{\text{осн}} \approx \psi^{\text{пп}}(\alpha_0, \vec{r}) \quad (17.9)$$

Заметим, что главным недостатком вариационного метода в действительности является невозможность понять, насколько это приближение хорошее, изнутри самого метода. Чтобы осознать, хороший получился результат или нет, обычно делают одну из двух вещей. Пусть мы решаем задачу про конкретную систему, по которой есть экспериментальные данные. Например, про атом гелия, для которого известно экспериментальное значение энергии связи для основного состояния его электронной оболочки, чисто электронная энергия. Тогда, посчитав описанным методом, можно будет узнать, насколько далеко ушёл результат от экспериментального значения. Если мы обнаружим, например, что ошиблись по энергии меньше, чем на 1%, то, скорее всего, и волновая функция не сильно отличается от волновой функции настоящего атома гелия. Разумеется, в атоме гелия не одна частица, а две, но мы привели этот пример, потому что в реальности именно вариационным методом было построено одно из первых теоретических вычислений его энергии связи. И её сравнивали именно с экспериментальным значением.

А если экспериментального значения нет, и мы хотим чисто теоретически оценить точность, разность между точным гамильтонианом и содержащим пробный потенциал \bar{u} можно воспринять как возмущение гамильтониана (17.5), переводящее его в (17.4). То есть мы пишем точный гамильтониан (17.4) как сумму приближённого (17.5) и возмущения. И после этого можем оценить поправки первого или второго порядка от оператора возмущения, низшие исчезающие, воспользовавшись стационарной теорией возмущений. Посмотрев, сколько они составляют, например, от разности между этим уровнем и следующим, мы получим представление о точности наших вычислений. То есть опять оцениваем точность полученного результата апостериори – после того, как он получен, предпринимаем некоторые действия, чтобы оценить ошибку. А изнутри метода понять, как сделать выбор, чтобы ошибка не превосходила заданного значения, в таком подходе практически невозможно.

Но метод имеет право на существование. Опыт действия им позволил теоретикам установить косвенные признаки того, что выбор хороший. Например, если задача одночастичная, и вариационный параметр один, есть признак, который часто надёжно срабатывает. Получив функцию вариационной энергии $\varepsilon(\alpha)$, мы потом нашли точку минимума α_0 . Но эта процедура сама по себе выполняется с хорошей точностью не для всех функций. Если $\varepsilon(\alpha)$ – функция в области значений α как на рис. 17.1а, у которой один чётко выраженный минимум, то требование (17.7) достаточно чётко определяет значение α_0 . Но если будет задача, в которой функция вариационной энергии $\varepsilon(\alpha)$ получится как на рис. 17.1б, где будут три разных минимума, которые очень слабо различаются по величине, а соответствующие им значения $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ различаются очень сильно, в несколько раз, мы даже с хорошей точностью не сможем понять, какое значение α брать в качестве α_0 . Это косвенный признак того, что для задачи 17.1а мы имеем право рассчитывать на хорошую точность, хоть реальную всё равно придётся устанавливать апостериори либо сравнением с экспериментом, либо с помощью стационарной теории возмущений. А в случае 17.1б, скорее всего, нет шансов, что какое-то из этих решений её даст. По крайней мере, этот результат придётся очень внимательно исследовать и проверять апостериори.

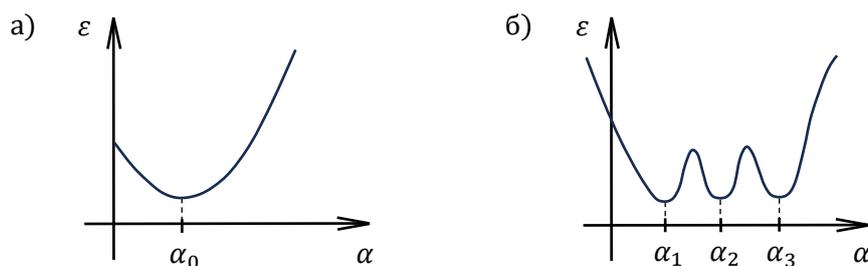


Рис. 17.1. Потенциал, задача с которым а) выдаст и б) не выдаст хороший результат при решении вариационным методом

Чёткого однозначного признака, который будет работать для всех задач, в данном случае нет. Но сам метод вычислений оказывается довольно несложным. В нашем примере он состоит из вычисления конкретного интеграла в (17.6) и минимизации функции одной переменной (17.7). С точки зрения современной математики это простые задачи, с которыми мы, скорее всего, справимся, если не получилось решить точную задачу с (17.4).

Здесь надёжно понятно, как найти энергию основного состояния и соответствующую волновую функцию. А с другими уровнями проявляется второй, уже технологический недостаток вариационного метода. Чем больше нужно найти уровней энергии в спектре гамильтониана, тем больший объём работы придётся проводить, причём с увеличением числа уровней он растёт очень существенно. Поэтому довольно часто, построив вариационным методом приближение для нескольких низших уровней, для исследования более высоких пытаются по построенным точкам спрогнозировать

дальнейшее поведение системы и свернуть на какой-то другой путь приближённой оценки получающихся результатов.

Разберёмся, как построить хотя бы низший возбуждённый уровень. Допустим, мы решили эту задачу для данного конкретного примера, нашли α_0 и таким образом определили приближённое значение энергии основного состояния (17.8) и приближённый вид соответствующей волновой функции основного состояния (17.9). Воспользовавшись стационарной теорией возмущений, мы оценили точность и обнаружили, что она нас удовлетворяет, ошибка не превосходит 2–3%. Теперь нужно найти энергию низшего возбуждённого состояния и соответствующую волновую функцию.

Пусть мы по-прежнему считаем, что пробный потенциал $\bar{u}(\alpha, \vec{r})$ физически похож на $u(\vec{r})$. Мы снова хотим воспользоваться таким же представлением, тем более собственные функции этого пробного потенциала уже знаем. Но, скорее всего, нельзя просто взять для того же $\bar{u}(\alpha, \vec{r})$ с тем же значением параметра α_0 низшее возбуждённое состояние и объявить его способом приближённого описания низшего возбуждённого состояния в точной задаче. Такой прямолинейный подход с большой вероятностью приведёт к довольно резкому ухудшению точности, даже для низшего возбуждённого уровня она может оказаться намного хуже, чем для основного. Ведь если приближённый потенциал – это потенциал изотропного осциллятора в описываемом нами случае, эффективная частота колебаний, которая делает этот осциллятор похожим на нашу систему, для низшего возбуждённого состояния даже из физических соображений, скорее всего, другая. Так что, наверное, это состояние будет отвечать другому значению параметра α .

Рассмотрим, какое требование тогда нужно предъявить к волновой функции этого состояния. Естественных требований по-прежнему два – что она по-прежнему нормирована на единицу, (17.2), мы такие брали и в (17.5) из спектра пробного потенциала $\bar{u}(\alpha, \vec{r})$. И что она должна быть ортогональна уже построенной волновой функции основного состояния. Если мы просто возьмём значение волновой функции $\psi_1^{\text{пр}}$ низшего возбуждённого состояния пробного потенциала с новым значением параметра, каким-то α_1 вместо α_0 , она не будет ортогональна волновой функции основного состояния, отвечающей параметру α_0 . Волновые функции разных энергий ортогональны, только если это один и тот же потенциал, а при разных значениях α потенциалы \bar{u} разные. Поэтому возникает следующий подход.

Вариационный метод для низшего возбуждённого состояния осциллятора

Мы, как договорились, снова берём потенциал $\bar{u}(\alpha, \vec{r})$, только хотим заново найти подходящее значение α . Для этого берём волновые функции $\psi_n^{\text{пр}}(\alpha, \vec{r})$. $\psi_0^{\text{пр}}(\alpha, \vec{r})$ мы уже использовали, это волновая функция с симметрией, отвечающей набору квантовых чисел

основного состояния. А волновую функцию, отвечающую набору квантовых чисел интересующего нас низшего возбуждённого состояния, будем обозначать $\psi_1^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r})$.

Мы берём случай, когда у нас есть вырождением, и мысленно сравниваем пробный потенциал с потенциалом изотропного гармонического осциллятора. Уровни энергии можно нумеровать главным квантовым числом n , тогда в индексе волновых функций будет набор квантовых чисел n, l, m . Мы как бы строим в $\psi_n^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r})$ на месте n мультииндекс, на самом деле там $\psi_{nlm}^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r})$. Соответственно, волновую функцию $\psi_0^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r})$, которую мы использовали, тождественно обозначили

$$\psi_0^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r}) \equiv \psi_{100}^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r}) \quad (17.10)$$

Это известная функция, но она содержит параметр α .

Тогда для следующей волновой функции, низшей возбуждённой, которую будем обозначать ψ_1^{pp} , можно ставить $n = 2$. При нём l может быть 0 или 1, при $l = 0$ и $m = 0$, при $l = 1$ может быть $m = +1, 0, -1$. То есть для следующего квантового числа $n = 2$ есть целых четыре волновых функции.

Мы понимаем, что исходный потенциал не был потенциалом изотропного осциллятора или кулоновским, не обладал таким вырождением. У него, как в общем случае, квантовые числа были n_r, l, m . Поэтому для него, как для большинства, скорее всего, уровни энергии будут расти с ростом l . Тогда для настоящего потенциала основная волновая функция, как раз наша осцилляторная функция, будет с индексами 200, а не 210 или 21 – 1. Поэтому из пробных функций тоже берём $\psi_{200}^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r})$:

$$\psi_1^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r}) \equiv \psi_{200}^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r}) \quad (17.11)$$

То есть у нас есть всего две конкретные функции, (17.10) и (17.11). Так мы учитываем свойства реального потенциала, сравнивая его с выбранным пробным. Такого рода рассуждения очень характерны для вариационного метода и позволяют экономить расчёты. В данном случае мы можем взять две функции (17.10) и (17.11). Проблема в том, что нельзя просто взять (17.11). Мы говорили, что она будет ортогональна уже построенной $\psi_{100}^{\text{pp}}(\alpha_0, \vec{r})$ (17.10) только при $\alpha = \alpha_0$, а мы хотим попробовать другие значения α .

Поэтому перейдём от выбора (17.10) и (17.11) к новому выбору пробной функции. Определим $\tilde{\psi}_1^{\text{pp}}$ как

$$\tilde{\psi}_1^{\text{pp}} = c_1 \psi_0^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r}) + c_2 \psi_1^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r}), \quad (17.12)$$

где мы ввели какие-то коэффициенты c_1 и c_2 . То есть новую пробную функцию для низшего возбуждённого состояния пишем как комбинацию волновых функций основного и низшего возбуждённого состояния для пробного потенциала.

Тогда мы сможет подчинить (17.12) условиям ортогональности и нормировки. Условие ортогональности приведёт к требованию, что

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (17.13)$$

Во многих задачах за счёт свободного выбора начальной фазы базисных волновых функций можно ограничиться вещественными c_1 и c_2 и написать это выражение без модулей.

А условие ортогональности потребует, чтобы интеграл от (17.12) и уже построенной волновой функции (17.10), приближённой записи волновой функции основного состояния в рамках нашего метода,

$$+ \int d\vec{r} \psi_0^{\text{pp}}(\alpha_0, \vec{r}) \tilde{\psi}_1^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r}) = 0 \quad (17.14)$$

Это линейное однородное уравнение на c_1 и c_2 , которое ещё будет содержать α . (17.13) конкретный интеграл, поскольку в него входят конкретные функции $\psi_0^{\text{pp}}(\alpha_0, \vec{r})$ и $\tilde{\psi}_1^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r})$, но последняя, согласно (17.12), содержит ещё c_1 и c_2 . Получается

$$0 = c_1 \int d\vec{r} \psi_0^{\text{pp}}(\alpha_0, \vec{r}) \psi_0^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r}) + c_2 \int d\vec{r} \psi_0^{\text{pp}}(\alpha_0, \vec{r}) \psi_1^{\text{pp}}(\alpha, \vec{r}) \quad (17.15)$$

При $\alpha = \alpha_0$ эти интегралы будут равны единице.

Конкретные интегралы в (17.15) вычисляются, они являются функциями α и уже заданной величины α_0 . И мы получаем линейное уравнение, связывающее c_1 и c_2 , которое вместе с условием (17.13) их определяет с точностью до фазы. Выбрав фазу так, чтобы, например, c_1 было вещественным положительным числом, мы получаем их конкретные значения. То есть у нас теперь есть конкретная функция пробного состояния (17.12).

А дальше мы, по уже рассмотренной схеме, строим вариационную энергию $\tilde{\epsilon}(\alpha)$, которая получается усреднением точного гамильтониана по функции (17.12):

$$\tilde{\epsilon}(\alpha) = \langle \tilde{\psi}_1^{\text{pp}} | \hat{H} | \tilde{\psi}_1^{\text{pp}} \rangle, \quad (17.16)$$

содержащей уже вычисленные c_1 и c_2 , являющиеся функциями α .

Поскольку волновые функции $\tilde{\psi}_1^{\text{pp}}$ в (17.16) являются функциями α , c_1 и c_2 тоже, мы получаем $\tilde{\epsilon}(\alpha)$ как некую функцию от α . И таким образом минимизируем вариационную энергию в классе функций, ортогональных уже построенной волновой функции основного состояния и нормированных на единицу. Всё опять сводится к минимизации функции одного переменного $\tilde{\epsilon}(\alpha)$ (17.16), вследствие чего мы находим новое значение вариационного параметра α_1 , при котором достигается этот минимум.

Всё, что мы говорили про α_0 , относится и к α_1 . То есть, если мы прикидываем вид волновой функции (17.16) и видим, что у неё один чётко выраженный минимум, тогда есть шанс, что по физике наша приближённая задача по-прежнему похожа на точную, которую мы решаем. А если она ведёт себя как попало, минимумы у неё неярко выраженные, их много, они отвечают разным значениям α , то, наверное, по физике задачи оказались не очень похожими.

Но, тем не менее, мы снова получаем возможность посчитать приближённое значение. Уровень низшего возбуждённого по энергии состояния

$$E_1 \approx \tilde{\varepsilon}(\alpha_1), \quad (17.17)$$

А волновая функция основного состояния

$$\psi_1 \approx \tilde{\psi}_1^{\text{пп}}(\alpha_1, \vec{r}) \quad (17.18)$$

Дальше эта процедура рекуррентно повторяется. То есть, если нужно получить уровень второй возбуждённый, уже третий по счёту снизу уровень энергии, и его волновую функцию, мы построим $\tilde{\psi}_2^{\text{пп}}$ как линейную комбинацию волновых функций в пробном потенциале, отвечающих трёх нижним уровням, которые показались подходящими для этой задачи. И три коэффициента в этой комбинации подберём из условия нормировки функции на единицу и ортогональности двум уже построенным волновым функциям, (17.10) и (17.18).

Процедура построения улучшенной пробной функции, подчиняющейся нужным условиям, будет всё более обширной, потому что мы будем писать линейную комбинацию всё большего количества собственных функций движения частицы в пробном потенциале со всё большим количеством коэффициентов разложения. Но вся задача всё равно будет алгоритмична, для конкретных точного и выбранного пробного потенциалов зачастую всю процедуру можно реализовывать программно, и тогда увеличение объёма вычислений будет сказываться не так критически. Но всё равно видно, что он будет расти по мере того, как мы будем двигаться вверх по лестнице состояний, причём существенно нелинейным, даже экспоненциальным образом, как показательная функция. Однако такие выводы правильнее относить уже к конкретным задачам, хотя чаще всего это именно так.

Таким образом, мы поняли, как выстраивается использование данного приближенного метода, вариационного исчисления. Главные достоинства всей процедуры – что она в принципе несложная, позволяет явно учитывать симметрию точной задачи, и что всегда можно строить рассуждения от физики. Мы можем на уровне физики определить и комментировать выбор, например, класса пробных функций, того же пробного потенциала.

С другой стороны, в конкретных работах довольно часто и успешно использовался альтернативный подход, когда мы просто забываем про физику. Некоторые теоретики позволяли себе высказывания вроде «дайте мне функцию двенадцати параметров, и я её проведу почти через любой предложенный набор экспериментальных точек», варьируя эти параметры». Мы можем взять подход, аналогичный рассмотренному по схеме решения, но вложив в него не один вариационный параметр, а много. Чем больше их загружено в пробные функции, тем более широким получается круг перебора этих функций. То есть, если проводить аналогию с поиском ключа, тем шире становятся фонарные пятна, и больше шансов, что будет высокая точность.

Но при этом очень сильно растёт объём вычислений. Минимизация функции даже трёх переменных, не говоря о уже о десяти или двенадцати, существенно более сложная по математической реализации процедура, чем минимизация функции одной

переменной. Там есть отдельные методы, метод градиентного спуска и другие, отдельные алгоритмы, которые приходится использовать просто даже для поиска задачи минимума, набора соответствующих значений параметров. А уж когда мы начинаем выстраивать улучшенные пробные функции для возбуждённых состояний, для многих параметров вся процедура становится ещё более громоздкой.

Но зато, чем больше параметров, тем меньше можно думать о физике. Достаточно сделать просто такой выбор, чтобы он не противоречил физическим свойствам задачи напрямую, и тогда, скорее всего, при большом количестве параметров можно рассчитывать на приличную точность вычислений, хоть и за счёт увеличения их объёма.

Вторая важная вещь, о которой мы сказали, – у вариационного метода всегда есть проблема в точности полученных приближённых результатов, которая, как правило, решается апостериорно. То есть либо сравнением с экспериментальными данными, либо использованием оценок поправок с обусловленными отклонениями точного потенциала от пробного с найденными значениями вариационных параметров.

Дальше уже нужно смотреть, как работает вариационный метод, на совсем конкретных примерах. На семинаре мы такой пример разберём.

На этом рассмотрение приближённых методов можно считать завершённым. Мы ещё будем комментировать и развивать их применение, особенно стационарной теории возмущений и вариационного метода, для многочастичных квантовых систем. Там часто появляются свои интересные особенности, связанные с тем, что в многочастичных задачах зачастую возникают некоторые ограничения на выбор пробных функций, которые надо будет отдельно учитывать. Но этим мы уже будем заниматься в следующем семестре.

По сути, мы выполнили программу этого семестра. И поскольку теперь уже должны неплохо представлять, как устроена квантовая теория, по крайней мере для одночастичных стационарных задач, хотелось бы посвятить последние занятия возвращению почти в самое начало.

Концепции измерения

Когда мы выстраивали аксиоматику, систему аксиом канонического квантования, которую изучали как некий пример выстраивания формально строгой квантовой теории, рассказывая о постулатах, часто ссылались на то, что в реальном микромире измерения показали, что это действительно так. Например, наша интерпретация процедуры измерений в квантовой теории – то, что каждой измерительной процедуре отвечает именно оператор. И мы говорим, что процесс измерений – это процесс взаимодействия квантового объекта с неким макроскопическим прибором, в результате которой прибор выдаёт какое-то численное значение измеренной величины, загоняя микрообъект в состояние, отвечающее этому измеренному значению. То есть не существует невозмущающих измерений, всегда происходит некая трансформация состояния, коллапс

волновой функции. Какие-то свойства начального состояния при этом могут быть утеряны.

Процесс коллапса волновой функции носит ярко выраженный, как выражаются теоретики, нелокальный характер. То есть он происходит не только в маленькой локальной области измерений, где случилось взаимодействие нашей частицы с прибором. Это влияет на волновую функцию частицы, причём даже в точках, далёких от области, где была обнаружена частица во время взаимодействия, если она там отличалась от нуля. То есть существует очень характерная нелокальность процедуры измерения, которая встроена в наше описание измерения как такового с точки зрения формально строгой квантовой теории.

Для макроскопического мира, мира классической физики, это явное отступление от его принципов, классического принципа причинности. Мы уже говорили, что были значительные дискуссии среди создателей и противников квантовой теории о том, насколько корректно такое описание реальности. В тот момент мы ограничились замечанием, что в ходе этих дискуссий сторонам не удалось убедить друг друга в своей правоте. Многие так и остались при своём мнении, большинство выбрало интерпретацию, отвечающую квантовой теории, и с тех пор значительных расхождений с наблюдаемой реальностью мы ни разу не обнаружили. То есть как бы вывод, обобщение экспериментальных данных, что реальность, которую описывает квантовая теория с этой стандартной трактовкой процедуры измерений, не противоречит тому, что мы видим в реальных измерениях, в реальном мире.

Но констатация этого факта не может нас убедить полностью. Хорошо бы разобраться, возможно, вернувшись в те годы, когда шли дискуссии и такой трактовки ещё не существовало – ведь она в результате этих дискуссий в основном и появилась – как это произошло. Рассмотрим, пусть не подробно, как велись дискуссии, о чём говорили представители разных сторон и почему подавляющее большинство склонилось к трактовке, которую теперь иногда называют копенгагенской в честь школы Бора. Ученики Бора и люди, действующие в одном ключе с его группой, внесли очень значительный вклад в построение того, что мы сейчас называем формально строгой квантовой теорией, и в частности в эту самую трактовку процедуры измерений.

Главным недостатком квантовой теории с точки зрения её противников была именно нелокальность и нарушение классического принципа причинности. Например, что частица обнаружена здесь, а её волновая функция при совершении измерения внезапно обнулилась везде, где раньше была не равна нулю, за пределами области, где мы её обнаружили. И произошло это с нашей точки зрения мгновенно в момент измерения, не было какого-то распространения информационного сигнала, изменяющего волновую функцию. Это, казалось бы, противоречило одному из краеугольных камней принципа причинности в классической релятивистской механике, где мы говорили, что есть предельная скорость распространения любой информации, любого физического

сигнала. Что волновая функция не может мгновенно отреагировать на конечном расстоянии за нулевое время.

Поэтому альтернативная концепция получила образное и красивое название «концепция локального реализма». Её сторонники говорили, что в реальном мире все процессы обязательно локальны, любой сигнал распространяется с конечной скоростью, с точки зрения СТО не превышающей скорость света в вакууме. Иначе выбором системы отсчёта можно будет изменить порядок причины и следствия, чего быть не должно. Именно это подразумевают, когда говорят о нарушении принципа причинности. Так что фактически мы будем говорить о споре представителей парадигмы квантовой теории и парадигмы локального реализма.

Парадокс ЭПР (Эйнштейна – Подольского – Розена) с координатами и импульсами

Рассмотрим одну из самых знаменитых дискуссий между представителями обеих парадигм. Официально её запустили как раз сторонники локального реализма, группа под руководством Эйнштейна, когда вышла статья Эйнштейна, Подольского и Розена о парадоксе Эйнштейна – Подольского – Розена. Или, как его коротко называют, парадоксе ЭПР.

Исходная формулировка парадокса была в следующем. Авторы предложили рассмотреть какой-нибудь процесс рождения двух частиц, у которых импульсы связаны между собой. В действительности это может быть что угодно, например, π^0 -мезон распался на два гамма-кванта (рис. 17.2). В некоторой точке родились две частицы и полетели в разные стороны, потому что мы знаем, что по закону сохранения импульса их полный импульс

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \equiv 0 \quad (17.19)$$

Соответственно, рассуждая о координатах этих частиц, мы говорим, что, так как это замкнутая система, её центр масс остаётся на месте. Если мы направим ось x влево, координата относительного движения

$$x_1 - x_2 = 2x_1, \quad (17.20)$$

потому что они разлетаются симметрично.

То есть оказывается, что мы знаем и связь координат этих частиц, ведь в любой момент времени $x_2 = -x_1$, и импульсов, в этой ситуации всегда $\vec{p}_2 = \vec{p}_1$. Частицы разлетаются в разные стороны, и, если это, например, два гамма-кванта, между ними не может быть никакого информационного сообщения, ведь они летят в вакууме со скоростью света в вакууме.



Рис. 17.2. Распад частицы на два гамма-кванта

Есть два наблюдателя, A и B , и каждый из них производит измерение над частицей, которая к нему прилетела. Можно предположить, что мы знаем интервал времени между рождением частицы и производимым, например, наблюдателем A измерением. Будем называть наблюдателей Alice и Bob, ведь мы станем рассказывать про рассуждения Белла, который использовал именно такие расшифровки. В варианте Эйнштейна – Подольского – Розена Alice измеряет либо координату x_1 своей частицы, либо её импульс \vec{p}_1 . У неё есть два прибора, и она мерит то одно, то другое, но знает, что, и ведёт журнал измерений. Аналогично, Bob мерит либо x_2 , либо \vec{p}_2 у второй.

Авторы рассуждают, что из квантовой теории следует, что эти две частицы одновременно неизмеримы. Их статистика результатов измерений должна подчиняться требованиям соотношения неопределённостей Гайзенберга, произведение дисперсий должно быть ограничено снизу известным числом. Распадаются и летят разные пары частиц, мы выбираем те, которые летят вдоль оси x , в сторону Alice и Bob, чтобы те могли их впоследствии зафиксировать. Можно получить много таких пар и набрать у обоих статистику измерений.

Квантовая теория говорит, что, если Alice измерила координату, в тот же момент стала определённой координата у Bob, в соответствии с формулой (17.20). Тогда в таких парных измерениях координаты, которые фиксирует Bob, должны быть строго определёнными. А если Alice измерила импульс, то у частицы Bob стал определённым импульс, по формуле (17.19). Тогда с точки зрения квантовой теории у Bob должны быть большие проблемы, например, с измерением координат. Если Alice измерила импульс с хорошей точностью, у Bob получится огромный разброс значений координат.

Но откуда частица 2 знает, какую ей иметь дисперсию по координате, очень маленькую или очень большую? Ведь Bob производит своё измерение сразу после Alice, почти одновременно с ней. Авторы делали вывод, что в реальности, раз измерения, производимые Alice, отражаются на статистике измерений Bob до того, как информация, двигаясь даже со скоростью света, могла дойти от точки измерения Alice до точки измерения Bob, значит, вероятностное описание принципиально нелокально. То есть мы должны признать, что информация о квантовом состоянии частицы принципиально нелокальна и может распространиться мгновенно.

С точки зрения Эйнштейна, это физически недопустимая вещь для теории, в нормальной физической теории так быть не должно. Он назвал эту ситуацию «призрачным дальнодействием» (иногда переводят «кошмарным дальнодействием»). Вариант, который казался ему разумной физической альтернативой, заключался в том, что на самом деле изначально никаких неопределённостей нет. Сразу после рождения пары частиц 1 и 2 у них уже во все последующие моменты времени значения координат и импульсов зафиксированы.

В этом и была проблема. Либо мы должны признать, что квантовая теория обладает призрачным дальнодействием, либо что она не полна, и информация, которую

мы получаем нашими измерениями, не полная информация о состояниях частиц. Что у них есть какие-то другие, как их стали называть, скрытые параметры состояния, которые тоже определяются в момент рождения пары, но нам не известны. И то, что Alice и Bob получают не одно и то же значение, а разброс, связано с тем, что у разных пар были разные значения этих скрытых параметров. Они отражаются на эволюции состояний от точки рождения до Alice и Bob и, соответственно, на результатах их измерений. Поэтому статистика в измерениях значений x и \vec{p} , которую видят Alice и Bob, определяется статистикой распределения этих скрытых параметров.

Данное рассуждение запустило дискуссию, ибо предложило всем физикам сделать выбор между двумя данными вариантами. Правда, поначалу в ней превалировало обсуждение динамики системы, что у разлетающихся фотонов всё равно будет какое-то взаимодействие, например, гравитационное. Были статьи, в которых показывалось, что гравитационное взаимодействие при небольшой вариации начальных параметров тоже может внести некую неопределённость в предсказанных значениях координаты и импульса. Но нас это не будет сильно интересовать, потому что потом стало понятно, что это не главное, оно относится к конкретной постановке системы.

И второе, чем не нравился этот эксперимент, что он был очень сложным с точки зрения практической реализации. Как проводить детальные эксперименты над разлетающимися, причём в разные стороны, со скоростью света фотонами, и набирать статистику, технологически можно придумать. Но по факту, особенно в то время, 1930-е годы, этого никто не мог сказать. И вопрос, какой гамильтониан реально описывает динамику разлёта, тоже породил много дискуссий.

Поэтому Бом предложил упростить задачу, сохранив главную идею парадокса, но рассмотреть процесс, который довольно несложно реализовать практически и произвести с ним реальные измерения. У парадокса ЭПР возник вариант, который обычно и называют вариантом Бома.

Парадокс ЭПР в версии Бома со спинами

В версии Бома нужно использовать наличие у квантовых частиц такой принципиальной квантовой наблюдаемой как спин. Компоненты спина обладают теми же свойствами, что и операторы, наблюдаемые координаты и импульса. Их соответствующие операторы в квантовой теории, например, \hat{S}_x с \hat{S}_y или \hat{S}_x с \hat{S}_z , тоже не коммутируют, тоже одновременно не измеримы. Поэтому у Бома возникла естественная идея, что можно заменить измерение координаты и импульса на измерение двух взаимно перпендикулярных проекций спина.

В этом случае, если брать практическую реализацию, происходит, например, слабый распад какого-нибудь нейтрального мезона на два фермиона – фермион и антифермион. Таких процессов в физике адрона очень много. При этом можно перейти в систему отсчёта, связанную с мезоном перед распадом, то есть считать, что он в начале покоится. Тогда, например, сумма импульсов родившихся фермиона и антифермиона

тоже будет равна нулю. Но мы собираемся измерять не координаты и импульсы, которые мерить сложнее, а проекции спинов. Мы взяли именно слабое взаимодействие, потому что у него очень маленький радиус действия, так что частицы, родившиеся в слабом процессе, как правило, вылетают из одной точки. Исходный момент у мезона, скалярной частицы, был ноль, орбитальный момент относительного движения из-за маленького радиуса действия с вероятностью, близкой к единице, окажется равным нулю. Значит, полный момент системы – это просто сумма спиновых моментов родившихся частиц, которая по закону сохранения момента импульса должна равняться начальному полному моменту, то есть нулевому спину исходной покоящейся частицы.

Таким образом, в этом случае частицы 1 и 2 рождаются в состоянии с полным моментом $S = 0$ и его проекцией $S_z = 0$ и летят в разные стороны (рис. 17.3). Если это, например, частицы спина $s = \frac{1}{2}$, мы даже знаем, как это записать через спиноры, описывающие состояния отдельных частиц. Но на это посмотрим чуть позже. Опять есть два наблюдателя A и B , и каждый из них также отдельно производит измерение одной из проекций спина. Например, A измеряет \hat{s}_{x_1} и \hat{s}_{z_1} , а B измеряет \hat{s}_{x_2} и \hat{s}_{z_2} . Alice и Bob опять ведут журналы, Alice измеряет у первой частицы \hat{s}_{x_1} то есть с точки зрения квантовой теории производится коллапс начального состояния с $S = 0$. Мы понимаем, что Alice будет получать $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$ с вероятностями 50% из-за явной симметрии начального состояния по отношению к оси x . При этом она будет требовать, чтобы у частицы Bob \hat{s}_{x_2} было ровно противоположным к тому, что измерила она. То есть она своим измерением загоняет систему двух частиц в нужное состояние. А если Bob, у которого частицы уже находится в состоянии с определённым \hat{s}_{x_2} , при этом измеряет \hat{s}_{z_2} , он получит сильную дисперсию в статистике.

То есть мы можем исследовать корреляции между измерениями. С точки зрения квантовой теории они должны быть, и тогда их обнаружение будет свидетельствовать в её пользу. Сторонники локального реализма говорят, что эти же корреляции могут появиться из-за того, что есть какое-то неизвестное нам распределение вероятностей значений скрытых параметров. Тогда стоит подумать, чем отличаются одни и другие результаты.

Что про это говорит квантовая теория, нам известно. Подумаем, как описать ситуацию с возникновением корреляций в результатах измерений с точки зрения концепции локального реализма. Мы договорились, что хотим изучать парадокс ЭПР в варианте Боба с обнаружением корреляций в измерениях спиновых наблюдаемых двух разлетающихся частиц. Но пока отвлечёмся от конкретного процесса и рассмотрим общую картину.

Теорема и неравенство Белла

Пусть наблюдатель A может измерять у своей частицы наблюдаемую \hat{A} или \hat{A}' . Данные операторы не коммутируют между собой, как те же \hat{x} и \hat{p} или \hat{s}_x и \hat{s}_z ,

$$[\hat{A}, \hat{A}'] \neq 0 \quad (17.21)$$

Аналогично, наблюдатель B может производить измерения наблюдаемых \hat{B} и \hat{B}'

$$[\hat{B}, \hat{B}'] \quad (17.22)$$

Они это делают произвольно и набирают большую статистику, есть все четыре варианта измерений. Возьмём, например, случай, когда наблюдатель A измерял величину \hat{A} , а наблюдатель B измерял \hat{B} . Из статистики можно посчитать среднее значение $\langle AB \rangle$. Для удобства договоримся, что спектр возможных значений наблюдаемых \hat{A} , \hat{A}' , \hat{B} , \hat{B}' вне зависимости от того, квантовая это величина или классическая, простирается от -1 до $+1$. То есть собственные значения $A \in [-1, +1]$ и собственные значения $B \in [-1, +1]$. При этом среднее значение данных величин

$$\langle A \rangle = \langle B \rangle = 0 \quad (17.23)$$

В действительности это не ограничение общности. Если у нас есть два конкретных оператора и они не обладают этими свойствами, но имеют спектр в конечной области, вместо оператора всегда можно выбрать некоторую функцию от него, которая преобразует эту область к заданным границам, причём так, чтобы для него выполнялось условие (17.23).

Итак, мы сконструировали приборы именно так, чтобы они мерили величины, обладающие этими свойствами. Тогда среднее значение $\langle AB \rangle$ формально совпадает с величиной, которую в статистике часто называют коррелятором:

$$\langle AB \rangle \equiv C(A, B) \quad (17.24)$$

Вообще в статистике честно пишут коррелятор как

$$C(A, B) = \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle, \quad (17.25)$$

но мы с учётом (17.23) можем так не делать.

С точки зрения квантовой теории уже понятно, что делать для конкретной системы, чтобы посчитать (17.24). Корреляторы $C(A, B')$, $C(A', B)$ и $C(A', B')$ можно будет посчитать аналогично. Нужно построить вектор состояния $|\psi\rangle$ нашей системы уже по её конкретной физике, по условиям создания начального состояния, мы строим её конкретное чистое состояние. В этом случае будет

$$C(A, B) = \langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle, \quad (17.26)$$

и дальше мы уже будем его конкретно считать.

А с точки зрения концепции локального реализма мы должны сказать следующее. Поскольку начальное состояние системы $|\psi\rangle$ считается заданным по имеющимся внешним признакам, по наблюдаемым, которые мерим, на самом деле A и B – это функции параметров состояния, но среди них есть скрытые параметры. Те, которые мы знаем, совпадают со всех измерениях, а скрытые нам недоступны и могут быть варьированы.

То есть мы вводим некое пространство скрытых параметров $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s$, количество которых мы не знаем. Будем тождественно определять этот набор значений как вектор в пространстве скрытых параметров:

$$(\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_s) \equiv \vec{\lambda} \quad (17.27)$$

Тогда на каждой траектории с зафиксированными открытыми параметрами значения A и B есть функции этих скрытых параметров. То есть в данном случае для получения коррелятора нужно проинтегрировать по всей области допустимых значений этих скрытых параметров их функцию плотности распределения значений $\omega(\vec{\lambda})$, а также зафиксированные функции $A(\vec{\lambda})$ и $B(\vec{\lambda})$:

$$C(A, B) = \int d\vec{\lambda} \omega(\vec{\lambda}) A(\vec{\lambda}) B(\vec{\lambda}) \quad (17.28)$$

Получилось, что у нас есть два разных определения для коррелятора $C(A, B)$. Его схема определения для квантовой теории (17.26) жёстко определённая, потому что мы умеем строить вектора начальных состояний по заданным физическим характеристикам. И нам известны операторы измеряемых наблюдаемых, они как-то явно построены. В случае для локального реализма у нас нет способа его явно вычислить, потому что выражение (17.28) содержит неизвестную для нас функцию распределения значений скрытых параметров.

Тогда надо попытаться получить какие-то формулы в рамках концепции скрытого реализма, чтобы сравнивать её с расчётами квантовой теории и по результатам реальных измерений делать вывод, что ближе к истине.

Эта мысль была проработана и реализована Беллом. Поэтому то, что он получил, назвали неравенствами Белла. Мы про $\omega(\vec{\lambda})$ знаем только то, что эта функция неотрицательно определённая и подчинена условию нормировки на плотность распределения. Полная вероятность, что какое-нибудь значение из допустимой области у скрытых параметров выпало, равна единице:

$$\int d\vec{\lambda} \omega(\vec{\lambda}) = 1 \quad (17.29)$$

Надо, не предполагая больше ничего про функцию ω , получить некие ограничения в виде неравенств на эти корреляторы. А потом посмотреть, выполняются ли данные ограничения для рассчитанных в квантовой теории значений этих корреляторов.

В действительности на данный момент речь идёт не о каком-то одном конкретном неравенстве. Хотя в первой статье Белл получил некое вполне конкретное неравенство на корреляторы и потом показал, что мы можем посмотреть квантовую задачу в версии Бома, в которой полученное неравенство нарушается. Из чего он сделал вывод, что, если будет обнаружено экспериментальное значение, соответствующее квантовой теории, в реальной статистике измерений, это будет опровержением концепции локального реализма. Это назвали теоремой Белла.

То есть есть неравенство Белла, которому подчиняются реалистичные корреляторы локального реализма, и теорема Белла о том, что возможна экспериментальная проверка, опровержение концепции локального реализма, если результат измерений выдаст значение, не удовлетворяющее этому неравенству, но предсказанное квантовой теорией.

Потом было проведено развитие, помимо спинов были предложены другие реализации, например, физики частиц с изоспинами, которые обладают аналогичными свойствами. В результате неравенств Белла, пригодных для проверки непосредственным экспериментальным измерением, было получено довольно много. Теперь их называют во множественном числе «неравенства Белла».

Пример неравенства Белла

Рассмотрим один пример, чтобы понять, что происходит в этом случае. Введём функцию

$$F(\lambda) \equiv A(\vec{\lambda})[B(\vec{\lambda}) + \vec{B}'(\vec{\lambda})] + A'(\vec{\lambda})[B(\vec{\lambda}) - \vec{B}'(\vec{\lambda})], \quad (17.30)$$

где $A(\vec{\lambda})$, $A'(\vec{\lambda})$, $B(\vec{\lambda})$, $\vec{B}'(\vec{\lambda})$ – функции, описывающие значения наблюдаемых, которые мы измеряем.

Можно записать довольно очевидное неравенство, что модуль суммы меньше или равен сумме модулей. Для краткости не будем писать у каждой функции аргумент $\vec{\lambda}$, он везде одинаков, но будем подразумевать, что он есть. Получится

$$|F(x)| \ll |A(B + B')| + |A'(B - B')| \quad (17.31)$$

Модуль произведения равен произведению модулей, а значения A и $A' \in [-1, 1]$, поэтому $|A|$ и $|A'| \leq 1$. Так что (17.31)

$$\leq |B + B'| + |B - B'| \quad (17.32)$$

Соответственно, будет

$$|F|^2 \leq (|B + B'| + |B - B'|)^2 \quad (17.33)$$

Воспользовавшись биномом Ньютона, получим, что (17.33) равно

$$(B + B')^2 + (B - B')^2 + 2|B + B'||B - B'| = 2(B^2 + B'^2 + |B^2 - B'^2|) \quad (17.34)$$

Рассмотрим, чему может равняться (17.34). Есть всего два варианта. И B , и $B' \in [-1, 1]$, и, если при этом оказалось $B^2 > B'^2$, убираем модуль и получаем, что (17.34) равно $4B^2$. А если оказалось $B'^2 > B^2$, то оно равно $4B'^2$. Но в любом случае значение выражения (17.34) ≤ 4 . То есть, извлекая корень, получаем, что $|F| \leq 2$. Тогда, если подставить его значение (17.30),

$$|A(B + B') + A'(B - B')| \leq 2 \quad (17.35)$$

Это требование чисто арифметическое, оно не зависит от явного вида функций $(\vec{\lambda})$, $A'(\vec{\lambda})$, $B(\vec{\lambda})$, $\vec{B}'(\vec{\lambda})$. Умножим его на $\omega(\vec{\lambda})$ и проинтегрируем по всем возможным

значениям скрытых параметров. В правой части возникнет интеграл, равный единице, так что она не изменится, будет

$$\int d\vec{\lambda} \omega(\vec{\lambda}) |A(B + B') + A'(B - B')| \leq 2 \quad (17.36)$$

А слева после раскрытия скобок возникнет ограничение, что

$$|C(AB) + C(AB') + C(A'B) + C(A'B')| \leq 2 \quad (17.37)$$

Это одна из версий неравенства Белла. Многие неравенства Белла называются по фамилиям людей, впервые записавших их в какой-то статье, но их реально очень много, поэтому мы сейчас не будем приводить название этого. В нём возникло некое ограничение на корреляторы, которые мы можем реально измерить, набрав статистику в конкретном эксперименте по измерению подобных пар некоммутирующих наблюдаемых по отношению к разлетающимся частицам A и B .

Можно ли обнаружить это требование нарушенным в реальном процессе? Мы поступим чисто теоретически, у нас нет возможности ставить эксперименты. Рассмотрим на семинаре конкретную систему в конкретном начальном состоянии, с точки зрения квантовой теории посчитаем значение корреляторов из (17.37) и увидим, могут ли быть начальные состояния квантовой системы, у которых это неравенство нарушается. Тогда подтверждение этого предсказания экспериментом будет означать выполнение теоремы Белла. То есть тем, что концепция локального реализма не согласуется с реальными физическими измерениями.

Лекция 18. «Парадокс» GHZ и квантовая информатика

В конце семестра мы опять вернулись к основаниям теории, чтобы разобраться, насколько вообще обоснован весь применяемый алгоритм решения задач, основанный на парадигме квантовой теории. Мы разобрали случай различия между ней и альтернативной парадигмой, которую обычно называют парадигмой локального реализма и чьё создание схемы и детальное обсуждение приписывают в основном Эйнштейну. Но в действительности над этими вопросами работали и обсуждали их многие физики. Там были усилия и теоретиков, и математиков, и экспериментаторов, которые привели к результату развития теории на базе многочисленных измерений и вычислений, который мы видим сейчас.

Рассмотрим один из важных примеров, который в последнее время снова активно обсуждался.

«Парадокс» GHZ (Гринбергера – Хорна – Цайлингера)

Здесь мы пытаемся сконструировать последовательность, систему измерений, которая позволяет уверенно различать предсказания квантовой теории и концепции, основанной на идее скрытых параметров, концепции скрытого реализма.

В случае неравенств Белла мы использовали запутанные пары квантовых состояний, которые часто так и называют белловскими парами. Здесь речь идёт о запутанном трёхчастичном состоянии, в версии квантовой информатики мы берём три кубита. Трёхкубитовая система может находиться в произвольных чистых состояниях, так что можно приготовить её в состоянии $|\psi\rangle$, которое часто называются состоянием GHZ. И вообще запутанные тройки, хотя такого рода конструкции обсуждались ещё в 1930-е годы, в последнее время часто называют состояниями GHZ, потому что они связаны с этой задачей.

Как и раньше, будем записывать состояния кубитов в базисе из $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Состояние, которое мы считаем кодировкой числа 0, это спинор $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, а которое считаем кодировкой числа 1, это $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Возьмём довольно простую комбинацию

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \quad (18.1)$$

Видно, что данное чистое состояние является состоянием, в котором все три кубита находятся в одном из базисных, либо в состоянии $|0\rangle$ (первое слагаемое), либо в $|1\rangle$ (второе).

Пусть это система трёх нерелятивистских частиц спина $s = \frac{1}{2}$, например, трёх протонов или нейтронов, которые генерятся в таком состоянии. Произведём в нём измерение, допустим, проекции спина первого нейрона. Тогда произойдёт коллапс состояния (18.1), с вероятностью $\frac{1}{2}$ выпадет либо $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, либо $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, мы получим либо $+\frac{1}{2}$,

либо $-\frac{1}{2}$. При этом две другие частицы окажутся в состоянии с определённой проекцией спина на ось z , такой же, какая получилась у первой.

Если у нас есть метод генерации таких состояний, его можно потестировать, проводя над ним какие-то тестирующие измерения. Но при этом мы хотим, чтобы можно было не много раз производить данное состояние, а осуществить измерение над одним, чтобы в итоге ничего не испортилось.

В данном случае можно произвести измерение разных наблюдаемых. У каждого из кубитов можно измерять две, какие брали раньше, \hat{A}_i и \hat{B}_i , где $i = 1, 2, 3$, поскольку кубитов три. В качестве \hat{A}_i возьмём удвоенную проекцию спина на ось x , а в качестве \hat{B}_i на ось y :

$$\hat{A}_i = 2\hat{S}_{x_i} \quad (18.2)$$

$$\hat{B}_i = 2\hat{S}_{y_i} \quad (18.3)$$

Как мы помним, это не коммутирующие наблюдаемые, и у одной частицы мы не можем измерить одну из них, не испортив результат измерения другой. Но измерить, например, \hat{A}_1 и не испортить результат измерения \hat{B}_2 можно, они относятся к разным частицам и соответствующие операторы коммутируют.

Итак, у нас есть такая пара наблюдаемых (18.2) и (18.3). Мы добавили 2, чтобы в результате собственные значения этих проекций спина, как мы помним, стали равны ± 1 . Можно измерить наблюдаемую \hat{C}_0 , которая будет

$$\hat{C}_0 = \hat{A}_1\hat{A}_2\hat{A}_3 \quad (18.4)$$

Индекс внизу – это индекс частицы, так что операторы \hat{A}_1 , \hat{A}_2 и \hat{A}_3 попарно коммутируют.

Данный оператор можно записать непосредственно в виде спинорной конструкции. Оператор спина – это произведение $\frac{1}{2}$ на матрицу Паули, соответственно, при подстановке этих матриц в (18.2) двойки сократятся, и в (18.4) останутся матрицы Паули для каждой из трёх частиц, а именно σ_x . То есть наблюдаемая (18.4) запишется как

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (18.5)$$

Посмотрим, что получится, если мы подействуем ею на состояние (18.1). Каждая из матриц в (18.5) будет действовать на свою матрицу, при этом переворачивая её. Например, $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, действуя на $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, превращает его в $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, и наоборот. Поэтому произведение трёх спиноров, представленное первым слагаемым в (18.1) превратится во второе, а второе в первое, они просто поменяются местами. И мы обнаруживаем, что будет

$$\hat{C}_0|\psi\rangle = (+1)|\psi\rangle \quad (18.6)$$

То есть наблюдаемая (18.4) очень удобная для состояния (18.1), её можно в нём измерить. Более того, раз (18.6) её собственный вектор с собственным значением $+1$, то,

если мы измерим \hat{C}_0 в состоянии $|\psi\rangle$, получим значение $+1$. То есть можно уже без крышечек написать, что мы можем измерить величину C_0 в этом состоянии и знаем, что её значение будет

$$C_0 = +1 \tag{18.7}$$

Введём ещё три наблюдаемые

$$\hat{C}_1 \equiv \hat{A}_1 \hat{B}_2 \hat{B}_3 \tag{18.8}$$

$$\hat{C}_2 \equiv \hat{B}_1 \hat{A}_2 \hat{B}_3 \tag{18.9}$$

$$\hat{C}_3 \equiv \hat{B}_1 \hat{B}_2 \hat{A}_3 \tag{18.10}$$

и попытается произвести их измерение в этом же состоянии.

Сразу бросается в глаза, что они превращаются друг в друга перестановкой индексов 1, 2, 3. А исходное состояние (18.1) инвариантно относительно таких перестановок. Мы каждый раз производим у одной частицы измерение проекции спина на ось x , а у двух других на ось y , и это независимые измерения, поскольку они относятся к разным частицам. Поэтому, даже ничего не вычисляя, можно сказать, что, например, средние значения и дисперсии наблюдаемых (18.8 – 18.10) в этом состоянии одинаковы.

Посмотрим, как действует оператор (18.8) на состояние (18.1). \hat{A}_1 это матрица Паули σ_x , \hat{B}_2 – матрица Паули σ_z или σ_y , \hat{B}_3 – это σ_z или σ_y . Их произведение умножается на состояние (18.1):

$$\hat{C}_1 |\psi\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot |\psi\rangle \tag{18.11}$$

Здесь уже всё будет не так очевидно. Когда конструкция $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ умножается на первое выражение $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ в (18.1), спин переворачивается, и вместо него получается $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Когда матрица $\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ будет умножаться на второй и третий спиноры $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, действие будет одинаково. Более того, из-за того, что снова антидиагональная матрица действует на спинор, у которого опять только одна компонента отлична от нуля, снова произойдёт переворот, из $\begin{pmatrix} 0 & -i \end{pmatrix}$ мы умножим 0 на 1, $-i$ на 0, и получится спинор, у которого верхняя компонента 0. А от $\begin{pmatrix} -i & 0 \end{pmatrix}$ мы получим i , и в итоге будет спинор $\begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix}$. То же самое произойдёт с третьим спинором, и получится $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix}$. После вынесения множителя i из каждого спинора возникнет $i^2 = -1$, и то, что получится, будет конструкцией как во втором слагаемом (18.1), но умноженной на -1 .

Когда \hat{C}_1 из (18.11) подействует на второе слагаемое в (18.1), получится $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix}$ и произойдёт то же самое. В результате вынесения множителя $i^2 = -1$ мы получим в точности первое слагаемое в (18.1). Так что из (18.11) будет

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} \right\} = (-1)|\psi\rangle \quad (18.12)$$

То есть $|\psi\rangle$ является собственным вектором оператора \hat{C}_1 с собственным значением -1 . Следовательно, если мы будем измерять в этом состоянии наблюдаемую \hat{C}_1 , получим -1 с вероятностью 100%. То есть мы можем считать C_1 имеющей в данном состоянии определённое значение, равное

$$C_1 = -1 \quad (18.13)$$

Из отмеченной ранее симметрии, в чём можно убедиться и непосредственным вычислением, понятно, что наблюдаемые C_2 и C_3 тоже будет иметь в данном состоянии определённое значение

$$C_2 = C_3 = -1 \quad (18.14)$$

Заметим, что (18.2) и (18.3) у нас не совместные, если они относятся к одной частице. А если к разным, то они коммутируют, так что можно в этом состоянии измерить все четыре наблюдаемых (18.4, 18.8–18.10), и они будут иметь определённое значение. Более того, можно ввести наблюдаемую

$$\hat{C} \equiv \hat{C}_0 \hat{C}_1 \hat{C}_2 \hat{C}_3 \quad (18.15)$$

И открытое нами свойство каждого из данных операторов скажет, что, если мы подействуем \hat{C} на $|\psi\rangle$, получится просто произведение четырёх значений. Так что эта наблюдаемая имеет в данном состоянии определённое значение, равное произведению всех четырёх собственных значений, то есть

$$C = C_0 \cdot C_1 \cdot C_2 \cdot C_3 = -1 \quad (18.16)$$

Итак, квантовая теория предсказывает, что, если мы измеряем \hat{C} в этом состоянии, то с вероятностью 100% получим -1 .

При выполнении реального эксперимента не всегда удастся полностью исключить взаимодействие данной системы с окружающим миром, могут быть какие-то ошибки эксперимента, от которых не застрахован и квантовый. Как определить ошибку и что она случилась или нет – отдельный вопрос, который тоже решается в разнообразных версиях квантовых алгоритмов. Но сейчас мы по крайней мере на уровне теории понимаем, что должно быть так. И когда мы будем реально приготавливать трёхкубитовую систему в таком состоянии и производить такое измерение, в этом эксперименте должны получать -1 . $+1$ будет ошибкой, связанной с неидеальностью реализации схемы, и, если мы всё хорошо сделали, скорее всего, большой редкостью.

Теперь рассмотрим, что говорит концепция локального реализма, если мы рассмотрим данное измерение с её точки зрения. Наши три кубита, возможно, удалились на расстояние так, что события произведения измерений разделены пространственноподобными интервалами. Измерения, производимые над отдельной частицей, не должны быть никак связаны друг с другом, иначе реализуется то самое кошмарное или призрачное дальноедействие. Локальный реализм не признаёт

возможности того, что измерение проекции спина одной частицы как-то влияет на измерение проекции спина другой. В нём наблюдаемая статистика разных исходов связана с тем, что, когда мы эту систему приготовили, она уже находилась в каком-то из возможных состояний. И результат измерений каждой из проекций спина, всех \hat{A}_i и \hat{B}_i просто выявляет, какое конкретное состояние было создано при генерации исходной системы. С точки зрения концепции локального реализма эти состояния различаются каким-то скрытым параметром, по которому есть некое конкретное распределение.

Чтобы не разбираться со статистикой, рассмотрим одно конкретное измерение. В каждом из них величины $A_{1,2,3}$ и $B_{1,2,3}$ – не операторы, а конкретные числа, просто они нам не известны. Есть какое-то распределение вероятностей, которое задаёт все возможные наборы их значений.

Понятно, что значение, например, переменной C_0 просто произведение

$$\hat{C}_0 \equiv \hat{A}_1 \hat{A}_2 \hat{A}_3 \quad (18.17)$$

То есть оно тоже пробегает значения $+1, -1$, так как их пробегает каждое из чисел $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3$.

Аналогично,

$$\hat{C}_1 \equiv \hat{A}_1 \hat{B}_2 \hat{B}_3 \quad (18.18)$$

$$\hat{C}_2 \equiv \hat{B}_1 \hat{A}_2 \hat{B}_3 \quad (18.19)$$

$$\hat{C}_3 \equiv \hat{B}_1 \hat{B}_2 \hat{A}_3 \quad (18.20)$$

В действительности у нас есть волновая функция, зависящая от какой-то спиновой переменной, например, s_z , так, что когда та принимает значение $+\frac{1}{2}$, это спинор $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Существует некая функция, связывающая значения спинов, описывающих спиновые состояния, со значением какой-то внутренней характеристики частицы. А в локальном реализме мы говорим, что есть некий набор переменных, задающих состояние частицы, и все наблюдаемые величины есть числовые функции этих числовых переменных. Вопрос и идея только в неполноте имеющейся информации, что часть переменных принимают значения, которые нам априори неизвестны. Когда мы приготавливали систему, на языке волновой функции записали, что либо все три частицы с вероятностью $\frac{1}{2}$ находятся в состоянии со спином по оси z , либо с такой же против неё. То есть добились конкретного состояния, и любая проекция спина, s_z, s_x, s_y и т. д., то есть измеряемая величина, есть функция переменных, однозначно описывающих данное состояние. Просто какие-то из данных состояний мы не знаем, и функцию распределения значений этих неизвестных нам параметров по их возможному диапазону тоже. И поэтому вынуждены сказать, что все шесть переменных $A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3$ каждый раз принимают значения $+1$ или -1 с неизвестными нам вероятностями. А для состояния, которое сгенерировалось, выбралась какая-то реализация из их возможных значений, поэтому каждое из этих чисел в реальности имеет значение $+1$ или -1 . И это потом

должно отразиться в нашем измерении. Конечно, интересно, как эту схему технически реализовать, например, для трёх протонов, но это именно вопрос технической реализации, а не концептуальный.

А здесь обнаруживается следующая любопытная вещь. Наблюдаемая C должна иметь некоторое значение. На первый взгляд может показаться, что, поскольку вероятности реализации нам не известны, то произведение множества $+1$ и -1 либо $+1$, либо -1 . Но не в данном случае. Если мы запишем просто перемножение выражений (18.17–18.20), сразу увидим, что любой из шести множителей $A_{1,2,3}$ и $B_{1,2,3}$, принимающих значения $+1$ или -1 , встречается в нём ровно два раза, то есть все шесть множителей $+1$ или -1 в нём стоят в квадрате. Тогда, разумеется,

$$C = +1 \quad (18.21)$$

То есть в концепции локального реализма мы не знаем, с какой вероятностью выпадет каждое из конкретных состояний этой тройки, но, если измерим наблюдаемую C , то обязательно получим $+1$, просто потому что эта величина придумана так, что у неё не бывает других значений.

То есть мы получили полностью альтернативное предсказание. Квантовая теория говорит, что мы должны получить -1 , а концепция локального реализма, что $+1$. Разумеется, эксперимент в этом случае должен дать чёткий ответ, что мы будем получать. Мы помним, что иногда могут быть небольшие ошибки, но всё же, если всё делаем аккуратно, должна быть явная статистика. Мы готовим конкретную тройку и у неё проводим одно измерение. Если мы получили -1 , то это измерение в пользу квантовой теории. Потом готовим следующую тройку и тоже проводим одно измерение.

У нас есть прибор, который генерирует эти тройки. Мы в принципе можем исследовать, как он работает, по отдельности мерить (18.18), (18.19), (18.20), убедиться, что будут получаться нужные значения. Квантовая теория очень чётко говорит, что (18.17) обязательно принимает значение $+1$, а (18.18), (18.19), (18.20) значения -1 . А концепция локального реализма, что все четыре величины могут принимать значения как $+1$, так и -1 , с какими-то неизвестными нам вероятностями, зависящими от того, как работал прибор, сгенерировавший это начальное состояние. То есть про эти четыре величины по отдельности квантовая теория тоже даёт конкретное предсказание. Более того, легко убедиться, что общий собственный вектор этих четырёх наблюдаемых с точностью до фазового множителя единственный.

\hat{C}_0 состояние (18.1), как мы видели, не меняет, поскольку это его собственный вектор, просто сообщит нам обнаруженное значение. Поэтому потом можно произвести над той же тройкой частиц $\hat{C}_1, \hat{C}_2, \hat{C}_3$. И если мы получили какие-то четыре значения $+1$ и -1 , можем сказать, что, пусть мы не знаем, что было в начале, но теперь система точно находится в таком состоянии.

Дальше это уже вопрос проверки корректности экспериментальной реализации. Если мы придумали конкретный способ реализации данной трёхкубитовой системы, то,

проводя много измерений и каждый раз получая эти четыре значения, скажем, что видим с высокой степенью достоверности, что наш прибор действительно генерирует именно это состояние GHZ. В этом можно удостовериться, только набрав статистику. Но если мы каким-то образом убедились, что наш способ генерирует такие состояния, то просто проводим одно измерение одной наблюдаемой (18.16).

\hat{C} – эрмитов оператор, значит, это какая-то наблюдаемая. Любую величину, изображаемую эрмитовым оператором, теоретически можно реализовать как наблюдаемую в конкретной квантовой системе. Вопрос практической реализации более сложный. Но в реальности измерений такого рода было произведено очень много, и экспериментаторы обычно проводили измерения всех четырёх величин $\hat{C}_1, \hat{C}_2, \hat{C}_3, \hat{C}_4$, чтобы убедиться, что они правильно готовят данное состояние. Правда, тем самым оказывается, что измерение этих величин в некотором смысле комбинированное измерение величины \hat{C} . На вопрос, можем ли мы придумать какое-то действительно единичное измерение, которое мерит именно \hat{C} , нельзя ответить в общем. Сейчас можно только сказать, что это теоретически возможно, всё остальное делается в реальной лаборатории.

В итоге экспериментаторы сказали, что они много раз мерили и всё время получали, что результаты измерений очень хорошо коррелируют с предсказаниями квантовой теории (18.16) и очень плохо с предсказаниями локального реализма (18.21).

Мы сразу взяли слово «парадокс» в название в кавычки, потому что на самом деле его нет. Данная история была названа парадоксом авторами с точки зрения концепции локального реализма. Ведь эта концепция говорит, что, не важно, как распределены сгенерированные состояния по скрытым параметрам, произведение квадратов величин, равных ± 1 , должно равняться единице, поэтому должно быть (18.21). Но экспериментатор утверждает, что померил её и получил -1 . Это становится парадоксом, если мы неверно предположили, что все шесть величин $A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3$ стали иметь определённое значение в момент, когда мы создали состояние. То есть что наши измерения, например, измерение величины A_i , уже никак не влияли на значение B_i , потому что оно уже заранее было создано. Локальный реализм как раз утверждает, что нельзя, производя измерения, разделённые пространственноподобным интервалом, обнаружить взаимное влияние. Что его можно объяснить только через то, что величины повлияли друг на друга во время создания нашего состояния.

А с точки зрения квантовой теории мы просто подействовали заданными операторами на заданную спинорную конструкцию и увидели, что получилось. То есть нам, по сути, нужно было только уметь алгебраически умножать матрицы 2×2 на столбец 2×1 , чтобы убедиться, что (18.16) не только может быть, но и для данного состояния обязательно так должно получаться, если нам действительно удалось сгенерировать эту GHZ-тройку.

Мы обнаруживаем здесь результат, который достаточно неожиданный с точки зрения здравого смысла, но вполне нормативен с точки зрения квантовой теории. В таких случаях говорят, что тем хуже для здравого смысла. Если результат эксперимента ему противоречит, остаётся только признать, что наш здравый смысл был неправ, и нам стоит сказать, что теперь им является полученное в эксперименте.

Тут трудно удержаться от философских обобщений, но с точки зрения квантовой механики они не нужны, всё просто и понятно. Мы действительно убедились, что можем генерить запутанные состояния, квантовая запутанность это факт. И если элементы системы находятся в запутанном состоянии, то воздействие на квантовое состояние какого-то элемента подсистемы может быть произведено измерением над другим элементом. Причём с нашей точки зрения мгновенно в момент измерения независимо от расстояния, которое разделяло эти два элемента в реальной физике, если нам удалось сохранить квантовую когерентность состояния, и оно не разрушилось за момент времени, пока мы разводили элементы на недоступное для классического сигнала расстояние.

Теперь мы понимаем, почему сейчас нет разумной детерминистической альтернативы квантовой теории. Это не означает, что нет попыток её построить. Они сейчас в какой-то степени не модны, потому что подавляющее большинство физиков вполне удовлетворено ситуацией, считая, что, раз в квантовой теории всё проверено, можно пользоваться ей. Она умеет предсказывать статистику результатов измерений и всевозможных исходов разных действий, произведённых над квантовыми системами. А это всё, что нам нужно для эксперимента и инженерии. Но среди людей, которые хотят разобраться, как всё устроено на самом деле, и сейчас есть те, кто пытается построить альтернативные концепции. Однако пока ещё никто не сумел предъявить такую, которая бы корректно описывала всю совокупность экспериментов, производимых в микромире, особенно эксперименты над частями запутанных квантовых систем.

Особый раздел, о котором мы вскользь упоминали, и который интересен, но должен быть предметом отдельно отдельного курса, это практические приложения. Например, простая часть квантовой механики, которую мы изучаем и которую раньше называли теорией двухуровневых систем, а теперь кубитов, то есть квантовых битов, стала основой квантовых информатики, криптографии, компьютеринга. Некоторые примеры оттуда мы смотрели, но в действительности там огромная коллекция разных частичных задач.

У профессора Кулика есть курс посвящённый квантовой информатике. Каноническими учебниками считаются Нильсон, Чанг или Престел, они давно переведены на русский язык и их легко найти. В них очень много написано, но на самом деле там всё построено на базе обычной квантовой механики, причём относительно простых систем. Квантовые информатики дополнительно вводят множество обобщений, которые им удобны, и даже иногда полемизируют с физиками, занимающимися квантовой теорией.

Самая активная область полемики – определение концепции измерения. Квантовая механика обычно исходит из того, что измерение – это такое взаимодействие квантового объекта с макроскопическим прибором, которое загоняет данный объект в некое состояние и выдаёт число, являющееся собственным значением оператора, описывающего всю процедуру. А соответствующее состояние, некое чистое, будет описываться собственным вектором.

В квантовой информатике такие канонические для квантовой механики измерения называют проективными в том смысле, что при измерении мы всегда загоняем объекты в один из собственных векторов эрмитова оператора, и, как следствие, они все будут обязательно ортогональны друг другу. И операторы проектирования на каждый из таких векторов будут операторами проектирования на ортогональные подпространства, в сумме дающие единицу, это будет естественное условие. В квантовой информатике показалось удобней предусмотреть возможность описать некое обобщённое измерение, которое переводит наш вектор в некий набор состояний, который не обязательно ортогональный.

Тогда сразу резко усложняется схема описания, в первую очередь потому что становится немного неоднозначной. Но с точки зрения квантовой механики это не ошибка, хотя формально требования, которые мы обычно предъявляем к операторам измерений, при этом нарушаются. Физик скажет, что там просто учитывают обстоятельство, что между двумя измерениями система может как-то эволюционировать, можно задать между ними некую эволюцию. Когда мы хотим описать результат последующего измерения, возникают операторы, которые есть произведение оператора эволюции на соответствующий оператор следующей наблюдаемой. И мы обнаруживаем, что с точки зрения последующего измерения могут нарушиться требования, что раньше были только суммы проекторов на ортогональные дополнения, а теперь происходит разбиение на какие-то другие подпространства.

Более того, в квантовой информатике часто используют конструкции, которые позволяют описать, например, результаты трёх измерений над системой с двумя степенями свободы. Понятно, что там тоже не будет нашего обычного условия, когда только ортогональные дополнения, только ортогональные друг другу подпространства, и сумма проекторов на них всегда единица. Там тоже можно добиться равенства суммы проекторов единице, но при этом три проектора уже не будут проекторами на ортогональные подпространства в двумерном пространстве.

Тем не менее, все задачи квантовой информатики можно решать с позиции обычной квантовой механики. Но люди, занимающиеся квантовой информатикой, скорее всего, хотели сделать так, чтобы их технология работы позволяла им максимально проводить параллели с классической теорией информации. И вообще все задачи квантовой информатики в основном задачи о том, как, оперируя квантовой системой, как-то сделать что-то, например, с точки зрения передачи информации или реализации какого-то информационного алгоритма, что нельзя сделать с классической системой. Для

тех, кто занимается квантовой информатикой, их наука в первую очередь о расширении практических возможностей работы с информацией. И с этой точки зрения все конструкции, которые они там выстраивают, логичны. Они все могут быть переписаны на языке обычной квантовой механики, и в конкретных задачах часто пользуются её методами, но при описании общих конструкций иногда стараются написать что-то более сложное.

Но, чтобы во всём этом детально разобраться, надо читать отдельные курсы, посвящённые квантовой информатике как таковой, чтобы почувствовать некую разницу в подходах, которая есть у квантовой информатики и квантовой механики. В конце концов, большинство специалистов, пришедших в квантовую информатику, до этого часто занимались даже не квантовой механикой, а квантовой теорией поля, просто переключились на немного другую систему понятий.

Задача 1. Плотное кодирование на квантовых состояниях

В завершение немного проиллюстрируем слова про квантовую информатику как некоторую коллекцию методов решения с помощью квантовых систем задач информатики, не решаемых с точки зрения классических систем. Начнём с самого знаменитого примера, с которого, по сути, началась квантовая информатика. Он в ней называется демонстрацией плотного кодирования на квантовых состояниях.

Существует классическое кодирование, когда у нас есть некая физическая система, классический бит, который может находиться в одном из двух состояний, $|0\rangle$ или $|1\rangle$. И мы составляем простую схему кодирования, что каждое из состояний содержит значение в двоичном разряде, переменную либо 0, либо 1. То есть это некий двоичный код.

Пусть у нас есть физическая реализация этого бита и существует возможность переслать его от отправителя A , Alice, как мы договорились, к получателю B , Bob. Тогда Alice посылает свой бит Bob, тот его измеряет и узнаёт, что она ему хотела сообщить, 0 или 1. Таким образом, пересылая один классический бит, Alice передаёт Bob один бит информации. Если ей нужно передать два бита информации, например, сообщить какое-то число от 0 до 4, ей придётся посылать два классических бита. $2 \cdot 2 = 4$ возможных результата измерений Bob над двумя полученными битами, то есть он действительно получит два бита информации.

Теперь воспользуемся квантовыми объектами и посмотрим, что такое квантовое кодирование. Одна из его возможных схем состоит в следующем. Пусть Alice и Bob сгенерили белловское состояние $|+\rangle$ которое в наших спинорных обозначениях записывается как

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad (18.22)$$

Это чистое состояние системы из двух запутанных кубитов, половина которой у Alice, половина у Bob. То есть у Bob по-прежнему в распоряжении один свой кубит, и он может производить измерения только над ним, у него однокубитовый получатель информации.

Помимо этого состояния можно записать и другие. Обозначим

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad (18.23)$$

Мы уже пользовались такой конструкцией, для частиц спина $\frac{1}{2}$ это состояние с полным спином, равным нулю. Оно ортогонально состоянию (18.22). Можно написать ещё два ортогональных состояния

$$|\tilde{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \quad (18.24)$$

$$|\simeq\rangle = \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \quad (18.25)$$

В действительности (18.24) и (18.25) тоже можно записать как собственные вектора какой-то наблюдаемой, которую можно построить через спиноры, отвечающие проекциям спина, повернутым на 45° . Но для нас важно то, что существует такой базис из четырёх ортогональных состояний, они таким образом являются различимыми.

Если Alice переправит свой кубит Bob, у него образуется вся пара, и он может произвести над ней измерение как над чистым состоянием. Это в терминологии квантовой теории информации и называют проективным измерением, то есть наше обычное измерение. Можно сконструировать наблюдаемую

$$\hat{F} = f_1 |+\rangle\langle +| + f_2 |-\rangle\langle -| + f_3 |\tilde{+}\rangle\langle \tilde{+}| + f_4 |\simeq\rangle\langle \simeq| \quad (18.26)$$

Поскольку все четыре состояния ортогональны, они образуют полный базис в пространстве двухкубитовых состояний. Если спектр невырожден, то есть f_1, f_2, f_3, f_4 различны, измеряя наблюдаемую (18.26), Bob узнаёт, в каком из этих четырёх состояний находился его кубит. Он одним таким измерением над двухкубитовой системой устанавливает её состояние.

После этого становится понятно, что существует способ передать Bob четыре числа. Для этого Alice перед отправкой своего кубита всего лишь должна произвести действие, которое позволит Bob распознать, какое из четырёх чисел f_1, f_2, f_3, f_4 она передаёт. Они могли заранее их согласовать, сконструировав наблюдаемую (18.26). Например, это могут быть числа 0, 1, 2, 3 или 1, 2, 3, 4, и т. д.

Если Alice хочет передать Bob значение f_1 , ей ничего не надо делать со своим кубитом перед пересылкой, никак не нужно менять его состояние. Если значение f_2 , ей нужно превратить состояние этого кубита в (18.23). Она не может произвести измерение, потому что тем самым она разрушит когерентность, но может произвести какое-то унитарное воздействие, то есть поместить свой кубит перед отправкой в условия, когда он проэволюционирует определённым образом.

Очевидно унитарным оператором является, например, $\hat{\sigma}_3$. Если мы произведём на первый кубит в (18.22) это действие, $\hat{\sigma}_3^{(1)}$ оставит $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ у первого кубита неизменным, а $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ превратит в $-\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Тем самым Alice переведёт свой кубит в состояние (18.23), и Bob, измеряя наблюдаемую (18.26), получит значение f_2 .

Если Alice хочет, чтобы Bob получил значение f_3 , ей надо превратить в (18.22) $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ в $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, а $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ в $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Для этого ей надо поместить свой кубит в (18.22) в такие условия, чтобы он проэволюционировал в соответствии с матрицей

$$\hat{\sigma}_1^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (18.27)$$

Тогда он превратится в кубит в (18.24)

А если Alice хочет, чтобы Bob получил f_4 , ей нужно будет подействовать матрицей

$$\hat{\sigma}_2^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (18.28)$$

Тогда она превратит в (18.22) $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ в первом слагаемом в $+i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, а $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ во втором в $-i \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, и после вынесения из получившегося выражения множителя $-i$, который фазовый множитель $e^{-i\frac{\pi}{2}}$, как раз получится состояние (18.25).

В квантовой информатике это называется квантовым протоколом передачи двух бит классической информации путём пересылки одного кубита. Alice пересылкой производит одно из четырёх описанных действий – либо ничего не делает, либо создаёт условия, в которых кубит проэволюционирует в соответствии с тремя разными унитарными операторами, потом отправляет свой кубит. Bob получает его, производит одно измерение наблюдаемой (18.26) и в результате узнаёт, из четырёх чисел, которое отправила ему с ним Alice. При классическом кодировании пересылают один бит, получатель его мерит и пишет первое число, 0 или 1, потом пересылают второе и т. д. А здесь Bob, получив, например, f_1 , пишет 00, а если f_2 , то 10 и т. д. То есть Alice пересылкой своего кубита заполнила ему две ячейки в двоичном коде. После этого она берёт вторую пару запутанных кубитов и пересылает ему следующие два числа.

Это пример, где мы, как выражаются в квантовой информатике, в два раза увеличиваем плотность кодирования за счёт того, что пользуемся при пересылке не классическими битами, а квантовыми кубитами. Огромное количество задач квантовой информатики посвящено идее, что мы можем, используя квантовые объекты, получить лучший результат, чем используя классические. Данный пример был связан с белловским базисом состояний двухкубитовых систем. Мы использовали пару запутанных кубитов в белловском состоянии, чтобы передать больше классической информации.

Мы предполагаем, что технологически можем создать унитарную эволюцию половины кубита и её пересылку второму человеку. Если мы можем пересылать

классические биты, то за одну пересылку можем переправлять один бит информации, а если кубиты, не разрушая их состояние, то два. И чем больше запутанных кубитов мы можем создать в качестве системы, так, чтобы в ходе выполнения операций алгоритма когерентность не разрушилась до финального измерения, тем больше информации можем передать.

Идея квантового компьютера и состоит в том, что мы придумали некий чисто квантовый алгоритм, который не реализуется над классическими битами, но реализуется на системой n запутанных кубитов. С точки зрения такого подхода квантовое вычисление – когда мы берём исходное состояние этой системы и производим над ним набор каких-то унитарных преобразований, не разрушая когерентность, а конце производим над этой системой какое-то реальное измерение, которое выдаёт конечный результат вычислений. Данную процедуру можно разбивать на шаги. Например, была унитарная операция, произведено измерение, в зависимости от его результата генерится новое состояние системы спутанных кубит и дальше идут следующие операции. В этом случае мы объявляем вычислением один шаг, после финального измерения получаем результат, и, если хотим произвести новое вычисление, должны начинать заново.

Более того, очень часто в алгоритме доказывают, что финальное измерение выдаст интересующий нас результат с вероятностью, близкой к единице, например, 0,999. В квантовых вычислениях вычисление, которое может выдать достоверный результат, как правило, почти нереализуемая вещь. Тогда, если вероятность, что ответ правильный, 0,999, можно повторить вычисление четыре раза. Если все разы получили одинаковый результат, то вероятность того, что он неверен, $(10^{-3})^4 = 10^{-12}$. То есть можно понизить вероятность ошибки очень сильно, но она всё равно будет.

Задача 2. Увеличение числа выигрышей при использовании пары спутанных кубитов

Следующий пример тоже довольно известный. Он используется во многих книгах, чтобы продемонстрировать преимущества квантовых алгоритмов между классическими. Также он замечателен тем, что напрямую показывает, как можно использовать в практических целях неравенства Белла.

Alice и Bob не могут общаться между собой, между ними по каким-то причинам закрыт канал информационного общения, но должны производить скоррелированные действия. Для этого они завели ассистента C , в англоязычной версии его обычно называют Charlie. В современных книгах по квантовой информатике есть каноническая система пиктограмм, там любят рисовать Alice в виде героини книг Кэролла, Bob как губку Боба, а Charlie Чарли Чаплином.

Роль Charlie состоит в следующем. Он посылает два кубита, Alice кубит $|x\rangle$, а Bob кубит $|y\rangle$ (рис. 18.1). Alice должна трансформировать свой кубит в $|a\rangle$, а Bob свой в $|b\rangle$. Номера x и y пробегает значения 0 и 1, и управляющей величиной является их произведение

$$z \equiv x \cdot y, \tag{18.29}$$

которое тоже выдаёт 0 или 1.

Если Charlie передал $z = 0$, он передал это и Alice, и Bob, пусть ни один из них не знает, что сообщено другому. Но, чтобы выиграть, они должны сгенерить свои кубиты в одинаковом состоянии, либо оба $|0\rangle$, либо оба $|1\rangle$. А если он им передал $z = 1$, они должны сгенерить кубиты в разном состоянии, $|0\rangle$ и $|1\rangle$ или наоборот.

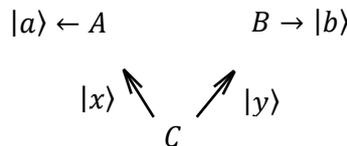


Рис. 18.1. Посылка Charlie кубитов их преобразование Alice и Bob

Если они работают с классическими битами, у Alice и Bob есть способ выигрывать чаще, чем проигрывать. Ведь когда x и y пробегают значения 0 и 1, то из четырёх возможных пар три дают значение $z = 0$, и только одна, когда и x , и y равны единице, даёт $z = 1$. Поэтому Alice и Bob могут договориться, что всегда будут выдавать свои кубиты в состоянии $|0\rangle$, как бы реагировать на $z = 0$. Тем более, если, например, Alice получила 0, она знает, что $z = 0$. Тогда при наборе статистики в 75% случаев Alice и Bob побеждают.

Разберёмся, могут ли они улучшить ситуацию, то есть превысить этот показатель, если будут оперировать с квантовыми кубитами. Пусть они говорят Charlie, чтобы тот сначала генерил кубиты в запутанном состоянии, чтобы получалось

$$|xy\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right], \tag{18.30}$$

знакомое нам одно из белловских состояний, если это измерение проекции спина, состояние с полным спином $S = 0$. А уже потом делил два кубита этой запутанной пары и отправлял им.

Алгоритм Alice и Bob выглядит как при нашем выводе неравенства Белла. Alice измеряет одну из наблюдаемых, \hat{A} или \hat{A}' . Она измеряет кубит, присланный Charlie, обнаруживает, например, 0, и в этом случае загоняет свой кубит в собственный вектор наблюдаемой \hat{A} . А если получает 1, то в собственный вектор \hat{A}' .

Мы для проекций спинов на их языке говорили, что \hat{A} и \hat{A}' отвечают измерениям проекций спинов по осям z и по x . То есть Alice загоняет свой кубит в состояние с определённым значением либо проекции спина на ось z , либо на ось x . А Bob производит измерения наблюдаемых, отвечающих проекциям спина, как мы обсуждали, повернутым на угол φ (рис. 18.2).

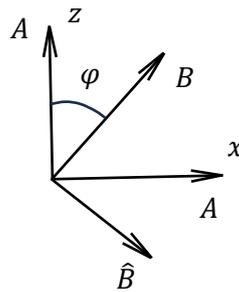


Рис. 18.2. Выбор координатных осей

Пусть p_{xy} – вероятность «победы» у Alice и Bob, если они получают от Charlie кубиты в состояниях $|x\rangle$ и $|y\rangle$. Если они получили кубиты $|0\rangle$, Alice должна произвести измерение наблюдаемой \hat{A} , а Bob наблюдаемой \hat{B} . У каждой из наблюдаемых в итоге должно быть состояние $|0\rangle$. Числа A и B пробегают значения 0, 1, мы считаем результатом измерений либо A , либо B у каждого. Если Alice и Bob выиграли и сгенерили одинаковые кубиты, должно быть $AB = +1$, если проиграли, то -1 . Тогда среднее значение $\langle AB \rangle$ равно сумме произведения $+1$ на соответствующую вероятность выигрыша p_{00} и -1 на вероятность проигрыша $1 - p_{00}$:

$$\langle AB \rangle = (+1)p_{00} + (-1)(1 - p_{00}) = 2p_{00} - 1 \quad (18.31)$$

Рассуждая аналогично, если Alice обнаружила у себя кубит $|0\rangle$, а Bob $|1\rangle$, то они мерят \hat{A} и \hat{B}' . Тогда получается то же выражение для связи соответствующего среднего значения с соответствующей вероятностью

$$\langle AB' \rangle = 2p_{01} - 1 \quad (18.32)$$

И если Alice обнаружила кубит в состоянии $|1\rangle$, а Bob в состоянии $|0\rangle$, также будет

$$\langle A'B \rangle = 2p_{10} - 1 \quad (18.33)$$

Единственное отличие возникает, если они оба обнаружили у себя кубит $|1\rangle$. Тогда Alice должна мерить \hat{A}' , а Bob \hat{B}' . Но теперь они должны выдать разные кубиты, поэтому теперь для них $A'B' = +1$ означает неуспех, а равное -1 успех. И получится

$$\langle A'B' \rangle = (-1)p_{11} + (+1)(1 - p_{11}) = 1 - 2p_{11} \quad (18.34)$$

Если все возможные варианты обнаружения, например, Bob двух кубитов $|0\rangle$ и $|1\rangle$ равновероятны, то вероятность получить каждую из пар будет равна $\frac{1}{4}$, а полная вероятность выигрыша через вероятности выигрыша каждой пары

$$p = \frac{1}{4}p_{00} + \frac{1}{4}p_{10} + \frac{1}{4}p_{10} + \frac{1}{4}p_{11} \quad (18.35)$$

Выразим эти вероятности через выражения для средних (18.31–18.34) и подставим в (18.35). В первое слагаемое из (18.31) будет подставляться $p_{00} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\langle AB \rangle$, во второе и третье аналогично. А в четвёртом случае из (18.34) $p_{11} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\langle A'B' \rangle$. Тогда получится

$$\frac{1}{4} \left(2 + \frac{1}{2} \{ \langle AB \rangle + \langle AB' \rangle + \langle AB' \rangle + \langle A'B' \rangle \} \right) \quad (18.36)$$

Мы сейчас постарались прийти к тем же конструкциям, какие были в неравенстве Белла в той формулировке, которую мы разбирали и доказывали. В классическом случае, для локального реализма, а значит и для классических битов, которые точно подчиняются его принципам, конструкция в фигурных скобках в (18.36) не превышала числа 2. Соответственно, всё выражение (18.36) не превышало $\frac{3}{4}$, 75%. То есть самый прямолинейный алгоритм с классическими битами, который мы предложили, дающий 75% выигрышей, достигает максимально возможного процента выигрышей.

Но в квантовом случае мы доказывали для конструкции в фигурных скобках в (18.36), что существует такая реализация, то есть можно так подобрать начальное состояние Charlie, что она будет по модулю достигать максимального значения $2\sqrt{2}$.

Таким образом, классическая вероятность выигрыша

$$p_{\text{кл}} \leq \frac{3}{4}, \quad (18.37)$$

а квантовая

$$p_{\text{кв}} \leq \frac{1}{4} (2 + \sqrt{2}) \quad (18.38)$$

$\sqrt{2} \approx 1,4$, так что значение (18.38) больше, чем 0,8.

То есть мы достигаем большего процента успехов, если пользуемся квантовым алгоритмом. Charlie, Alice и Bob могут так договориться о выборе исходного запутанного состояния, которое делит Charlie, что, действуя по этому алгоритму, Alice и Bob достигают успеха более чем в 75% случаев.

Это интересный пример, который замечателен практическим использованием неравенств Белла и демонстрацией того, что для такой конкретной задачи можно придумать квантовый алгоритм, который будет эффективнее самого эффективного из всех классических. Правда, для этой системы он, как мы поняли, ещё и самый эффективный из всех квантовых.



ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ