

С. Гаврилов

Разбираемся с квантовой механикой

О квантовой механике те, кто не изучал ее специально, имеют странное представление. От сжатого вузовского курса в памяти остаются: корпускулярно-волновой дуализм, волны де Бройля, соотношение неопределенностей, в лучшем случае – еще и волновая функция, которая интерпретируется в вероятностном смысле.

Обладая столь «богатыми» сведениями, можно, конечно, считать, что теория в основном известна. Однако это заблуждение.

Пособий по квантовой механике немало, в том числе популярных, но даже эти последние не вызывают у читателей энтузиазма: сложная тема, требующая сложной математики. Автор этих строк попытался преподнести ее предельно доступно. Пусть читателя не возмущают примитивные модели, аналогии на грани допустимого: за строгим изложением он может ведь обратиться к солидной литературе.

Тем не менее, предполагается, что линейная теория усвоена!

Сюжеты, посвященные необычному поведению квантовых объектов, парадоксальности законов микромира, опрокидывающих здравый смысл, набили оскомину, давно став общим местом. Всякие «двухщелевые опыты» мы опустим, считая читателя достаточно эрудированным.

1. ТРЕНИНГ ПО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫМ УРАВНЕНИЯМ	3
Многомерное преобразование Фурье	3
Импульсное представление	3
Многомерная дельта-функция	5
Сводка полезных формул	6
Решаем обыкновенное дифференциальное уравнение	6
Еще про осциллятор	7
Решаем уравнение в частных производных	8
Уравнение стоячей волны	9
2. НЕПРОСТЫЕ ВЫВОДЫ ИЗ ПРОСТОГО ОПЫТА	11
Поляризованный свет	11
Школьное объяснение	12
Не школьное объяснение	12
Переходим к фотонам	14
Случайности в природе	15
Трансформация состояний	15
Подводим итоги	16
Квантовое vs классическое	17
Квантовый таракан	17
3. КВАНТОВАЯ МОНЕТА	19
Чем оперирует квантовая механика	19
Базисные состояния	19
Вероятности исходов	20
Среднее значение	21
Назад к монете	21
Максимальная неопределенность	22
Кубит	23
Спин	24
Вектор спина и квантовый кот	24

Компонента вектора спина	25
Появляются матрицы Паули	26
Необычное вращение	27

4. КВАНТОВАНИЕ 28

Волновая функция	28
Базисные векторы	29
Оператор координаты.....	29
Оператор импульса.....	30
Принцип неопределенности	31
Оператор энергии и унитарная эволюция	33
Проблема размерности	33
Стационарное уравнение Шредингера.....	34
Решаем уравнение	34
Возвращаемся к принципу неопределенности.....	35
Эволюция волновой функции	36
Фазовый множитель	37
Законы сохранения	37

5. НАБЛЮДАЕМЫЕ КОММУТИРУЮЩИЕ И НЕ КОММУТИРУЮЩИЕ 39

Координата и импульс.....	39
Функции наблюдаемых	39
Тензорное произведение	40
Операторы над сепарабельными состояниями	41
Коммутирование операторов	42
Важное пояснение	42
Квантовая запутанность	43

1. Тренинг по дифференциальным уравнениям

Объявив, что линейная теория усвоена, я лукавил. Глава, посвященная линейным дифференциальным уравнениям и сопутствующим вопросам, послужит еще одной необходимой математической прелюдией к квантовой механике. Впрочем, имея и несомненное самостоятельное значение.

Почему именно линейные? Их проще решать – с багажом линейной теории. К тому же квантовая механика линейна!

Будем в основном заниматься уравнениями с частными производными – «уравнениями математической физики». Тема считается сложной, но мы попробуем!

Многомерное преобразование Фурье

Допустим, что у нас функция двух переменных. Так как t ассоциируется со временем, то (чтобы до поры не смущало «двумерное время») будем обозначать функцию по-школьному: $f(x, y)$. Пусть это будут, например, пространственные координаты: $f(x, y)$ – поле, заданное на плоскости.

Воспользуемся формулой преобразования Фурье для аргумента x :

$$f(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(x) e^{-i\omega x} dx. \quad (1.1)$$

Разумеется, размерности x и ω согласованы – так, что показатель ωx безразмерен: считаем ω «пространственной частотой».

В (1.1) кое-что скрыто, ведь у нас функция двух переменных! Полная запись следующая:

$$f(\omega, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(x, y) e^{-i\omega x} dx.$$

Осталась незадействованной переменная y , которую временно считали параметром. Можно выполнить преобразование Фурье повторно – теперь уже как функции от y :

$$f(\omega, \nu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(\omega, y) e^{-i\nu y} dy.$$

Перед нами частотное представление исходной функции $f(x, y)$, но «пространство частот» теперь тоже двумерно (ω, ν) !

Операции можно записать одним махом:

$$f(\omega, \nu) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^2} \iint f(x, y) e^{-i\omega x} e^{-i\nu y} dx dy = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^2} \iint f(x, y) e^{-i(\omega x + \nu y)} dx dy. \quad (1.2)$$

Ликвидировать корень? Не станем торопиться: нам предстоит подойти к обобщению на функции многих переменных, обязательно двух.

Импульсное представление

Все-таки разберемся, что такое «пространственная частота». Величина ωt являлась фазой; как вы помните, в пространстве фаза это $\frac{2\pi}{\lambda} x = kx$. Параметр k – волновое число, оно-то и есть «пространственная частота»! Для полной ясности выпишем прямое и обратное преобразования Фурье для одномерного пространства:

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(x) e^{-ikx} dx, \quad f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(k) e^{ikx} dk.$$

Присмотревшись теперь к (1.2), обнаруживаем в показателе экспоненты скалярное произведение векторов: $\mathbf{r}(x, y)$ (радиус-вектор точки) и $\mathbf{k}(k_x, k_y)$ (волновой вектор). В итоге записываем фурье-преобразование для поля в n -мерном пространстве как интеграл по всему пространству:

$$\bar{f} = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n} \int f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} dV. \quad (1.3)$$

Верхняя черта в качестве обозначения фурье-образа не является общепринятой символикой; иногда применяют «шляпку», как для операторов. Тем не менее, остановимся на таком варианте: ничего острее автор не придумал.

Подытожим: первоначально имели поле в геометрическом пространстве $f(\mathbf{r}) = f(x, y, \dots)$ – так называемое *координатное представление*. Формула (1.3) дает представление того же поля в базисе волновых векторов (волновое). А из физики известно, что волновой вектор соответствует импульсу ($\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$), поэтому образ координатного представления называют *импульсным представлением*.

Хорошая новость: мы научились находить фурье-преобразование поля. Аналогично обратное преобразование:

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n} \int \bar{f} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k}. \quad (1.4)$$

Задача. Найти фурье-образ дивергенции n -мерного векторного поля \mathbf{A} : $\overline{\text{div } \mathbf{A}}$.

Вспомним определение дивергенции:

$$\text{div } \mathbf{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \dots$$

Возьмем для начала одно первое слагаемое. Запишем преобразование Фурье по x :

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{\partial A_x}{\partial x} \exp(-ik_x x) dx. \text{ Как и раньше, «exp» применено ради удобочитаемости.}$$

Вспомнив правило для образа производной, получаем:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{\partial A_x}{\partial x} \exp(-ik_x x) dx = \frac{ik_x}{\sqrt{2\pi}} \int A_x \exp(-ik_x x) dx.$$

Теперь по y :

$$\frac{ik_x}{2\pi} \int \left[\int A_x \exp(-ik_x x) dx \right] \exp(-ik_y y) dy = \frac{ik_x}{2\pi} \iint A_x \exp[-i(k_x x + k_y y)] dx dy.$$

И так далее – по остальным координатам, в конце концов получим:

$$\frac{ik_x}{(\sqrt{2\pi})^n} \int A_x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} dV.$$

Сравнивая с (1.3), видим, что это равно просто $ik_x \bar{A}_x$. Научились преобразовывать частные производные!

Пока расправились лишь с первым слагаемым. Аналогичное выражение будет для других. В итоге:

$$\overline{\text{div } \mathbf{A}} = i \sum_{j=1}^n k_j \bar{A}_j.$$

Сумма – не что иное, как скалярное произведение векторов \mathbf{k} и $\overline{\mathbf{A}}$. Так что окончательный (и красивый) результат:

$$\overline{\operatorname{div} \mathbf{A}} = i\mathbf{k}\overline{\mathbf{A}}.$$

Образ дивергенции поля – это скалярное произведение образа поля с волновым вектором в роли переменной, умноженное на мнимую единицу.

Попробуем аналогично распорядиться градиентом скалярного поля

$$\operatorname{grad} \varphi = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \dots \right).$$

Преобразуем, например, первую компоненту: получится $ik_x \overline{\varphi}$.

Итоговый результат очевиден:

$$\overline{\operatorname{grad} \varphi} = i\mathbf{k}\overline{\varphi}.$$

Замечательно, что «как бы умножение» на символический вектор ∇ «набла» превращается в импульсном представлении в реальное умножение на волновой вектор (с мнимой единицей): $\overline{\nabla} = i\mathbf{k}$. Тогда образ оператора Лапласа будет (вспоминая правило для повторного дифференцирования): $\overline{\Delta} = \overline{\nabla^2} = (i\mathbf{k})^2 = -k^2 = -k_x^2 - k_y^2 - \dots$.

Фактически мы продолжили старую тему представления операторов уже на многомерные функции, то есть, поля.

Многомерная дельта-функция

В двумерном пространстве рассмотрим функцию:

$$\delta^2(x, y) = \delta(x)\delta(y).$$

Скомбинируем ее с произвольной функцией двух переменных $f(x, y)$:

$$\iint f(x, y)\delta^2(x, y)dx dy. \text{ Запишем так:}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(y) \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(x, y)\delta(x)dx \right] dy.$$

Интеграл в квадратных скобках равен $f(0, y)$ по свойству дельта-функции. Легко сообразить, что внешний интеграл даст в итоге: $f(0, 0)$.

Итак, n -мерная дельта-функция обладает свойством, аналогичным свойству обыкновенной, «одномерной»:

$$\int f(x)\delta(x - x_0)dx = f(x_0) - \text{было известно;}$$

$$\int f(\mathbf{r})\delta^n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)dV = f(x_0, y_0, \dots) = f(\mathbf{r}_0) - \text{теперь узнали.}$$

Интеграл, как всегда, берется по всему пространству.

Осталось получить фурье-образ многомерной δ -функции. Для одномерной (в точке x_0) он известен:

$$\overline{\delta(x - x_0)} = \frac{\exp(-ik_x x_0)}{\sqrt{2\pi}}. \quad (1.5)$$

Элементарно получить, например, для двумерной:

$$\overline{\delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)} = \overline{\delta(x - x_0)\delta(y - y_0)} = \frac{\exp(-ik_x x_0)}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{\exp(-ik_y y_0)}{\sqrt{2\pi}}.$$

Тогда общая формула: $\overline{\delta^n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)} = \frac{\exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_0)}{(\sqrt{2\pi})^n}$. (1.6)

Образ дельта-функции в начале координат ($\mathbf{r}_0 = 0$) – просто константа:

$$\overline{\delta^n(\mathbf{r})} = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n}.$$

Сводка полезных формул

Таблица 1, подытоживая разобранные выше, повторяет таблицу 3 предыдущего раздела. Только теперь она связывает функции и их образы, заданные соответственно в координатном и импульсном представлении. Попросту произведены замены: $t \rightarrow x$, $\omega \rightarrow k$. Пустяк, но позволяет не проделывать это каждый раз в уме.

Таблица 1

Функция	Фурье-образ
$\delta(x - x_0)$	$\frac{\exp(-ikx_0)}{\sqrt{2\pi}}$
$\frac{\exp(ik_0x)}{\sqrt{2\pi}}$	$\delta(k - k_0)$
$\sqrt{2\pi}\delta(x)$	1
1	$\sqrt{2\pi}\delta(k)$
$-ixf$	$\frac{d\bar{f}}{dk}$
$\frac{df}{dx}$	$ik\bar{f}$

Решаем обыкновенное дифференциальное уравнение

Преобразования Фурье превращают дифференциальные операторы в алгебраические выражения, чем стоит воспользоваться. Возьмем в качестве удобного примера линейное уравнение гармонического осциллятора, встречающееся в физических задачах:

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \Omega^2x(t) = 0. \quad (1.7)$$

Здесь Ω – некоторый вещественный параметр. Подобным уравнением описываются колебания математического маятника (при малых отклонениях), груза на пружинке, оно же справедливо и для электрических колебаний в колебательном контуре. Короче, смысл искомой физической величины $x(t)$ роли не играет.

Уравнение линейно, так как оператор $\left(\frac{d^2}{dt^2} + \Omega^2\right)$ линеен.

Фурье-образ (переход к частотному представлению) получаем элементарно:

$$-\omega^2\bar{x} + \Omega^2\bar{x} = 0, \quad (\Omega^2 - \omega^2)\bar{x} = 0.$$

Нулевое решение нас явно не интересует. Тогда видим, что $\bar{x} \neq 0$ возможно только в точках $\omega = \pm\Omega$ частотной области, где $\Omega^2 - \omega^2 = 0$. В этих точках \bar{x} должен быть дельта-функцией: лишь при таком условии выполняется равенство Парсеваля (с δ -функциями – частотный спектр, отличающийся от нуля лишь в дискретных точках, может нести ненулевую энергию). Следовательно, решение вот:

$$\bar{x} = a\delta(\omega + \Omega) + b\delta(\omega - \Omega), \text{ где } a \text{ и } b \text{ произвольны.}$$

Результат предстоит вернуть к временному представлению. По таблице 3 из предыдущей части – обратным преобразованием Фурье от $\delta(\omega - \Omega)$ является $x(t) = \frac{e^{i\Omega t}}{\sqrt{2\pi}}$.

Значит, решение во временном представлении:

$$x(t) = ae^{-i\Omega t} + be^{i\Omega t}.$$

Множитель $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ опущен, поскольку a, b и без того любые числа. Между прочим,

ничто не мешает им быть комплексными: $a = a_1 + ia_2, b = b_1 + ib_2$!

Результат желательно адаптировать к физическим соображениям: величина $x(t)$ действительна, и потому все решения с ненулевой мнимой частью отбрасываем. Что эквивалентно в линейном случае просто отбрасыванию самой мнимой части. Перейдем к тригонометрическому представлению комплексных экспонент:

$$x(t) = (a_1 + ia_2)(\cos \Omega t - i \sin \Omega t) + (b_1 + ib_2)(\cos \Omega t + i \sin \Omega t).$$

Избавляемся от мнимых слагаемых:

$$x(t) = (a_1 + b_1)\cos \Omega t + (a_2 - b_2)\sin \Omega t, \text{ или, меняя обозначения:}$$

$$x(t) = A\cos \Omega t + B\sin \Omega t.$$

Решение содержит два произвольных параметра, как и положено в случае дифференциального уравнения второго порядка.

Удобно записать то же самое в эквивалентном виде:

$$x(t) = x_m \sin(\Omega t + \varphi),$$

– через амплитуду x_m и начальную фазу φ . Оба параметра опять же произвольны.

Еще про осциллятор

Модель гармонического осциллятора занимает видное место в квантовой механике, посему уделим ей еще немного внимания. Откуда, собственно говоря, взялось дифференциальное уравнение (1.7)?

Если имеем механический осциллятор (грузик на пружинке), то перед нами просто запись второго закона Ньютона:

$$ma = -kx.$$

Справа стоит «возвращающая сила», пропорциональная отклонению x от нулевой точки равновесия. Сила противоположна направлению отклонения, отсюда и минус. Обозначая:

$$\Omega^2 = \frac{k}{m},$$

получаем знакомое:

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \Omega^2 x(t) = 0.$$

Но сделаем вот что – домножим уравнение на dx :

$$\frac{d^2 x}{dt^2} dx + \Omega^2 x dx = 0.$$

Замечаем, что $\frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{dv}{dt}$. И тогда первый член будет: $\frac{dv}{dt} dx = \frac{dx}{dt} dv = v dv$ – через скорость v . В результате получили:

$$v dv + \Omega^2 x dx = 0.$$

Интегрируем (берем неопределенный интеграл), а заодно возвращаем множитель m :

$$\frac{mv^2}{2} + \Omega^2 m \frac{x^2}{2} = \text{const}.$$

Константу легко опознать: энергия! В самом деле, первое слагаемое являет собой кинетическую энергию. Второе – потенциальную, что видно после выполнения подстановок:

$\Omega^2 m \frac{x^2}{2} = \frac{k}{m} m \frac{x^2}{2} = \frac{kx^2}{2}$ – классическая энергия сжатой пружины, жесткость которой обозначена k .

В результате имеем попросту закон сохранения энергии:

$$\frac{mv^2}{2} + \Omega^2 m \frac{x^2}{2} = \mathcal{E}. \quad (1.7a)$$

Решаем уравнение в частных производных

Возьмем задачку посложнее – знакомое волновое уравнение для некоторого поля E . Для простоты пусть будет одномерное:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0. \quad (1.8)$$

Подразумевается функция двух переменных $E(x, t)$, отсюда частные производные. Уравнение относится к классу *гиперболических* – известие, не несущее особенно важной информации.

Преобразование Фурье по t дает:

$$\frac{d^2 \bar{E}}{dx^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \bar{E} = 0. \quad (1.8a)$$

Уравнение в частных производных превратилось в обыкновенное, так что символика частной производной убрана. Сопоставим с (1.7): то же самое, но на месте Ω стоит $\frac{\omega}{c}$. Записываем готовые решения с произвольными множителями:

$$\bar{E}(x) = ae^{-ix\omega/c} + be^{ix\omega/c}.$$

В общем-то ясно, что слагаемые соответствуют двум волнам, распространяющимся вдоль оси X в противоположных направлениях. Для простоты оставим лишь одну:

$$\bar{E}(x) = ae^{-ix\omega/c}.$$

Получено решение \bar{E} в частотном представлении. Осталось перейти обратно к временному. Смотрим все ту же таблицу 3: фурье-образ $e^{-i\omega\tau}$ соответствует $\sqrt{2\pi}\delta(t-\tau)$. У нас на месте τ стоит $\frac{x}{c}$. Следовательно, получаем:

$$E(x, t) = a\delta(t - x/c). \text{ (Множитель } \sqrt{2\pi} \text{ снова убираем, так как } a \text{ произвольно).}$$

Или, несколько по-другому: $E(x, t) = a\delta(ct - x)$. Кстати, ровно то же самое получили бы, начав с преобразования Фурье по x .

Решением является дельта-функция, бегущая вдоль оси X со скоростью c . Второе, отброшенное слагаемое – функция, бегущая навстречу. Коэффициент a действителен, чтобы действительным получилось и $E(x, t)$.

Странное решение, да и вообще δ -функция как-то нефизична... Не беда, сейчас наведем порядок. Сего ради заметим, что исходное уравнение нечувствительно к постоянному смещению, скажем, по t . Функция вида $E(x, t) = a\delta(ct + c\tau - x)$ также будет решением уравнения при любом τ . А следовательно, и сумма подобных функций:

$$E = \sum a_k \delta(ct + c\tau_k - x).$$

А точнее – интеграл, где на место набора коэффициентов a_k встанет функция временного сдвига τ :

$$E = \int a(\tau) \delta(ct + c\tau - x) d\tau.$$

Интеграл равен просто $a(ct - x)$ по свойству дельта-функции!

Вот это и есть полное решение: произвольная функция $a(\tau)$ (ранее мы назвали ее *профилем волны*), летящая вдоль оси x со скоростью c . И снова: в точности то же получили бы, рассмотрев смещение по x ; координаты x и ct равноправны (что, конечно, не является новостью).

Уравнение стоячей волны

Со *стоячей волной* имеют дело в случае струны, закрепленной на концах, или объемного резонатора. Такая волна эквивалентна обычной, «бегущей» волне, только отражающейся от концов отрезка. Следовательно, берем опять волновое уравнение (1.8) с его полным решением:

$$\bar{E}(x) = ae^{-ix\omega/c} + be^{ix\omega/c}.$$

Но здесь, во-первых, принципиально важны и прямая, и обратная волны. Во-вторых, они имеют одинаковую амплитуду:

$$\bar{E}(x) = a(e^{-ix\omega/c} + e^{ix\omega/c}).$$

Пользуясь стандартной формулой: $\frac{e^{-i\varphi} + e^{i\varphi}}{2} = \cos \varphi$, получаем:

$$\bar{E}(x) = a \cos(ax/c).$$

Если интересует картина распределения вдоль оси X в каждый фиксированный момент времени, больше можно ничего не делать (не возвращать во временное представление). Осталось применить граничные условия, а именно: на концах отрезка длины L значения величины E равны нулю. Такое будет, если аргумент косинуса состоит из целого числа полупериодов:

$$\frac{\omega}{c}L = n\pi, \text{ где } n = 1, 2, 3, \dots$$

Вспоминая, что $\frac{2\pi c}{\omega} = \lambda$ (длина волны), делаем вывод: решениями являются отрезки косинусоиды на L с длиной волны: $\frac{\lambda}{2} = \left\{ L, \frac{L}{2}, \frac{L}{3}, \frac{L}{4}, \dots \right\}$, и так далее. Они выражаются:

$$E(x) = a \cos(n\pi x / L).$$

2. Непростые выводы из простого опыта

Ниже рассмотрим опыт, из которого прямо выведем принципы квантовой механики. Нам не понадобится коллайдер, камера Вильсона, другие сложные приборы. Опыт легко проделать дома, а многие и делали.

Потребуется источник поляризованного света, фотоэлемент для измерения интенсивности света, поляризационные фильтры на линии между источником и приемником. Подобные фильтры продаются в фотомагазинах.

Поляризованный свет

Установим на пути поляризованного света второй поляризатор (ПФ), направление поляризации фильтра зафиксируем вертикальным – пусть это будет ось X . Луч распространяется прямо на нас, и попадает в фотоэлемент. Измерительный прибор-анализатор (ПФ плюс фотоприемник) готов – смотрите рисунок.

Будет интересовать отношение выходной интенсивности к входной – коэффициент пропускания света. Который является, без сомнения, характеристикой поляризации исходного света, падающего на анализатор.

Опыт 1. Плоскость поляризации источника света установим поначалу тоже вертикальной. Свет на входе ПФ сейчас «приготовлен» так, что его поляризация соответствует оси X .

Фотоприемник показывает интенсивность, которую мы примем за единичную, коэффициент прохождения $\lambda = 1$.

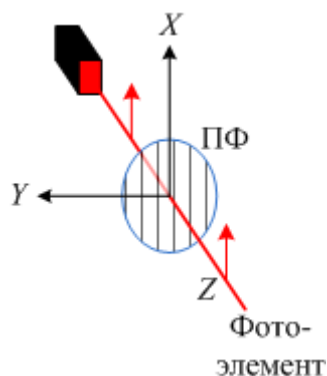
Перед фотоэлементом можем поставить еще один фильтр ПФ₂, и с его помощью убедиться, что свет так и остался вертикально поляризованным. Сколько угодно фильтров с вертикальной поляризацией (идеальных) никакого влияния не окажут.

Опыт 2. Повернем источник света в плоскости XY на угол $\varphi = 90^\circ$. Плоскость поляризации «приготовленного» света стала горизонтальной (вдоль оси Y).

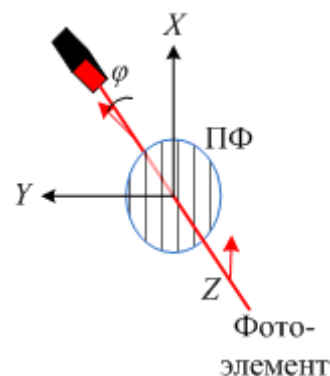
На выходе анализатора ноль: $\lambda = 0$.

Опыт 3. Установим для поляризации исходного света произвольный угол $0 < \varphi < 90^\circ$, как на правом рисунке.

Фотоэлемент показывает промежуточное значение интенсивности, меньшее единицы. Точнее, он покажет $\lambda = \cos^2 \varphi$: это называется *закон Малюса*.



Вертикально поляризованный свет прошел через ПФ без ослабления



Направление поляризации повернуто на φ : проходящий свет ослаблен, и вдобавок стал вертикально поляризованным

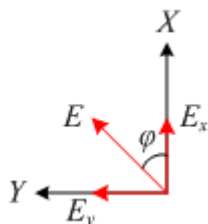
Опыт 4. В конфигурации 3-го опыта опять поставим перед фотоэлементом контрольный фильтр ПФ₂. Поворачивая его, обнаруживаем, что максимум интенсивности света соответствует вертикальной поляризации для ПФ₂. Оказывается, свет после прибора (после прохождения ПФ) изменил поляризацию: плоскость поляризации, имевшая ненулевой угол φ к оси X , теперь соответствует $\varphi = 0^\circ$!

Опыты закончены, установка пока не потребуется. Будем разбираться и делать выводы.

Школьное объяснение

Явления связаны с поляризацией света как поперечной электромагнитной волны; аналогичные можно наблюдать и для радиоволн. Проанализируем опыты с волновых позиций. Условимся считать плоскостью поляризации ту, в которой лежит вектор амплитуды электрического поля E волны.

Дабы разобраться, что происходит, когда мы устанавливаем поляризацию света под углом φ , нужно вектор E представить как сумму (суперпозицию) двух его проекций: E_x и E_y – см. рисунок. Принимая амплитуду единичной ($\|E\| = 1$), поскольку она к делу не относится, можно записать через орты: $E_x = e_x \cos \varphi$, $E_y = e_y \sin \varphi$. Здесь e_x и e_y – единичные векторы принятого базиса.



Через ПФ проходит проекция вектора E на ось X

Поляризационный фильтр ПФ пропускает только вертикальную составляющую E_x , вот и все объяснение. Естественно, что интенсивность на выходе (квадрат амплитуды) оказывается равной $I = E_x^2 = \cos^2 \varphi$, а поляризация строго вертикальна.

Школьный сюжет, не правда ли? Но сейчас повернем его несколько неожиданной стороной. Тут-то и пригодятся основы линейной теории.

Не школьное объяснение

Вектор E падающей на анализатор волны назовем *вектором состояния*. Будем говорить, что волна *приготовлена* (источником поляризованного света) в состоянии E . Векторы состояния – элементы *пространства состояний*, в данном случае оно попросту соответствует плоскости XU .

Чтобы понять происходящее, надо расщепить вектор состояния на проекции по выбранному базису. Что опишем действием операторов проектирования (проекторов):

$$E = E_x + E_y = \hat{P}_x E + \hat{P}_y E.$$

Судьба каждой проекции разная. Одна свободно проходит сквозь вертикальный поляризатор ($\lambda = 1$), другая задерживается ($\lambda = 0$).

На выходе ПФ вектор состояния изменяется: вместо E обнаруживаем E_x – проекцию на базисный орт. Опишем это действием оператора проектирования (проектора):

$$E_x = \hat{P}_x E.$$

Известно: линейная комбинация проекторов составляет линейный оператор, собственные значения которого суть коэффициенты при проекторах:

$$\hat{A} = \sum \lambda_k \hat{P}_k$$

Таким образом, измерение коэффициента пропускания (проекция вектора поляризации на X) связано с действием оператора. В некотором смысле можно считать, что физическая величина и есть оператор!

В данном случае его собственными векторами являются орты e_x и e_y , а собственных значений два: $\lambda_1 = 1$ (соответствует оси X) и $\lambda_2 = 0$ (соответствует оси Y).

Значит, X и Y – не просто оси, как-то выбранные. Это система координат, которую несет внутри себя линейный оператор наших измерений. Выше мы привязали оси координат к осям поляризации ПФ интуитивно. Теперь же будем знать, как правильно назначать координатный базис в пространстве состояний.

Пройдемся по нашим опытам.

Опыт 1. Вектор состояния волны лежит в собственном подпространстве оператора, соответствующем собственному значению $\lambda_1 = 1$ (то есть, на оси X). Будем говорить, что волна находится в *базисном состоянии* (ее вектор – вдоль базисного орта e_x). Оператор действует просто как умножение на собственное значение λ_1 (на единицу), на выходе тот же вектор, что был на входе, результат опыта – собственное значение $\lambda_1 = 1$.

Опыт 2. Вектор состояния волны лежит в собственном подпространстве проектора, соответствующем собственному значению $\lambda_2 = 0$ (на оси Y). Волна находится во втором базисном состоянии (теперь вдоль базисного орта e_y). Оператор снова действует как умножение на собственное значение λ_2 (на ноль), на выходе тот же вектор, что был на входе, умноженный на ноль. Результат опыта – второе собственное значение $\lambda_2 = 0$.

Опыт 3. Волна приготовлена в *суперпозиционном состоянии* – вектор состояния не совпадает ни с одним из базисных.

Вектор $|E\rangle$ имеет компоненты разложения по ортам, равные, как положено: $\langle e_x | E \rangle = \|E\| \cos \varphi = \cos \varphi$, $\langle e_y | E \rangle = \|E\| \sin \varphi = \sin \varphi$. Окончательно переходим на дираковскую нотацию.

Проекции вектора E :

$$E_x = \langle e_x | E \rangle \langle e_x | - \text{ по оси } X;$$

$$E_y = \langle e_y | E \rangle \langle e_y | - \text{ по оси } Y.$$

Орты являются собственными векторами. Поэтому оператор просто умножает каждую составляющую на соответствующее собственное значение, и на выходе оператора имеем вектор состояния, равный:

$$\lambda_1 \langle e_x | E \rangle \langle e_x | + \lambda_2 \langle e_y | E \rangle \langle e_y |.$$

В нашем случае $\lambda_2 = 0$, $\lambda_1 = 1$, $\langle e_x | E \rangle = \cos \varphi$, так что вектор равен $e_x \cos \varphi$. Его квадрат модуля (интенсивность) равна $\langle e_x | E \rangle^2 = \langle E | e_x \rangle \langle e_x | E \rangle = \cos^2 \varphi$.

Опыт 4. Третий опыт изменил состояние волны, она перешла в базисное состояние с вертикальной поляризацией. Последующие поляризаторы, тоже вертикальные, никакого влияния не окажут: это будет проекция проекции.

Итак, в общем случае получаем:

1) на входе вектор $|E\rangle$;

2) на выходе вектор, преобразованный проекционным оператором: $|E_x\rangle = \hat{P}|E\rangle$;

3) квадрат длины «выходного» вектора и есть измеряемая величина:

$$\|E_x\|^2 = \langle E | \hat{P} \hat{P} | E \rangle = \langle E | \hat{P} | E \rangle.$$

Заметьте последнюю формулу: мы повстречаемся с ней в квантовой механике!

Переходим к фотонам

Кажется, рассмотренные опыты не имеют отношения к квантовой механике... Сейчас увидим, что мнение ошибочно! Модернизируем установку: интенсивность света источника сделаем предельно малой, а вместо фотоэлемента возьмем фотоэлектронный умножитель (ФЭУ). Включив источник поляризованного света, услышим щелчки: это фиксируются кванты света – фотоны. Повторим наши опыты, из классических сделавшиеся теперь квантовыми.

Опыт 1. Плоскость поляризации источника вертикальна. Фотоны на входе ПФ (до опыта) приготовлены так, что их поляризация соответствует оси X . Что такое поляризация фотонов – нам сейчас неважно, главное, что она существенна в опыте.

ФЭУ показывает интенсивность (среднее количество щелчков в единицу времени), которую примем за единичную.

После ПФ перед ФЭУ можем поставить еще один вертикально поляризующий фильтр ПФ₂, и с его помощью убедиться, что интенсивность щелчков не изменилась. Все 100% фотонов, приготовленных в вертикальной плоскости, проходят через вертикальный поляризатор.

Опыт 2. Повернули источник света в плоскости XY на угол $\varphi = 90^\circ$. Плоскость поляризации приготовленных фотонов стала горизонтальной (вдоль оси Y).

На выходе анализатора молчание (измеренный параметр – ноль).

Опыт 3. Установили для поляризации исходных фотонов произвольный угол $0 < \varphi < 90^\circ$.

ФЭУ фиксирует промежуточное значение частоты щелчков $\cos^2 \varphi$.

Опыт 4. В конфигурации 3-го опыта снова поставим после ПФ перед ФЭУ добавочный фильтр ПФ₂. Поворачивая его, обнаруживаем, что фотоны после измерения (после прохождения ПФ) изменили поляризацию: плоскость поляризации, имевшая ненулевой угол φ к оси X , теперь соответствует $\varphi = 0^\circ$!

Кажется, повторены знакомые опыты... Но, погодите, с третьим опытом что-то не так. Получается, что фотоны, падающие на ПФ, делятся на два сорта: те, которые пройдут через поляризатор, и те, что застрянут... Странно!

Быть может, исходные, приготовленные фотоны в самом деле как-то неравноправны? Имеют *скрытый параметр*, по которому и сортируются фильтром. Глупость: не может же такой параметр зависеть от ориентации анализатора. Впрочем, поместим на их пу-

ти (перед ПФ) поляризатор с углом φ , соответствующим углу излучателя. Разумеется, ничего не изменится: еще раз убедились, что поляризационное состояние всех исходных фотонов одно и то же.

Проявился чисто квантовый феномен. Будем его интерпретировать, и тут-то нам помогут наработки, сделанные ранее. Но сначала небольшое отступление.

Случайности в природе

В квантовой физике имеют дело со случайными исходами опытов. То же, например, и в статистической физике. Но есть существенное отличие.

Бросаем монету. Что можно сказать о ее падении той или иной стороной? Это случайный процесс. Можно предсказать вероятность каждого исхода (к примеру, $1/2$).

Можно вообразить, что если точно проконтролировать параметры броска и другие условия опыта, то возможно рассчитать, как упадет монета! Что, конечно, очень сложно, да, и, вдобавок, не особенно нужно... Тем не менее, процесс в его основе хочется считать детерминированным.

В микромире не так. Пройдет или нет очередной фотон через поляризатор – нельзя узнать совсем не потому, что это требует сложных измерений и расчетов. И не потому, что нам неизвестен какой-то внутренний механизм частицы, на нее влияющий.

Конечно, механизм предполагаемых скрытых параметров можно вообразить весьма сложным, и от проблемы не отделаться парой слов. Соответственно, решение вопроса будет непростым. Разработаны определенные опытные критерии (*теорема Белла*), позволяющие строго убедиться в отсутствии скрытых параметров; так и оказалось!

Физика пришла к выводу, что именно случайность лежит в фундаменте материи. А вовсе не детерминированность. Последняя для привычного нам мира представляется естественной: кажется, иначе не должно и быть! Однако в каком-то смысле она – иллюзия. Как бы результат усреднения. Статистика, закон больших чисел. К примеру, в наших опытах вероятность прохождения фотона вполне определенная, равная $\cos^2 \varphi$. Макроскопически она и отвечает интенсивности света.

Трансформация состояний

Когда мы занимаемся единичным фотоном, «коэффициент прохождения» имеет только два значения: 1 (прошел) или 0 (не прошел). Для фотона понятия электрического и магнитного поля не имеют смысла, тем не менее, сохраним для него некоторую «амплитуду» поляризационного состояния, взамен E . Будем говорить, что фотоны *приготовлены* (источником поляризованного света) в состоянии $|\psi\rangle$. И вернемся к знакомым опытам.

Опыт 1. Вектор состояния $|\psi\rangle$ лежит в собственном подпространстве оператора, соответствующем собственному значению $\lambda_1 = 1$ (направление поляризации вдоль оси X). Фотон находится в *базисном состоянии* (вдоль базисного орта e_x). Оператор действует просто как умножение на собственное значение λ_1 (на единицу). Пройдя поляризатор, фотон имеет то же состояние $|\psi\rangle$, что и на входе, результат опыта – собственное значение $\lambda_1 = 1$ (однозначно прошел).

Опыт 2. Вектор состояния $|\psi\rangle$ лежит в собственном подпространстве проектора, соответствующем собственному значению $\lambda_2 = 0$ (на оси Y). Фотон находится во втором базисном состоянии (теперь вдоль базисного орта e_y). Оператор снова действует как

умножение на собственное значение λ_2 (на ноль), на выходе имеем тот же вектор $|\psi\rangle$, что был на входе, только умноженный на ноль. Результат опыта – второе собственное значение $\lambda_2 = 0$ (однозначно не прошел).

Квантовый объект, находящийся в одном из базисных состояний, дает в результате измерения каждый раз одно и то же значение измеряемой величины, сколько бы раз ни ставить опыт. И значение это совпадает с собственным значением, соответствующим данному собственному вектору. Здесь нет отличия с классикой. А вот сейчас оно появится.

Опыт 3. Фотон приготовлен в *суперпозиционном состоянии* – вектор состояния до опыта $|\psi\rangle$ не совпадает ни с одним из базисных. Однако его можно представить *суперпозицией* базисных (суммой с некоторыми коэффициентами). Теперь результаты измерений не повторяются: это также различные собственные значения оператора (1 или 0), но они выскакивают случайно, с некоторыми вероятностями. Зависящими от тех самых коэффициентов разложения, то есть, компонент нашего суперпозиционного вектора!

Опыт 4. И, наконец, констатируем, что фотоны после измерения изменяют состояние. Теперь вектор состояния на выходе не совпадает с исходным: каждый раз это собственный вектор, соответствующий появившемуся в опыте собственному значению.

Подводим итоги

Из всего, что было выше изложено, выделим, повторим и упорядочим главное.

1. Состояние квантовой системы отображается вектором $|\psi\rangle$ абстрактного гильбертова (в частном случае евклидова) пространства.

Поскольку линейная комбинация векторов – тоже вектор, значит, любая суперпозиция состояний – тоже допустимое состояние (*принцип суперпозиции*).

2. Измерение какой-либо физической величины λ (*наблюдаемой*) отображается линейным эрмитовым оператором в гильбертовом пространстве.

Эрмитов оператор имеет ортогональные собственные векторы, которые могут быть приняты за базис.

3. Размерность пространства состояний соответствует числу собственных подпространств оператора. Говорят, что пространство состояний *натянута* на собственные векторы, как на базис.

Число ортогональных базисных векторов называют также числом *степеней свободы* системы.

4. Если система приготовлена в состоянии $|\psi\rangle = |\psi_k\rangle$, совпадающем с каким-то k -м собственным вектором оператора (то есть, в базисном состоянии), измерения будут повторяющимися: результатом каждый раз будет соответствующее собственное значение λ_k . Объект после измерения так и остается в состоянии $|\psi_k\rangle$, отвечающем собственному вектору.

5. Если система приготовлена в состоянии $|\psi\rangle$, не совпадающем ни с одним из собственных векторов оператора (в суперпозиционном состоянии, являющемся комбинацией базисных с некоторыми коэффициентами), результатом измерения будет одно из собственных значений λ_k , выпадающее теперь случайно.

Посему говорят, что физическая величина *квантуется*, не может принять произвольное значение. Вероятность каждого λ_k определяется соответствующей компонентой, и будет тем больше, чем ближе исходное состояние к данному собственному вектору.

Объект после опыта окажется в базисном состоянии $|\psi_k\rangle$, отвечающем k -му собственному вектору.

Исходное состояние как бы перескакивает в конечное (точнее – отсекаются «лишние» состояния в суперпозиции).

б. Так как результат измерения – действительное число, действительными должны быть и собственные значения. Именно потому оператор наблюдаемой обязательно эрмитов.

Перечисленные пункты можно считать постулатами квантовой теории.

Из пунктов 4–5 ясно: компоненты оператора наблюдаемой чаще всего не будут безразмерными! Оператор имеет размерность, соответствующую своей физической величине.

Квантовое vs классическое

Сейчас вы узнаете главное, чем квантовая механика отличается от классической.

В классической физике величины, характеризующие движение: координаты, импульсы, моменты, энергии и т. д. – отождествляются с состоянием системы. По этой причине о *состояниях* не упоминают как-то специально. Подразумевается, что система обладает набором физических величин сама по себе, независимо от того, измеряем ли мы их, знаем ли. Измерение, в принципе, ни на что не влияет, находясь, таким образом, за рамками физического опыта (просто обслуживает его).

В квантовой теории физические величины, получаемые при взаимодействии квантовой системы с макроскопическим прибором (так называемые *наблюдаемые*), вовсе не являются характеристиками состояния системы! При повторении совершенно одинаковых опытов, когда система заведомо находится в одинаковом состоянии, получаются разные результаты измерений. Больше того: само измерение влияет на состояние, что видно при повторных замерах того же объекта.

Это дает основание считать, что до измерения – квантовая система попросту не обладала измеряемой величиной: координатой, импульсом, энергией... Наблюдаемая как бы родилась при замере.

А состояние квантового объекта характеризуется чем-то другим, посему его надо рассматривать особо. Вообще понятие состояния выдвигается на передний план: классическая физика – наука о движении, квантовая – о состояниях.

Выходит, что в квантовой теории принципиально иная роль измерения: оно не обслуживает опыт, а является собственно опытом. Иначе говоря, физический опыт всегда является измерением чего-то.

Квантовый таракан

Представим себе плоскую коробку из-под конфет, в которой произвольно бегают таракан. Мы хотим узнать координаты таракана, однако не можем его видеть. В каком-то смысле, таракан до поры не имеет координат.

Ударом по крышке сплющим коробку: теперь ее можно открыть и увидеть место, где зафиксировался таракан. Мы «спроектировали» его на координатную плоскость – пространство состояний. При такой проекции координаты как бы родились. Повторное проектирование (проекция проекции) ничего нового не даст, мы будем обнаруживать те же самые координаты, сколько ни хлопать по крышке: объект «испорчен». Однако новый опыт (с новым тараканом) даст, скорее всего, другие координаты.

Конечно, аналогия ущербная. Таракан это макроскопический объект, мы могли бы деликатно подглядеть за ним, к примеру, просвечивая коробку рентгеном. Для «квантового таракана» такое невозможно. Тем не менее, картинка окажется полезной.

Итак, провести опыт – значит измерить физическую величину (наблюдаемую). Она необязательно является одной из общепринятых, таких как координата, импульс, энергия... К примеру, интересует, через какое отверстие из двух пролетела частица. Значит, предстоит измерить величину, имеющую два дискретных значения: 1 и 2.

Измерение состоит во взаимодействии микрообъекта с макрообъектом – *прибором*. Прибор воспринимает физическую величину, что впоследствии каким-то образом детектируется. А сам микрообъект переходит в новое состояние, попросту проектируется в одно из *базисных*: «портится» от взаимодействия с прибором (тот самый таракан).

Понятно, что единичный квантовый опыт представляет мало интереса. Если уж измеряем, то набираем статистику. И здесь представят важность три вопроса:

1) какие базисные состояния характеризуют опыт, то есть, могут явиться его результатами?

2) каковы вероятности обнаружить квантовую систему в том или ином состоянии? (иными словами: каковы вероятности получить тот или иной результат измерения наблюдаемой?)

3) каково будет среднее значение наблюдаемой по итогам многих опытов?

Ответами на эти вопросы мы займемся далее.

3. Квантовая монета

Что может быть проще, чем бросание монеты? С нее начинают элементарное изложение теории вероятностей. Однако, если монета «квантовая», ее свойства существенно меняются! Здесь мы попробуем в них разобраться, мало-помалу преодолевая путь – от игрушечных аналогий (наподобие «квантового таракана») до важного понятия спина.

Чем оперирует квантовая механика

В квантовой механике имеют дело с различными группами величин, в которых новичкам нетрудно запутаться. Посему приведем сводку, подытожив ею предыдущий раздел.

Собственные векторы оператора наблюдаемой: $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$, и так далее, отвечающие собственным состояниям квантовой системы. Система при измерении обнаруживается в одном из собственных состояний, и ни в каком ином.

Пространство квантовых состояний всегда комплексное, ведь мы используем теорию линейных операторов! А собственные векторы ненаблюдаемы, больше того: все вместе могут быть свободно домножены на произвольный фазовый множитель $e^{i\varphi}$, без какого-либо влияния на результаты.

Собственные значения оператора наблюдаемой λ_k , соответствующие векторам $|k\rangle$. Физическая наблюдаемая как раз и принимает при измерении одно из возможных собственных значений.

Поскольку первые и вторые являются атрибутами оператора наблюдаемой, они зависят только от рода физической величины, которую мы намерены измерять (и от организации самого опыта).

Вектор первоначального состояния $|\psi\rangle$ – он несет в себе конкретику ситуации.

Амплитуды вероятностей $\psi_k = \langle k|\psi\rangle$: компоненты вектора состояния в базисе собственных векторов. Каждая из компонент – скалярное произведение, характеризующее «правдоподобие» того, что объект из начального состояния $|\psi\rangle$ перейдет в собственное состояние $\langle k|$, в котором и будет зафиксирован. Чтение всегда справа налево!

Вероятность события такого перехода – квадрат модуля амплитуды:

$$w_k = |\psi_k|^2 = \psi_k \psi_k^*.$$

Для векторов и скалярных произведений применяется нотация Дирака. А вероятности в квантовой механике предпочитают обозначать w , а не p , чтобы не было путаницы с импульсом. Звездочка – комплексное сопряжение.

Базисные состояния

Здесь могут быть разные ситуации. Когда первичны базисные состояния (они же собственные векторы), а оператор наблюдаемой из них просто следует. Либо, наоборот, приходится отталкиваться от оператора, а дальше искать собственные векторы и собственные значения (*квантовать* опыт). В текущем разделе нас будет занимать первая ситуация, а в следующем – вторая.

Как обещано, рассматриваем бросание квантовой монеты: ситуация, когда базисные состояния (они же собственные векторы) первичны. Опыт квантован изначально!

В самом деле, монета, находящаяся в состоянии «орел», не может быть обнаружена в состоянии «решка». Имеем двумерное комплексное пространство состояний \mathbb{C}^2 с двумя взаимно ортогональными базисными векторами: $|1\rangle$ (орел) и $|2\rangle$ (решка). Они будут собственными векторами эрмитового оператора наблюдаемой.

Собственные векторы в собственном базисе должны выглядеть, как всегда:

$$|1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Ну а оператор наблюдаемой в собственном базисе:

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}.$$

Собственные значения λ_1 и λ_2 являются значениями измеряемой величины, соответствующими состояниям $|1\rangle$ и $|2\rangle$. А что измеряем в случае монеты? Просто присвоим «орлу» и «решке» численные показатели, например, $+1$ и -1 . Получаем оператор наблюдаемой:

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (3.1)$$

Вероятности исходов

За вопросом о вероятностях прячется другой, более глубокий и значимый. Какова амплитуда вероятности обнаружения квантовой системы в том или ином состоянии? Амплитуда, в частности, может быть и комплексной!

Итогом опыта (считая, что квантовая монета приготовлена в состоянии $|\psi\rangle$) может быть ее обнаружение:

в состоянии $\langle 1|$ с амплитудой $\psi_1 = \langle 1|\psi\rangle$, вероятностью $w_1 = \psi_1\psi_1^*$, при этом измеренное значение равно λ_1 ;

в состоянии $\langle 2|$ с амплитудой $\psi_2 = \langle 2|\psi\rangle$, вероятностью $w_2 = \psi_2\psi_2^*$, при этом измеренное значение равно λ_2 .

Вероятность того, что монета, первоначально находившаяся в состоянии $|\psi\rangle$, окажется в состоянии $\langle k|$, равна скалярному квадрату амплитуды вероятности (так называемое *правило Борна*).

Разумеется, если монета уже находилась в базисном состоянии (к примеру, $|1\rangle$), то вероятность обнаружить ее в том же состоянии:

$$w = |\langle 1|1\rangle|^2 = 1.$$

Вероятность обнаружить ее в другом состоянии:

$w = |\langle 0|1\rangle|^2 = 0$: векторы состояний ортогональны, скалярное произведение равно нулю.

Среднее значение

Случайный результат единичного опыта не представляет интереса. Желательно получить формулу усредненного измеренного значения наблюдаемой λ . Исходное состояние $|\psi\rangle$ одно и то же; проделываем серию опытов.

По известной формуле математического ожидания:

$$\lambda_{cp} = \sum \lambda_k w_k = \sum \lambda_k \psi_k \psi_k^* .$$

Но ведь это выражение скалярного произведения через компоненты! Произведение чего на что? Вектор $\langle\psi|$ с компонентами ψ_k^* (они, как полагается, берутся комплексно сопряженными) умножается на другой вектор, имеющий компоненты $\lambda_k \psi_k$.

Второй вектор не что иное как $\hat{A}|\psi\rangle$, где \hat{A} – оператор наблюдаемой. Из спектральной теории нам известно:

$$\hat{A}x = \lambda_1 x_1 e_1 + \lambda_2 x_2 e_2 + \dots ,$$

если x_k – компоненты x в базисе собственных векторов e_k .

Итак, среднее значение физической величины, получаемое при многих опытах:

$$\lambda_{cp} = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle . \quad (3.2)$$

Как видим, оно зависит:

- 1) от того, что за величину измеряем – от ее оператора \hat{A} ;
- 2) от первоначального состояния измеряемого объекта $|\psi\rangle$.

Задача. Доказать, что:

$$\sqrt{\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}$$

– всегда действительно.

Обозначим: $|\psi\rangle = |x\rangle$, $\hat{A}|\psi\rangle = |y\rangle$. Тогда подкоренное выражение запишется в виде:

$$\langle y|y\rangle - \langle x|y\rangle\langle x|y\rangle .$$

Поскольку вектор $|\psi\rangle$ нормирован, $\langle x|x\rangle = 1$. Можем домножить на единицу, получив:

$$\langle y|y\rangle\langle x|x\rangle - \langle x|y\rangle\langle x|y\rangle .$$

Осталось вспомнить *неравенство Коши* (записываем его в дираковской нотации):

$$\langle x|y\rangle\langle x|y\rangle \leq \langle x|x\rangle\langle y|y\rangle .$$

Из чего следует: число под корнем неотрицательно.

Доказали, что среднее значение квадрата величины всегда не меньше квадрата среднего.

Назад к монете

Имея формулу, применим ее к бросанию монеты. Оператор наблюдаемой известен – см. (3.1):

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} .$$

Требуется знать вектор состояния, в котором приготовлена монета. Допустим, она симметрична, значит, ее исходное суперпозиционное состояние имеет равные доли состояний «орел» $|1\rangle$ и «решка» $|2\rangle$:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle.$$

Коэффициенты $\frac{1}{\sqrt{2}}$ потребовались для нормирования вектора на единицу:

$$\|\psi\rangle\|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = 1.$$

Для вычисления среднего значения наблюдаемой используем (3.1), задача в два действия. Сначала перемножаем матрично \hat{A} и $|\psi\rangle$:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{bmatrix}.$$

Полученный вектор умножаем скалярно на $\langle\psi|$:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = 0.$$

Ответ вполне ожидаемый, не правда ли?

Максимальная неопределенность

Когда монета симметрична и бросают ее корректно, имеем предельно возможную неопределенность относительно того, какая сторона выпадет в опыте. Вектор состояния должен лежать в точности посередине между базисными, являться их суммой:

$$|\psi\rangle = |1\rangle + |2\rangle,$$

а с учетом нормировки:

$$|\psi\rangle = \psi_1|1\rangle + \psi_2|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle.$$

Вероятность выпадения, к примеру, «орла» равна:

$$w_1 = \psi_1\psi_1^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}.$$

Такова же и вероятность «решки».

Однако (вот неожиданность!) и другой возможный вектор состояния:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle$$

– тоже дает вероятности $\frac{1}{2}$ для орла и для решки.

А если учесть, что пространство квантовых состояний комплексное, добавляются, к примеру, и такие векторы:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|2\rangle, \quad |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|2\rangle.$$

Вообще подходит целое семейство векторов типа:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + e^{i\varphi}|2\rangle).$$

Проверьте, что все они дают равновероятные исходы, все «равноудалены» от базисных векторов $|1\rangle$ и $|2\rangle$.

Конечно, для макроскопической монеты это ненужные формальные изыски. Вероятность-то всюду одна и та же, а больше ничего не требуется. Но у нас квантовая монета, и вот теперь выяснено, что она может принимать целый континуум состояний, равноудаленных от двух базисных.

Причем для любого состояния из этого континуума всегда существует парное, ортогональное ему. Пара векторов $|\psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + e^{i\varphi}|2\rangle)$ и $|\psi_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - e^{i\varphi}|2\rangle)$ – взаимно ортогональны. Убедимся, вычислив скалярное произведение:

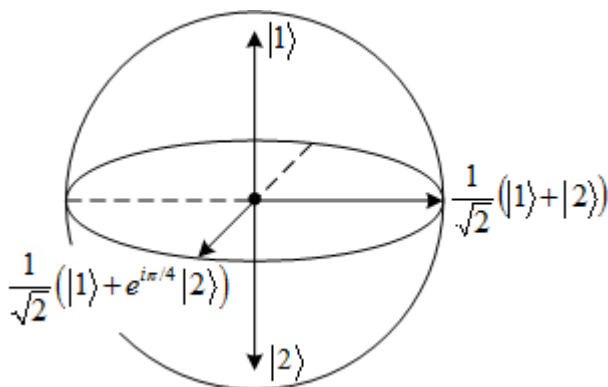
$$\langle\psi_b|\psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[1 - (e^{i\varphi})^* e^{i\varphi}] = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - e^{-i\varphi} e^{i\varphi}) = 0.$$

Заметьте: два состояния $|\psi_a\rangle$ и $|\psi_b\rangle$ дают статистически один и тот же результат (равновероятное выпадение 1 и 2). Однако несовместимы, одно исключает другое. Что может сказаться при более глубоких опытах, чем подсчет орлов-решек. Вообще переход к вероятностям исходов связан с потерей информации о фазе состояния.

Кубит

Оказалось, что квантовая монета не является аналогом обычной, макроскопической. Ее свойства значительно богаче. Вот такие предсказания дала нам теория! А сейчас – два важных сообщения.

Первое. Квантовая монета, обладающая свойствами, которые мы вывели, имеет специальное название: *кубит* (*qubit*, адекватное произношение «кью́бит»). В противоположность просто *биту* – мельчайшей единице информации, моделью которой является классическая монета.



Второе. Такой объект существует и в реальности! Это *спин* электрона.

Взгляните на рисунок: векторы состояния кубита представлены на трехмерной единичной сфере.

Направления на полюсы – орты $|1\rangle$ и $|2\rangle$, векторы базисных состояний. Как и положено ортам, они взаимно ортогональны... но что такое? Орты смотрят в противоположные стороны!

Да, сфера необычная, обладающая магическими свойствами. Все углы она увеличивает вдвое.

Потому все векторы, равноудаленные от двух базисных, располагаются в экваториальной комплексной плоскости. И опять: биссектриса между двумя ортогональными направлениями демонстрирует прямой угол, вместо полагающегося $\pi/4$.

Нечего скрывать, модель со сферой несколько подозрительна. Пространство состояний – не трехмерное вещественное, а двумерное комплексное. Тем не менее, наглядную трехмерную модель рассматривать удобно: такое пространство изоморфно «настоящему» \mathbb{C}^2 ... Ну, почти изоморфно. Почему почти – подумайте пока сами.

Спин

По той же картинке удобно разобраться, что такое *спин*. Для чего помещаем нашу магическую сферу в физическое трехмерное пространство. Пусть есть некий «спинометр», ориентированный вертикально (вдоль оси X). Если электроны приготовлены в состоянии «спин вверх», прибор каждый раз будет показывать значение спина $S_x = +1$ (неважно, что оно означает – пускай просто «орел»).

Перевернем источник электронов: ситуация «спин вниз». Прибор каждый раз показывает значение $S_x = -1$, «решка». Оба эти состояния базисные, им отвечают собственные векторы оператора, потому и результаты (собственные значения) выдаются со 100-процентной вероятностью.

Теперь установим источник так, чтобы он генерировал электроны в положении «спин горизонтально» – будет суперпозиционное состояние. Неважно, куда именно горизонтально, главное, что направление лежит в экваториальной плоскости. Теперь значение спина всякий раз случайно: то $+1$, то -1 , каждый из возможных результатов (собственных значений) будет высказываться с вероятностью 0,5.

Спин, как и монета, квантован: невозможно получить иное значение спина, кроме тех самых двух!

Ситуация меняется, когда желаем узнать среднее значение спина. Мы легко получили его для равновероятных исходов: да и без выкладок ясно, что в среднем будет ноль. Но вообще тему стоит продолжить; для начала немного общих рассуждений.

Вектор спина и квантовый кот

Формулу для среднего значения измеряемой величины:

$$\lambda_{cp} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

– можно получить прямо из классического (не квантового!) разбора опыта. Рассмотрение физических величин (наблюдаемых) в обличье линейных операторов является сердцевинной квантовой механики, но природа самого оператора все же макроскопическая. Формально вектор $\hat{A}|\psi\rangle$ – не что иное, как результат действия оператора \hat{A} наблюдаемой на вектор исходного состояния. Но данный результат в микромире не проявляется, и физического смысла не имеет, приобретая его лишь «в среднем», статистически.

В единичном квантовом опыте прямое действие оператора никак не обнаруживается! Он дает о себе знать лишь косвенно, собственными векторами и собственными значениями. В квантовом мире оператор расщеплен на *проекторы*:

$$\hat{A} = \sum_n \lambda_k \hat{P}_k .$$

В каждом опыте срабатывает один из проекторов, составляющих оператор. Он проецирует вектор исходного состояния на соответствующую «ось координат», и выдает значение λ_k в качестве результата измерения.

Как говорилось, в квантовой механике состояния задаются не физическими величинами, а кое-чем другим: векторами в гильбертовом (или евклидовом) пространстве состояний. Смущает то, что состояния не наблюдаемы, их векторы представляются чем-то отвлеченным.

Но собственным векторам соответствуют собственные значения (и уж они-то наблюдаемы!) Кажется понятнее говорить не о суперпозиции состояний, а о суперпозиции прямо физических величин. В такой трактовке объект, находящийся до опыта в базисном

состоянии $|k\rangle$, считают изначально обладающим значением физической величины λ_k , которое при каждом измерении просто выявляется. И тогда говорят, что физическую величину λ «можно точно измерить».

А о суперпозиционном состоянии говорят, например: система имеет часть энергии \mathcal{E}_1 , часть \mathcal{E}_2 (и в результате энергию «нельзя точно измерить»). Или что монета (пока результат броска не открыт) лежит наполовину орлом, наполовину решкой. Отсюда фантастический *кот Шрёдингера*, живой и мертвый в некоторых пропорциях.

Подобный подход следует воспринимать с опаской. В сложных системах векторы состояния могут интерферировать – даже взаимно погасить. А собственные значения не могут, разумеется.

Тем не менее, от рассмотрения самих наблюдаемых никуда не деться. Что относится и к случаю, когда наблюдаемой является спин. Именно его (а не абстрактный вектор спинового состояния) измеряет прибор. И вот оказывается, что спин проявляет свойства вектора в обычном трехмерном пространстве!

Мы неприметно перешли к спине от квантовой монеты, и все-таки идентифицировать их не приходится. Спин это кубит, свойства которого зависят от пространственной ориентации. Если начнем манипулировать «спинометром», то обнаружится пространственное направление, на котором прибор покажет (для множества электронов, находящихся в одинаковом состоянии) значение $+1$, сколько бы ни повторять измерение. Очевидно, здесь и выявлено направление вектора спина. Повернув прибор на пол-оборота, получаем всякий раз -1 : вектор проецируется отрицательной компонентой. Четверть оборота прибора дают $+1$ и -1 в одинаковой пропорции, а в среднем ноль: проекция вектора в точку. Промежуточные углы приводят к промежуточным результатам.

Все сходится: опыты с измерением спина «обрисовывают» вектор. Но не для единичного замера, а для целого ансамбля, статистически. Полезно связать между собой вектор спина в трехмерном пространстве и (ненаблюдаемый) вектор спинового состояния в двумерном комплексном. Собственно, такая связь иллюстрируется той самой картинкой со сферой, вот для чего она нужна. Но мы придем к цели несколько иначе.

Наблюдаемая в квантовой механике – всегда действительное число, откуда возьмется вектор? Конечно, речь идет о трех наблюдаемых, соответствующих расположению «спинометра» по каждой из трех осей. Они будут искомыми компонентами вектора.

Компонента вектора спина

Итак, занимаемся определением среднего значения наблюдаемой. Формула известна (3.2):

$$S_{cp} = \langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle.$$

Оператор спина повторяет оператор, присвоенный результату выпадения квантовой монеты (3.1):

$$\hat{S}_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Только здесь имеем оператор *проекции* спина. Спин измеряем в направлении оси X : «спинометр» вертикален.

Пусть исходное спиновое состояние определено вектором:

$$|\psi\rangle = \cos \varphi |1\rangle + \sin \varphi |2\rangle.$$

Здесь φ действительный параметр; как бы угловое направление $|\psi\rangle$ в пространстве состояний (которое и вообразить-то не получается). Нормировка соблюдена: $\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi = 1$.

Два привычных действия. Сначала умножаем \hat{S} на $|\psi\rangle$:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi \\ -\sin \varphi \end{bmatrix}.$$

Затем вычисляем скалярное произведение с $\langle\psi|$:

$$S_x = \cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi.$$

Что равно $\cos 2\varphi$ (школьное тождество). Получили не что иное, как проекцию на вертикальную ось единичного вектора, имеющего угол наклона к оси 2φ . Собственно, верифицировали нашу магическую сферу, «увеличивающую углы вдвое». Вектор состояния, имеющий в пространстве состояний «угол» φ , в обычном трехмерном пространстве обернулся (в среднем) вектором, наклоненным на угол 2φ .

Появляются матрицы Паули

Доведем сюжет до конца, найдя проекции трехмерного спина на остальные оси. Вектор состояния прежний, $|\psi\rangle = \cos \varphi |1\rangle + \sin \varphi |2\rangle$. Но «спинметр» расположили вдоль пространственной оси Y , горизонтально. Измеряем новую наблюдаемую – имеем другой оператор. За его базисные векторы надо теперь брать те, что смотрят на сфере вправо и влево. Разумеется, представление оператора проекции спина на новую ось в его собственном базисе будет опять как (3.1), и ничего не даст. Предстоит найти представление спинного оператора в первоначальном базисе. А далее настанет черед оси Z (базисные векторы назад и вперед)...

Преобразование оператора к другому базису в принципе известно, но мы упростим задачу, применив некоторый фокус.

Собственные значения инвариантны, не меняются при унитарных преобразованиях. Значит, неизменными остаются определитель матрицы (как произведение собственных значений), и след (их сумма).

Для нашего \hat{S}_x определитель равен -1 , след нулевой. Несложно подобрать еще две матрицы с такими же свойствами:

$$\hat{S}_y = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_z = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}.$$

Уже понятно, что перед нами знакомые *матрицы Паули*, они-то и являются операторами спина относительно трех направлений. Больше того: их можно счесть компонентами (по трем осям) некоторого *векторного оператора*; так нередко и считают.

Чтобы закрепить уверенность, вычислим среднее значение оставшихся двух проекций спина. На ось Y :

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin \varphi \\ \cos \varphi \end{bmatrix},$$

$$S_y = \cos \varphi \sin \varphi + \sin \varphi \cos \varphi = 2 \sin \varphi \cos \varphi.$$

Что равно $\sin 2\varphi$. Правильно, такой и должна быть проекция на горизонтальную ось, если на вертикальную – $\cos 2\varphi$. Теперь ось Z :

$$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i \sin \varphi \\ i \cos \varphi \end{bmatrix},$$

$$S_z = -i \cos \varphi \sin \varphi + i \sin \varphi \cos \varphi = 0.$$

Тоже верно: наш вектор S лежит в плоскости XU , никакой составляющей по Z быть не может. Как видим, с операторами мы не ошиблись.

Необычное вращение

Завершим тему весьма важным замечанием, адресуя к «магической сфере». Мы отметили, что направления в трехмерном вещественном пространстве соответствуют векторам двумерного комплексного пространства. Поворот вектора в привычном пространстве \mathbb{R}^3 отвечает повороту другого вектора в абстрактном пространстве \mathbb{C}^2 .

Но последний выражается унитарным оператором – комплексной матрицей 2×2 . В *теории групп* говорят: такие матрицы являются *представлением группы трехмерных вращений*. Представление хотя и не наглядное, но зато удобное.

Впрочем, заметим деталь, на которую уже довелось указать. Соответствие между трехмерными векторами и векторами пространства \mathbb{C}^2 не биективно – именно из-за «удвоения углов». Вернитесь к сфере: «трехмерный» оборот вектора $|1\rangle$ на полную окружность превратит его в $e^{i\pi} |1\rangle$. В трехмерии вектор спина совпал со своим первоначальным положением... но вектор комплексного пространства совершил пока еще пол-оборота!

Разъясним предметно. Источник генерирует электроны с вертикальной ориентацией спина. Прибор показывает измеренное значение $+1$. Повернем источник на 360° . Прибор показывает прежний спин. Но спиновое состояние электронов сейчас не совпадает с первоначальным. Чтобы оно стало прежним, требуется еще один оборот – всего на 720° .

Правда, «спинометр» ничего такого не чувствует. Как и всегда, различие может проявиться при интерференции квантовых состояний, когда электрон, совершивший полный оборот, окажется, тем не менее, в фазовом рассогласовании с другим, не обернувшимся.

Все это странно, но говорит о том, что привычное трехмерное пространство в некотором смысле не фундаментально, оно лишь предстает таковым макроскопически.

Кстати заметим, что (в отличие от электрона или протона) фотон совпадает с самим собой при повороте на 360° , а гипотетический *гравитон* – даже на 180° . Как думаете, почему?

4. Квантование

Основные идеи квантовой механики определены. Теперь потребуется аппарат, с помощью которого можно решать задачи, то есть, уравнения теории. Их мы не возьмем из книжки, а выведем самостоятельно.

Принято ошеломлять читателя сообщением, что Шрёдингер свое уравнение попросту подобрал. Так ли это в действительности – история темная. То, что вывод уравнений возможен и вполне доступен, пусть будет приятной неожиданностью.

Волновая функция

Мы убедились: если известно состояние квантовой системы (вектор $|\psi\rangle$), то можно предсказать результат опыта (по крайней мере, в вероятностном смысле). Физическая теория и должна обладать предсказательной силой.

Следовательно, задача квантовой механики в том, чтобы уметь определять состояния.

Определить вектор – значит, найти его компоненты $(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots)$ в выбранном представлении. Ну а если вектор имеет бесконечную размерность? Например, пространство координатных состояний частицы бесконечномерно (имеет даже континуальную размерность). Почему? Нахождение частицы в точке с координатой x_1 исключает обнаружение ее в точке $x_2 \neq x_1$, следовательно, все такие состояния ортогональны.

Задача о состоянии отдельной частицы – типичная для квантовой механики. Вектор континуальной размерности это функция: как бы последовательность, зависящая от непрерывного индекса λ . Именно то, что мы обозначали ψ_λ , или попросту $\psi(\lambda)$. Вектор состояния континуальной размерности называется *волновой функцией*. Волновая функция выражает, в общем случае, суперпозиционное состояние частицы – до опыта.

Вектор состояния всегда нормирован, то есть, $\|\psi\| = 1$. Иначе говоря:

$$\sum_k \psi_k^* \psi_k = 1. \quad (4.1)$$

То же относится, естественно, и к волновой функции:

$$\int \Psi^* \Psi dV = 1. \quad (4.1a)$$

Для функции будем использовать заглавную букву.

Интеграл берется по всему пространству (например, трехмерному), если функция – в координатном представлении, что вообще-то необязательно. Формула (3.1a) означает, прежде всего, что волновая функция принадлежит пространству L_2 квадратично интегрируемых функций. Для начала, интеграл должен существовать, а уж нормирование на единицу можно обеспечить подходящими коэффициентами.

Вспомним формулу (2.1) вероятности того, что объект будет обнаружен в базисном состоянии $\langle k|$:

$$w(|\psi\rangle \rightarrow \langle k|) = \psi_k \psi_k^*,$$

где ψ_k – k -я компонента вектора $|\psi\rangle$ исходного состояния.

У нас базисных состояний (различных координат) – целый континуум, и ясно, что вероятность обнаружить частицу строго в конкретной точке (x, y, z) нулевая. Можно говорить о вероятности нахождения ее в некоторой области V – суммируя $\Psi^* \Psi$ по всем точкам этой области (точнее, интегрируя):

$$w = \int_V \Psi^* \Psi dV.$$

Здесь волновая функция $\Psi(x, y, z)$ в координатном представлении.

Припомним теорию вероятностей, заключаем, что подынтегральное выражение $\Psi^* \Psi = |\Psi|^2$ есть функция *плотности вероятности* случайной величины – в данном случае координаты.

Если подытожить, волновая функция отвечает на два базовых вопроса квантовой механики:

1) какие базисные состояния характеризуют опыт? (ответ: все точки области определения волновой функции).

2) какова амплитуда вероятности обнаружить квантовую систему в том или ином состоянии? (ответ: ее показывает значение волновой функции в данной точке).

Базисные векторы

Базисными векторами в функциональном пространстве в собственном представлении являются дельта-функции, так что для волновых функций частицы в пространственном представлении (начинаем с одномерного случая) базисные функции следующие:

$$\varphi(x, x_0) = \delta(x - x_0),$$

где x_0 – индекс базисной функции.

В трехмерной ситуации:

$$\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0),$$

здесь уже трехмерная δ -функция.

Она будет волновой функцией частицы, заведомо находящейся в точке \mathbf{r}_0 .

Ранее довелось обмолвиться, что волновая функция это «поле». Пришло время взять слова назад. Правда, в случае единственной частицы мы получаем нечто, имеющее различные значения в каждой точке трехмерного пространства – чем не поле?

Но следует помнить, что в квантовой теории состояние всегда вектор пространства состояний. И функция рассматривается исключительно в качестве вектора. Не зря же базисных векторов не три, а континуум – столько, сколько пространственных точек \mathbf{X}_0 .

Добавление хотя бы второй частицы уже рассеивает иллюзию «поля». Каждому пространственному состоянию одной соответствует континуум состояний другой, размерность пространства состояний составной системы, и без того континуальная, как бы возводится в квадрат. Что именуется тензорным произведением пространств – с ним еще предстоит познакомиться.

Аналогично, базисные функции в импульсном пространстве (опять же для одной частицы!):

$$\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}_0) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0).$$

Оператор координаты

Наблюдаемым в квантовой теории соответствуют эрмитовы операторы, вот только какие именно? Попробуем получить такие операторы для наиболее ходовых физических величин.

Оператор, соответствующий некоторой наблюдаемой, получить несложно, если известен набор значений, которые наблюдаемая принимает при измерении. Ведь такой

набор представляет собой совокупность собственных значений. А сам оператор (в базисе собственных векторов) выражается диагональной матрицей, причем диагональ как раз и заполнена собственными значениями.

Начнем с оператора координаты \hat{X} . Удобно рассмотреть простейший случай свободной частицы: для нее заведомо ясно, что координата (например, x) может принять абсолютно любое значение. (Хотя, честно сказать, для «несвободной» это тоже верно). Как говорят, координата частицы *не квантована*. И, поскольку пространство координатных состояний вектора Ψ континуально, матрицами оперировать не удастся, надо действовать иначе.

Основное уравнение спектральной теории выглядит здесь так:

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

Заведомо известно, что любая величина координаты x является собственным значением (может выявиться при измерении). Наше уравнение действительно для любого x . Знакомое свойство оператора умножения на число! Значит:

$$\hat{X} = xI, \text{ или (проще) } \hat{X} = x. \quad (4.2)$$

Повторим: любое число x может появиться в результате измерения координаты. Конечно, в зависимости от организации опыта, разные координаты могут выпадать с разными вероятностями, но это сюжет особый.

С векторными операторами мы уже имели дело. И здесь иногда записывают оператор в векторной форме, объединяющей три координаты (x, y, z) :

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}. \quad (4.2a)$$

Получили форму оператора координат *в координатном же представлении*. Далее будем и другие операторы переводить в координатное представление – для совместимости.

Задача. Получить оператор физической величины $q = q(x)$, являющейся фиксированной функцией только координат.

Для такой величины можно провести точно те же рассуждения, как и для координаты. Ответ: $\hat{q} = q$ в собственном представлении. А в координатном: $\hat{q} = q(x)$. Вывод, который вскорости пригодится.

Оператор импульса

Импульс свободной частицы также не квантован и может быть любым. Аналогично предыдущему:

$$\hat{p}_x \Psi = p_x \Psi, \quad \hat{p}_x = p_x,$$

оператор проекции импульса (в данном случае на ось X) – просто умножение на величину компоненты импульса. Любое значение является собственным, и может получиться в результате измерения.

Но заметим, что таким образом оператор импульса выражен в импульсном представлении (правая часть – функция импульса). Важно получить его также в координатном представлении. В этой связи припомним:

- 1) что координатное и импульсное представления связаны преобразованием Фурье;
- 2) что $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ (\mathbf{k} – волновой вектор);
- 3) что умножение на ik_x в импульсном представлении – в координатном соответствует дифференцированию $\frac{\partial}{\partial x}$.

Отсюда выводим координатное представление:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (4.3)$$

Излишне пояснять, что данный оператор эрмитов (как оно и полагается). Мы детально разобрались с этим в предыдущей части.

Оператор импульса также можно представить как трехмерный вектор:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \nabla. \quad (4.3a)$$

Возьмем квадрат импульса – скалярную физическую величину, которая нам очень скоро потребуется. Ничего сложного, надо дважды повторить оператор импульса:

$$\hat{p}^2 = (-i)(-i)\hbar^2 \nabla^2 = -\hbar^2 \Delta. \quad (\Delta - \text{оператор Лапласа.}) \quad (4.4)$$

Задача. Записать оператор координаты в импульсном представлении.

Умножение на x в координатном представлении – в импульсном соответствует дифференцированию $i \frac{\partial}{\partial k}$ (таблица 1). Вывод: оператор координаты x в импульсном представлении выглядит как:

$$\hat{X} = i \frac{\partial}{\partial k_x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}.$$

Принцип неопределенности

Принцип неопределенности – предмет, знакомый каждому. Принято говорить, что этот принцип (соотношение неопределенностей Гейзенберга) запрещает совместно точно измерить две какие-то физические величины. Сам Гейзенберг (правильнее: *Хайзенберг*) рассматривал измерение координаты и соответствующей компоненты импульса. Пойдем по его следам, произведя проверку.

Пусть волновая функция частицы в координатном (одномерном) представлении задана таким образом:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma} \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right).$$

Для чего так хитро? Сейчас поймете. Построим функцию плотности вероятности координаты $\Psi^*(x)\Psi(x)$. Просто возводим $\Psi(x)$ в квадрат:

$$\frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right).$$

Стандартный вид *нормального распределения вероятностей* (функция Гаусса) – под него-то и была подогнана $\Psi(x)$! Здесь σ – среднеквадратическое отклонение при измерении координаты. Интеграл от функции распределения заведомо равен единице, так что $\Psi(x)$ нормирована.

Делаем очередной шаг: преобразуем $\Psi(x)$ в волновое представление $\Psi(k_x)$. Придется выполнить преобразование Фурье... К счастью, вспоминаем, что его мы провели в одной из задач для аналогичной функции. Отбросив на время громоздкий коэффициент, воспользуемся старым результатом.

Для этого придется поколдовать с «сигмой», что вы сделаете самостоятельно, а я дам сразу готовое:

$$\sigma\sqrt{2} \exp(-k_x^2 \sigma^2).$$

Возвращая множитель на место:

$$\Psi(k_x) = \frac{\sigma\sqrt{2}}{\sqrt{\sigma^4 2\pi}} \exp(-k_x^2 \sigma^2) = \frac{\sqrt{2}\sigma}{\sqrt{2\pi}} \exp(-k_x^2 \sigma^2).$$

Ну а теперь возводим в квадрат, чтобы получить плотность вероятности:

$$\frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \exp(-2k_x^2 \sigma^2).$$

Осталось очевидное – ввести обозначение $\sigma' = \frac{1}{2\sigma}$, и тогда имеем:

$$\frac{1}{\sigma'\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma'^2}\right).$$

Видим в точности гауссово распределение со среднеквадратическим отклонением значения компоненты волнового вектора k_x , равным σ' . Причем $\sigma'\sigma = 1/2$.

А с учетом того, что $p_x = \hbar k_x$, получаем окончательно, что произведение среднеквадратических разбросов измерений x и p_x равно $\hbar/2$. Утверждение, которое вы найдете в любом учебнике.

Не думайте, что сюжет с «совместным измерением» закончен. К нему еще предстоит вернуться!

Задача. Энергия \mathcal{E} электрона (нерелятивистского) определяется с точностью 1%. Какова погрешность знания его координаты?

Задача несложна, мы решим ее предельно подробно. Общее выражение для энергии:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_k \text{ (энергия покоя плюс кинетическая).}$$

Выразим приближенно через импульс – надеюсь, понятно, для какой цели. Школьная физика говорит, что кинетическая энергия связана с квадратом импульса (в нерелятивистском случае) следующим образом:

$$\mathcal{E}_k = \frac{p^2}{2m}, \text{ } m \text{ – известная масса электрона.}$$

Переходя к дифференциалам (замена малых приращений):

$$d\mathcal{E} = \frac{p}{m} dp.$$

Импульс p неизвестен, но легко выражается:

$$p = \sqrt{2m(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0)}, \text{ тогда:}$$

$$d\mathcal{E} = dp \sqrt{\frac{2(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0)}{m}}, \text{ или, учитывая, что } \mathcal{E}_0 = mc^2:$$

$$d\mathcal{E} = dp \sqrt{\frac{2(\mathcal{E} - mc^2)}{m}}.$$

А теперь применяем соотношение неопределенностей:

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta \mathcal{E} = \frac{2\Delta x}{\hbar} \sqrt{\frac{2(\mathcal{E} - mc^2)}{m}}.$$

Откуда:

$$\Delta x = \hbar \Delta \mathcal{E} \sqrt{\frac{m}{8(\mathcal{E} - mc^2)}} = \hbar \left(\frac{\Delta \mathcal{E}}{\mathcal{E}} \right) \sqrt{\frac{m\mathcal{E}}{8 - 8mc^2 / \mathcal{E}}}.$$

Задача решена, осталось подставить известные данные, в частности, $\frac{\Delta \mathcal{E}}{\mathcal{E}} = 0,01$.

Оператор энергии и унитарная эволюция

Не будет неожиданностью теперь узнать, что энергия свободной частицы тоже не квантована, может быть любой:

$\hat{H}\Psi = \mathcal{E}\Psi$, и $\hat{H} = \mathcal{E}$. Конечно, так обстоит дело в «энергетическом» представлении, то есть, в частотном. Помним, что энергия это частота: $\mathcal{E} = \hbar\omega$.

В квантовой механике оператор энергии (нерелятивистский) называют *оператором Гамильтона* и обозначают \hat{H} . Готовьтесь узнать, что оператор Гамильтона (гамильтониан) играет выдающуюся роль.

Из частотного представления можно преобразованием Фурье перейти во временное. Умножение на $i\omega$ в частотном представлении – во временном соответствует дифференцированию $\frac{\partial}{\partial t}$. Тогда уравнение спектральной теории, имевшее вид: $\hat{H}\Psi = \hbar\omega\Psi$, во временном представлении получит форму:

$$\hat{H}\Psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (4.5)$$

Узнаете? Хорошо знакомое уравнение *унитарной эволюции*. Оно оказалось всего-навсего записью основного уравнения теории линейных операторов. наших знаний хватает, чтобы выводить фундаментальные уравнения квантовой физики в две строки – то ли еще будет!

Заметьте: при переходе от одного представления к другому форма левой части не изменилась, ведь оператор инвариантен.

Проблема размерности

Заметили некоторую неувязку?

Мы потребовали, чтобы волновая функция была нормирована:

$$\int \Psi^* \Psi dV = 1.$$

Но в таком случае Ψ не вправе быть безразмерной, ведь результат интегрирования приобретет размерность объема! А должен быть простой единицей – вероятностью достоверного события.

В самом деле, волновая функция Ψ не совсем то, что вектор состояния ψ , в сущности это некоторая плотность! Из чего и вылезает размерность.

Как же быть? Можно так и считать, что волновая функция обладает подходящей размерностью. Что не слишком удобно. Полезнее переменную интегрирования сделать безразмерной, для чего домножить ее на те или иные константы: либо фундаментальные, либо постоянные в рамках конкретной задачи.

Задача. На оси X задана волновая функция вида: $\Psi(x) = Ax \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$. Нормировать функцию (то есть, подобрать значение коэффициента A).

Записываем условие нормировки (функция вещественная):

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right) dx = 1.$$

В таблице интегралов отыскиваем подходящий: $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$ для $a > 0$. У нас $a = \frac{1}{x_0^2}$.

$$\text{Следовательно, } \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\pi x_0^6} = \frac{x_0^3 \sqrt{\pi}}{2}.$$

Тогда должно быть: $A^2 \frac{x_0^3 \sqrt{\pi}}{2} = 1$, $A = \sqrt{\frac{2}{x_0^3 \sqrt{\pi}}}$. Заметьте, в данном случае волновая функция имеет размерность, а какую – разберитесь сами.

Стационарное уравнение Шредингера

Теперь будет интересовать координатное представление оператора энергии (для нерелятивистского случая). Математика уже не сработает, необходимо подключать физику. Выразим, как и ранее, кинетическую энергию через квадрат импульса:

$$\mathcal{E}_k = \frac{p^2}{2m}. \quad (4.6)$$

Ну а представление оператора квадрата импульса (4.4) известно. И тогда оператор энергии (кинетической), он же оператор Гамильтона, в координатном представлении:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta.$$

Если энергия – не только кинетическая (в нетривиальных задачах так оно и есть), придется добавить оператор потенциальной энергии:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U}.$$

В нередком стационарном случае, когда потенциальная энергия не зависит от времени, а только от координат, имеем: $\hat{U} = U(\mathbf{r})$. Помните задачу про функцию координат? И наше основное уравнение $\hat{H}\Psi = \mathcal{E}\Psi$ теперь выглядит так:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = (\mathcal{E} - U)\Psi. \quad (4.7)$$

Без труда получено так называемое *стационарное*, или *не зависящее от времени*, уравнение Шрёдингера, приводимое в учебниках.

Решаем уравнение

В приведенных выше рассуждениях Ψ отображает квантовое состояние как волновую функцию. Уравнения Шрёдингера – по сути дела основные уравнения спектральной теории, и являются математическим выражением принятого постулата: значения наблюдаемых суть собственные значения оператора данной наблюдаемой, в данном случае энергии.

Из уравнений можем получить собственные векторы (собственные функции). Что в квантовой теории 90 процентов дела.

В решении дифференциальных уравнений мы потренировались ранее. Здесь вполне можем решить стационарное нерелятивистское уравнение для одномерного движения свободной частицы (свободной – значит, $U = 0$).

Записываем (4.7) для одномерной задачи:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \mathcal{E}\Psi.$$

В нерелятивистском приближении $\mathcal{E} = \mathcal{E}_k + U = \mathcal{E}_k = \frac{p^2}{2m}$, так что получаем:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}\Psi = 0.$$

Такое уравнение второго порядка знакомо – (см. 1.8a)! Его общее решение:

$$\Psi(x) = ae^{-ipx/\hbar} + be^{ipx/\hbar}.$$

Или, с учетом $p = \hbar k$:

$$\Psi(x) = ae^{-ikx} + be^{ikx}.$$

Получили выражение для двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях оси X . Из физических соображений оставим только одну волну, для одной частицы:

$$\Psi(x) = e^{-ipx/\hbar}. \quad (4.8)$$

Опущенный коэффициент должен быть определен из условия нормировки (4.1a):

$$\int \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1.$$

Но попытка применить данное условие ничего не даст: интеграл расходится! Волновая функция не принадлежит L_2 . Физически это означает, что в вырожденном случае, когда о частице нечего сказать, кроме того, что она может находиться где угодно на координатной оси – вероятность обнаружить ее в определенной локации равна нулю. Нормировка волновой функции имеет смысл только для *финитного* движения частицы, например, в потенциальном поле.

Задача. Получить волновую функцию в импульсном представлении.

Функция в координатном представлении $\Psi(x) = \exp(-ik_0x)$ получена, имея в виду, что волновой вектор k_0 (он же импульс) фиксирован. Переводу в импульсное представление поможет незаменимая табличка 1, из которой сразу берем готовый ответ: $\sqrt{2\pi}\delta(k - k_0)$, или:

$$\Psi(p) = \sqrt{2\pi}\delta\left(\frac{p - p_0}{\hbar}\right).$$

Примерно такое и ожидалось: функция в «пространстве импульсов» всюду нулевая, кроме $p = p_0$, ведь значение импульса однозначно известно.

Возвращаемся к принципу неопределенности

Итак, если частица имеет «точный» импульс p , ее волновая функция в координатном представлении (одномерном):

$$\Psi(x) = e^{-ipx/\hbar}.$$

Запишем скалярное произведение данной функции с любым базисным вектором координатного пространства $\varphi(x, x_0) = \delta(x - x_0)$:

$$\int \delta(x - x_0) e^{-ipx/\hbar} dx = \exp(-ipx_0/\hbar).$$

Квадрат модуля этой величины соответствует «вероятности» получения результата x_0 при измерении координаты. В кавычках – потому что ситуация не финитная, имеются известные проблемы с нормировкой, да и вероятность найти частицу строго в точке равна нулю... Но это сейчас неважно. Суть в том, что модуль не зависит от x_0 ! Волновая функция частицы с точно определенным импульсом как бы равноудалена от всех базисных координатных состояний.

В начальные десятилетия квантовой механики принцип неопределенности понимали следующим образом. Измерительный прибор неизбежно воздействует на микрообъект; чем точнее измерен импульс частицы, тем сильнее было воздействие, тем в большей степени «испорчена» ее координата... Объяснение в подобном роде мелькает и в учебниках. Исходит оно из классического представления, что система обладает физическими величинами еще до опыта, просто измерить их иногда проблематично.

Такое толкование неправильно! Никакой координаты у частицы до измерения нет вообще. А дело в том, что если частица находится в базисном состоянии импульсного пространства (и потому показывает повторяющиеся значения импульса) – ее состояние в координатном пространстве одинаково удалено от всех координатных базисных векторов. Посему равновозможны любые результаты измерения координаты.

То, что ранее выглядело математическим фокусом, проявило здесь свою сущность. Впрочем, тема и тут не исчерпана: продолжение следует.

Эволюция волновой функции

Теперь решим уравнение унитарной эволюции – опять же для свободной частицы. Уравнение (4.4) превращается здесь в $\mathcal{E}\Psi = -i\hbar \frac{d\Psi}{dt}$. Или:

$$\frac{d\Psi}{dt} + \frac{\mathcal{E}}{i\hbar} \Psi = 0.$$

Уравнение первого порядка, такие мы еще не решали (есть повод попробовать). Его фурье-образ:

$$i\omega \bar{\Psi} + \frac{\mathcal{E}}{i\hbar} \bar{\Psi} = 0, \quad (\omega - \mathcal{E}/\hbar) \bar{\Psi} = 0.$$

Как и ранее, ненулевое решение соответствует единственной точке частотной области: $\omega = \frac{\mathcal{E}}{\hbar}$, и оно будет в виде дельта-функции: $\bar{\Psi} = \delta(\omega - \mathcal{E}/\hbar)$. Коэффициентом не озадачиваемся.

Помня (таблица 3!), что обратным преобразование Фурье от $\delta(\omega - \Omega)$ была $\frac{e^{i\Omega t}}{\sqrt{2\pi}}$, получаем решение с точностью до неопределенного множителя:

$$\Psi(t) = e^{i\mathcal{E}t/\hbar}. \quad (4.9)$$

При $t = 0$: $\Psi(0) = 1$. Но опять замечаем, что сдвиг во времени не меняет дифференциального уравнения. Начало отсчета времени можно выбрать произвольным.

Фазовый множитель

Вообще говоря, свободная частица даже и ни при чем. Для любой квантовой системы (в постоянных условиях) – ее эволюция во времени задается:

$$\Psi(t) = e^{i\mathcal{E}(t-t_0)/\hbar} = \Psi(0)e^{i\mathcal{E}t/\hbar},$$

если исходное ее состояние $\Psi(0)$ известно. Как говорят, мы решили *задачу Коши*.

«Постоянные условия» означают, что гамильтониан системы не зависит от времени явно. К примеру, потенциальное поле не меняется во времени.

И показывает данное решение то, что модуль волновой функции во времени не меняется, а только фаза.

Разумеется, пока система предоставлена самой себе! То есть, до тех пор, пока мы не подействуем измерительным прибором. Произойдет, как говорят, *коллапс волновой функции*. Квадрат модуля определит вероятность найти систему в определенном состоянии. Фазовый множитель на вероятность никак не повлияет.

Но тогда что за смысл у множителя $e^{i\mathcal{E}t/\hbar}$, вроде бы не влияющего на физический результат? Что именно меняется со временем?

Разумеется, одинаковый фазовый множитель, произвольно приписанный ко всем состояниям одной задачи, не изменит ровным счетом ничего. Зато от разности фаз очень даже зависит результат *интерференции* волновых функций разных систем. Что обязательно скажется при измерении.

В принципе, волновая функция зависит от времени и координаты. По части унитарной эволюции – координату мы не рассматривали, как бы занимаясь поведением функции в фиксированной точке. Тогда, объединяя (4.9) с решением (4.8), описывающим пространственное поведение:

$$\psi(t, x) = e^{i(\mathcal{E}t - px)/\hbar}.$$

Получено полное выражение *волны де Бройля* – хорошо знакомое. Увы, с нормировкой по-прежнему ничего не выйдет. Теперь понятна сущность волны де Бройля: это волновая функция в ситуации, когда нормировать ее невозможно, движение *инфинитно*.

Законы сохранения

Вспомним формулу (2.2) для среднего значения какой угодно физической величины λ :

$$\lambda_{cp} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle.$$

Состояния $\langle \psi |$ и $|\psi\rangle$ могут зависеть от времени, зависимость определяется уравнением Шрёдингера (4.5). Держа его до поры в резерве, будем интересоваться изменением во времени величины λ_{cp} . То есть, производной:

$$\dot{\lambda}_{cp} = \frac{d\lambda_{cp}}{dt} = \langle \dot{\psi} | \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} | \dot{\psi} \rangle.$$

Здесь \hat{A} – оператор физической величины λ . Точка наверху – стандартная символика дифференцирования по времени. Применена формула производной произведения, а оператор считаем независимым от времени.

Теперь достаем припасенное уравнение Шредингера:

$$\hat{H}|\psi\rangle = -i\hbar|\dot{\psi}\rangle, \text{ отсюда } |\dot{\psi}\rangle = \frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi\rangle.$$

Это для кет-вектора, а что делать с бра? Он комплексно сопряжен с кет, так что надо взять комплексное сопряжение и от множителя $\frac{i}{\hbar}$. Иначе говоря, поменять знак:

$$\langle \dot{\psi} | = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \langle \psi |.$$

Подстановка дает:

$$\langle \dot{\psi} | \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} | \dot{\psi} \rangle = \frac{i}{\hbar} \left(-\langle \psi | \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} \hat{H} | \psi \rangle \right) = \frac{i}{\hbar} \left(\langle \psi | \hat{A} \hat{H} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle \right).$$

Члены можно объединить (почему – сообразите сами):

$$\langle \dot{\psi} | \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} | \dot{\psi} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle.$$

Выражение $\hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A}$ знакомо, это *коммутатор*, обозначаемый $[\hat{A}, \hat{H}]$. Окончательный результат:

$$\frac{d\lambda_{cp}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle.$$

Напрашивается поразительный вывод. Если оператор физической величины коммутирует с гамильтонианом \hat{H} : $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, то $\frac{d\lambda_{cp}}{dt} = 0$, физическая величина не зависит от времени – сохраняется! Причем закон сохранения вполне макроскопический, ведь мы интересовались именно средним значением.

Задача. Доказать, что вне силового поля импульс сохраняется.

При нулевой потенциальной энергии гамильтониан выглядит так:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right).$$

Оператор импульса, например, по оси x :

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

Тогда:

$$\hat{H} \hat{p}_x \psi = \frac{i\hbar^3}{2m} \left[\frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right].$$

Перестановка операторов: $\hat{p}_x \hat{H} \psi$ – даст совершенно тот же результат, ведь порядок дифференцирования безразличен. Операторы коммутируют. Следовательно, $\frac{dp_x}{dt} = 0$.

Ситуация изменится, если гамильтониан содержит потенциальную энергию $U(x)$. Тогда получаем:

$$U(x) \hat{p}_x \psi = -U(x) i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}, \text{ но:}$$

$$\hat{p}_x U(x) \psi = -i\hbar \frac{\partial [U(x) \psi]}{\partial x} = -i\hbar \left[\psi \frac{\partial U(x)}{\partial x} + U(x) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right].$$

Теперь о сохранении импульса не идет и речи. Результат не явился неожиданно: импульс в силовом поле меняется во времени! Во всяком случае, если не равно нулю слагаемое $\frac{\partial U(x)}{\partial x}$ (градиент потенциала, то есть, собственно, сила).

5. Наблюдаемые коммутирующие и не коммутирующие

Принцип неопределенности – тема, уже отчасти затронутая. Принцип запрещает совместно точно измерить две какие-то физические величины. Но что значит – «точно» или «неточно» применительно к однократному измерению? Ведь истинное значение измеряемой величины неизвестно...

Придется углубиться в детали. Заодно предстоит узнать про пресловутую «квантовую запутанность».

Координата и импульс

Как уже знаем, при замере величины λ возможна ситуация, когда со стопроцентной вероятностью будет выпадать конкретное значение λ_k . Будем называть это повторяющимся результатом, что представляется корректнее, чем «точное измерение». В классическом учебнике Ландау и Лифшица результаты измерений в таком случае названы *предсказуемыми*.

А как насчет одновременного измерения другой наблюдаемой, μ ?

Пусть координата однозначно известна. Одновременно можно получить и некоторое значение импульса. Будет ли оно тоже повторяющимся?

Оказалось, что такое возможно, только если интересуемся координатой на оси x , а импульсом по другой оси: y или z . А вот измеряя p_x вместе с точно известным x , получим какое угодно значение – каждый раз разное.

Или, по-другому: произведение ошибок измерения x и p_x равна $\hbar/2$, в чем убедились ранее.

Наша задача – разобраться в вопросе по существу.

Функции наблюдаемых

Если система приготовлена в k -м базисном состоянии оператора \hat{A} , измерение его физической величины λ будет давать повторяющийся результат в виде собственного значения λ_k . Если оператор \hat{B} другой наблюдаемой μ имеет те же самые собственные векторы, исходное состояние является базисным и для него. Значит, одновременно получаем всякий раз собственное значение μ_k .

Кстати вспомним, что совпадение собственных векторов означает, что операторы коммутируют: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Все вроде бы очевидно... но ни малейшего интереса не представляет! Когда любому измеренному значению λ_k одной величины соответствует определенное значение μ_k другой, тогда μ просто является функцией λ . Или наоборот.

Возьмем в качестве примера зависимость $\mu = \lambda^3$. Ясно, что собственные значения соотносятся как $\mu_k = \lambda_k^3$, а соответствующие операторы как $\hat{B} = \hat{A}^3$ (и даже была на эту тему задача). Нет сомнений, что, измерив значение λ , одновременно измерили и ее третью степень... Но только подобное «измерение» глупо.

В ситуации с координатой и импульсом – странно было бы думать, что измерение координаты автоматически дает значение импульса... Конечно, там нет функциональной связи. Да и пространства \hat{A} и \hat{B} разные, и размерности их вовсе не обязаны совпадать.

Тензорное произведение

Мы разобрали случай максимально возможной связи – функциональной. Когда «точное измерение» одной величины ничуть не препятствует знанию другой, даже предполагает такое знание.

Противоположный вариант: две квантовые системы, никак между собой не связанные. Измерение в одной системе не может зависеть от измерения в другой – по чисто физическим причинам. Первая система может быть приготовлена в базисном состоянии относительно какой-то наблюдаемой, что не мешает второй системе быть приготовленной тоже в базисном состоянии относительно своей наблюдаемой – «одновременное измерение» двух величин возможно и здесь! Выкладки, предстоящие впереди, призваны показать, что и в данном случае соответствующие операторы коммутируют.

Призываем на помощь квантовые монеты, которые считаем не имеющими никакой связи друг с другом. Соответственно, имеем два пространства состояний Ψ и Φ , совершенно независимых. А в них – векторы состояний:

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}, |\varphi\rangle = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix}.$$

Мы хотим рассматривать «комбинированные» состояния, являющиеся сочетанием частных. К примеру, первая монета находится в своем базисном состоянии $|2\rangle$, вторая – в своем базисном состоянии $|1\rangle$. Тогда «консолидированная» система, образованная парой монет, имеет состояние $|21\rangle$. Всего возможных состояний четыре, но будут ли они базисными для новой системы? Должны, так как любые два из них исключают друг друга. Вопрос, как построить новое 4-мерное пространство, чтобы оно являлось евклидовым.

Помните, мы завязали интригу: как из двух независимых евклидовых векторных пространств (даже разной физической размерности) образовать одно, единое? Пришла пора дать ответ. Образует условное «объемлющее» пространство X векторов $|x\rangle$ размерности $2 \times 2 = 4$ с координатами:

$$\begin{matrix} x_{11} = \psi_1\varphi_1 & x_{12} = \psi_1\varphi_2 \\ x_{21} = \psi_2\varphi_1 & x_{22} = \psi_2\varphi_2 \end{matrix}, \quad (5.1)$$

но только, конечно, вытянутыми в столбик. Хотя прямоугольная табличка (аналог тензорного произведения) компактнее и нагляднее. В принципе, операция и называется *тензорным произведением* векторов:

$$|x\rangle = |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle. \quad (5.2)$$

Не стоит искать здесь тензоры, сходство чисто формальное. Впрочем, матрицу, получаемую в результате тензорного умножения, иногда называют *диадой*. Она, конечно, не обязана быть для произвольного случая квадратной.

Соответственно, и пространство «комбинированных» состояний X выражают через частные пространства как: $X = \Psi \otimes \Phi$.

Почему именно перемножать, а не проделывать какие-то другие операции? Да потому, во-первых, что все компоненты вектора $|x\rangle$ вышли *однородными*, с одинаковой

размерностью. А главное – полученное пространство также евклидово! Проверим: скалярное умножение вектора на себя же по известному правилу должно дать норму вектора.

$$\| |x\rangle \|^2 = (\psi_1 \varphi_1)(\psi_1 \varphi_1)^* + (\psi_1 \varphi_2)(\psi_1 \varphi_2)^* + (\psi_2 \varphi_1)(\psi_2 \varphi_1)^* + (\psi_2 \varphi_2)(\psi_2 \varphi_2)^* .$$

Простая перемена мест сомножителей дает:

$$\| |x\rangle \|^2 = \psi_1 \psi_1^* \varphi_1 \varphi_1^* + \psi_2 \psi_2^* \varphi_1 \varphi_1^* + \psi_1 \psi_1^* \varphi_2 \varphi_2^* + \psi_2 \psi_2^* \varphi_2 \varphi_2^* .$$

Дальнейшие простые преобразования:

$$(\psi_1 \psi_1^* + \psi_2 \psi_2^*) \varphi_1 \varphi_1^* + (\psi_1 \psi_1^* + \psi_2 \psi_2^*) \varphi_2 \varphi_2^* = (\psi_1 \psi_1^* + \psi_2 \psi_2^*) (\varphi_1 \varphi_1^* + \varphi_2 \varphi_2^*) .$$

В скобках узнаем квадраты норм исходных векторов, и окончательно:

$$\| |x\rangle \| = \| |\psi\rangle \| \cdot \| |\varphi\rangle \| .$$

Произведение норм – инвариант, каковой и должна быть норма. Формулой, действительной для евклидового пространства, получили норму в X – оказывается, оно также евклидово!

Рассмотрение частного примера ничуть не ограничивает общности вывода.

Таким образом, состояние «консолидированной» системы, условно состоящей из двух независимых, можно изобразить вектором в объемлющем евклидовом пространстве X . Но можно и двумя отдельными векторами в своих пространствах Ψ и Φ , что эквивалентно. Количества степеней свободы систем просто перемножаются. Подобные состояния называют *сепарабельными* (или разложимыми). В единое состояние они объединяются чисто условно.

Операторы над сепарабельными состояниями

Тем не менее, такое объединение приведет нас к важному выводу. Пусть в пространствах Ψ и Φ действуют операторы, соответственно, \hat{A} и \hat{B} . Они проявляются и в объемлющем пространстве $X = \Psi \otimes \Phi$, только в преобразованном виде. В самом деле: действие \hat{A} на $|\psi\rangle$ дает вектор:

$$\hat{A}|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{bmatrix} ,$$

а действие \hat{B} на $|\varphi\rangle$ – вектор:

$$\hat{B}|\varphi\rangle = \begin{bmatrix} \varphi'_1 \\ \varphi'_2 \end{bmatrix} .$$

Результат действия обоих операторов в общем пространстве $\Psi \otimes \Phi$ – компоненты:

$$\begin{matrix} \psi'_1 \varphi'_1 & \psi'_1 \varphi'_2 \\ \psi'_2 \varphi'_1 & \psi'_2 \varphi'_2 \end{matrix} .$$

Внимание: вектор никак не меняется от перестановки порядка действия операторов! Даже не очень ясно, каким образом их можно «переставить», ведь каждый действует в своем пространстве. В общем, операторы и здесь коммутируют, $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Коммутирование операторов

Подведем итог. Мы рассмотрели два случая, когда измерение одной наблюдаемой не может повлиять на измерение второй – по чисто физическим причинам:

- 1) вторая наблюдаемая связана с первой функциональной зависимостью;
- 2) наблюдаемые относятся к разным системам, между которыми нет взаимодействия.

В обоих случаях убедились, что операторы, относящиеся к двум наблюдаемым, коммутируют. Можно сделать вывод (и он сделан): получение одновременно повторяющихся результатов измерений двух наблюдаемых возможно тогда и только тогда, когда соответствующие операторы коммутируют.

В противном случае имеем следующее: при измерении первой наблюдаемой – соответствующее состояние системы либо становится базисным, либо базисным было изначально. Но для другой наблюдаемой оно является суперпозиционным! И повторяющийся результат ее измерения невозможен.

Итак, всюду, где операторы наблюдаемых коммутируют ($[\hat{A}, \hat{B}] = 0$), ничто не мешает их независимому измерению, причем «точному». Что невозможно, когда $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$.

Задача. Получить коммутатор операторов наблюдаемых x и p_x . Сами операторы нам хорошо известны.

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi = \hat{x}\hat{p}_x\psi - \hat{p}_x\hat{x}\psi = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial(x\psi)}{\partial x}.$$

Очевидно, что:

$$\frac{\partial(x\psi)}{\partial x} = \psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x}. \text{ И тогда:}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \psi + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} = i\hbar \psi.$$

Таким образом, коммутатор: $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$.

Важное пояснение

Итак, тензорными произведениями всевозможных двумерных векторов $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ образовано множество четырехмерных векторов $|x\rangle \dots$ которое линейным пространством не является! Из (5.1) хорошо видно, что компоненты $|x\rangle$ не произвольны, а всегда связаны соотношением:

$$x_{11}x_{22} = x_{12}x_{21}. \quad (5.3)$$

Суть дела понятна: в (5.1), если рассматривать его как матрицу, определитель равен нулю, строки и столбцы линейно зависимы, матрица вырождена. Только такие и соответствуют сепарабельным состояниям.

Если имеется другой аналогичный вектор $|y\rangle$:

$$y_{11}y_{22} = y_{12}y_{21},$$

то, например, их сумма $|x\rangle + |y\rangle$ такому свойству не удовлетворяет (проверьте):

$$(x_{11} + y_{11})(x_{22} + y_{22}) \neq (x_{12} + y_{12})(x_{21} + y_{21}).$$

Такая сумма не могла бы получиться тензорным перемножением каких-то двумерных векторов.

Однако пространство состояний всегда линейное! Принцип суперпозиции: линейная комбинация двух возможных квантовых состояний $|x\rangle$ и $|y\rangle$ обязана быть также разрешенным состоянием.

Поэтому в вышеизложенное следует внести поправку. «Консолидированное» пространство состояний системы двух монет (тензорное произведение пространств) $X = \Psi \otimes \Phi$ вовсе не эквивалентно множеству тензорных произведений всех векторов $|x\rangle = |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$. Оно лишь порождено данным множеством, натянуто на него, то есть, образовано любыми линейными комбинациями таких $|x\rangle$. Пространство всех возможных состояний шире, чем множество только сепарабельных (разложимых). Оно включает еще и другие состояния, называемые *запутанными* (*entangled*). Для которых (5.3) не соблюдается.

Задача. Является ли запутанным состояние системы двух кубитов, равноудаленное от всех базисных состояний?

Базисные состояния нашей системы это: $|11\rangle, |12\rangle, |21\rangle, |22\rangle$. Вектор состояния представляет (при наложенном условии) в следующем виде:

$$|x\rangle = \frac{1}{2}|11\rangle + \frac{1}{2}|12\rangle + \frac{1}{2}|21\rangle + \frac{1}{2}|22\rangle,$$

имея в себе равные доли от всех четырех базисных векторов. Множитель $\frac{1}{2}$ потребовался для нормирования на единицу.

Очевидно, требование (5.3) выполняется, состояние сепарабельно, а не запутано.

С другой стороны, учтем, что:

$$|11\rangle = |1_1\rangle \otimes |1_2\rangle, |12\rangle = |1_1\rangle \otimes |2_2\rangle, |21\rangle = |2_1\rangle \otimes |1_2\rangle, |22\rangle = |2_1\rangle \otimes |2_2\rangle.$$

Индексом помечен номер кубита, к которому относится состояние. Тогда простыми преобразованиями легко получить:

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_1\rangle + |2_1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_2\rangle + |2_2\rangle).$$

Заданное состояние предстает в виде тензорного произведения состояний отдельно первой и второй «квантовой монеты», как и ожидалось.

Квантовая запутанность

Сепарабельное состояние системы из двух монет означает, что исход испытания с одной монетой никак не зависит от того, что мы узнали (или не узнали) о состоянии другой. С бросками обычных, классических монет так оно и есть.

Но если состояния двух монет запутаны, вероятности получить «орел» или «решку» на второй монете зависят от того, что перед тем выпало на первой. Состояния взаимосвязаны!

Можно говорить о предельно возможной запутанности, выражающейся в одном из двух вариантов:

- 1) вторая монета всегда падает так же, как и первая;
- 2) вторая монета всегда падает противоположно первой.

Первый вариант соответствует состоянию:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|22\rangle,$$

находящемуся в точности посередине между «орел-орел» и «решка-решка». Впрочем, и другое состояние:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|22\rangle$$

– будет давать такой же результат. Очевидно, что (3.3) в обоих случаях не выполняется.

Для второго варианта («орел-решка» или «решка-орел») можно записать состояния:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|12\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|21\rangle \text{ и } \frac{1}{\sqrt{2}}|12\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|21\rangle.$$

Квантово-запутанные монеты составляют единую систему до тех пор, пока не произошел ее коллапс. Пусть, например, система создана в состоянии $\frac{1}{\sqrt{2}}|12\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|21\rangle$ (так называемом *синглетном*). Теперь монеты, не проверяя состояния каждой, можно разнести в пространстве, и от этого они не перестают образовывать систему! Только «измерив» состояние одной монеты, мы одновременно (и мгновенно) узнаем состояние и другой: система распалась. Квантовые явления как бы игнорируют пространство и время – помните, мы сказали, что квантовая механика нелокальна.

Но не получается ли тут сверхсветовое взаимодействие (вразрез с релятивистскими представлениями)? Вторая монета мгновенно на расстоянии «узнает», какой ей надо быть – в тот момент, когда первая определилась с выбором... Да, однако никакой передачи информации с бесконечной скоростью на данном пути осуществить не получится. Считайте, что явление монеты в некотором состоянии не зависит от самой монеты. Такое явление (и вместе с тем явление другой монеты в противоположном) как бы обусловлено общей причиной, а такое не противоречит СТО.

Кстати, подобные опыты ничуть не являются воображаемыми, они реально ставятся для запутанных поляризационных состояний фотонов, о чем сейчас много пишут.

Впрочем, может показаться, что «запутанность» вполне классическое явление. Монеты выбрасываются хитрой машинкой – таким образом, что результаты их выпадения случайны, но всегда противоположны у двух монет. Не подсматривая результаты, упакуем монеты в коробки и развезем в разные города. Теперь, вскрыв одну из коробок и увидев «решку», немедленно узнали, что при вскрытии второй обнаружится «орел».

Говоря вульгарно, увидев левый ботинок, мгновенно предсказываем, что другой – правый.

Но, конечно, здесь нет эквивалента опыту с «запутанностью». А есть знакомая ситуация функциональной связи: измерив наблюдаемую λ , одновременно узнали и минус λ , иное было бы странным. Пространство состояний остается двумерным.

Квантовая же запутанность не обязательно предельно возможная: вектор состояния может иметь все четыре составляющие.

Резюмируем: запутанные квантовые монеты, пусть и разъехавшиеся в разные места, не имеют по отдельности своих состояний! Помимо того, что состояние системы, скажем, синглетное, никакой другой информации о ней нет. И лишь в момент измерения система, коллапсируя, переходит в одно из двух возможных базисных состояний: $|12\rangle$ или $|21\rangle$.