

ВА Касимов

Квантовая механика

(принципы)

2.

Касимов ВА

Квантовая механика (принципы)

СИБПРИНТ
Новосибирск
2013

4.

ББК 22.314
УДК 530.145
К 28

Касимов В.А.

К 28 Квантовая механика (принципы). Новосибирск: ООО агентство "СИБПРИНТ", 2013

Целью данной работы является изложение основополагающих принципов нерелятивистской квантовой механики, тех принципов, которые составляют её нерушимую структуру, расставить акценты, разумеется автора, и с интонациями, касающимися пространственно-временных отношений в физике.

ISBN 978-5-94301-495-6

© Касимов В.А., 2011

Квантовая механика (Принципы)

Оглавление

| | |
|---|-----|
| Введение | 7 |
| Глава 1. Квантовомеханический формализм | 8 |
| Аксиоматика | 8 |
| Основные постулаты | |
| Наблюдения (измерения) в квантовой механике | |
| Динамика и эволюция квантовых систем | 13 |
| Картина Шредингера | |
| Картина Гейзенберга | |
| Картина Дирака. Представление взаимодействия | |
| Резюме к главе 1 | 22 |
| Глава 2. Некоторые обобщения | 25 |
| Алгебраическое обобщение | 25 |
| Динамическая алгебра | |
| Непрерывный спектр основных канонически сопряжённых переменных | |
| Соотношения неопределённостей | |
| Решение уравнения динамики в представлении взаимодействия | 36 |
| Матрица плотности | 41 |
| Основные положения | |
| Уравнение динамики | |
| Резюме к главе 2 | 48 |
| Глава 3. Спин | 50 |
| Резюме к главе 3 | 58 |
| Глава 4. Основные уравнения квантовой механики | 59 |
| Принцип соответствия | 59 |
| Нерелятивистское волновое уравнение Шредингера | 66 |
| Вывод уравнения | |
| Уравнение непрерывности | |
| Концепция частицы в нерелятивистской квантовой механике | |
| Релятивистское уравнение Клейна-Гордона | 76 |
| Резюме к главе 4 | 78 |
| Глава 5. Классические поля | 80 |
| Уравнения движения | 80 |
| Принцип наименьшего действия | |
| Сохраняющиеся величины | |
| Глава 6. Спутанность | 90 |
| Глава 7. Квантование электромагнитного поля (нерелятивистский случай) | 96 |
| Квантование гармонического осциллятора | 96 |
| Когерентные (глауберовы) состояния | 97 |
| Свойства когерентных состояний | 98 |
| Квантование электромагнитного поля в резонаторе | 98 |
| Квантование электромагнитного поля тел произвольной формы | 102 |
| Приложение 1. Математические основания квантовой механики | 103 |
| Приложение 2. Тензор энергии-импульса | 114 |
| Приложение 3. Группа Лоренца | 121 |
| Приложение 4. Принципы обработки информации в одной модели наблюдения | 123 |
| Литература | 140 |

6.

Введение

Существует большое количество прекрасных учебников по квантовой механике, в которых решения практических задач и постановки вопросов сегодняшнего дня изложены достаточно подробно.

Однако для понимания некоторых специальных вопросов нет необходимости в доскональном знании предмета, поскольку отсутствует потребность доведения “мысли” до числа. Здесь необходимо простое и осознанное отношение к принципам построения базовых знаний. Именно этой цели и служит очередная предлагаемая работа по нерелятивистской квантовой механике: вернуться к исходным принципам. Разумеется, содержание книги нельзя рассматривать, как полное изложение квантовой механики.

Центральным моментом книги является - показать сугубую нелокализованность квантовых объектов в нерелятивистском случае и потерю индивидуальности единичных квантовых объектов в релятивистском случае..

Эти два обстоятельства показывают и с необходимостью ставят вопрос о применимости классической метрической топологии, поскольку именно концепция единичного физического объекта, как элемента топологии, и используется при описании пространственно-временных отношений. Описать - как это происходит, является одной из основных целей, поставленных автором.

Наряду с работами [6] и [7] результаты этой работы будут использоваться в монографии [9].

При изложении основного материала использованы классические труды [1] – [5]

Глава 1. Квантовомеханический формализм

Аксиоматика

Основные постулаты

Состояния

В квантовой механике состояние системы описывается вектором в комплексном гильбертовом пространстве. Этот вектор называется *вектором состояния* системы и обозначается как $|\psi\rangle$ ¹⁾. Векторы состояния определяются с точностью до постоянного множителя, то есть все вектора, отличающиеся на постоянный множитель, описывают одно и то же состояние. Поэтому для определённости описания из всех таких векторов выбирают один, нормированный на единицу. Условие нормировки представляется в виде:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad (1.1)$$

где через

$$\langle\chi|\psi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle^* \quad (1.2)$$

обозначается скалярное произведение векторов $|\chi\rangle$ и $|\psi\rangle$, а “звёздочка” сверху обозначает операцию комплексного сопряжения.

Согласно условию нормировки (1.1) вектор состояния определяется с точностью до фазового множителя $e^{i\theta}$, равного по модулю единице. Состояния квантовой системы, описываемые векторами, называются *чистыми стояниями*.

Совокупность векторов состояний квантовой системы образует линейное пространство. Это предположение составляет предмет одного из наиболее фундаментальных принципов квантовой механики – *принципа суперпозиции*.

¹⁾ $|\psi\rangle$ - читается как “кет-вектор”; $\langle\psi|$ - читается как “бра-вектор”. От английского слова: *bracket* = *bra|cket*. Вектор $\langle\psi|$ получается из вектора $|\psi\rangle$ с помощью операции комплексного сопряжения: $\langle\psi| = |\psi\rangle^*$. Обозначения векторов таким образом называется записью в дираковской нотации.

Наблюдаемые

Если состояние системы описывается вектором состояния, то характеристики системы, её *наблюдаемые* a , описываются с помощью самосопряженных (эрмитовых) операторов²⁾ $a = a^*$. Как известно, эрмитовские операторы обладают полной системой ортонормированных собственных векторов $|\alpha'\rangle$ и собственных значений α' , то есть

$$a|\alpha'\rangle = \alpha'|\alpha'\rangle \quad (\text{собственные векторы оператора } a), \quad (1.3)$$

$$\langle\alpha'|\alpha''\rangle = \delta_{\alpha'\alpha''} \quad (\text{условия ортонормированности}) \quad (1.4)$$

$$\sum |\alpha'\rangle\langle\alpha'| = 1 \quad (\text{условие полноты}). \quad (1.5)$$

Здесь символ $\delta_{\alpha'\alpha''}$ понимается как символ Кронекера, если α' и α'' принадлежат дискретному спектру, и как δ -функция Дирака $\delta(\alpha' - \alpha'')$, если оба они принадлежат непрерывному спектру. Правая часть (1.4) равна нулю, если одно из состояний принадлежит дискретному, а другое непрерывному спектру. Аналогично, суммирование в *соотношении полноты* (1.5) для непрерывного спектра следует понимать как интегрирование.

В дальнейшем эти квантовомеханические характеристики будут называться динамическими наблюдаемыми, эрмитовыми операторами, иногда – просто функциями, подразумевая определение функций от операторов, данное в приложении 1. Разумеется, все эти понятия не являются синонимами, однако из контекста всегда можно будет понять – какая особенность упоминаемой характеристики подразумевается.

Измерения

Нетривиальным моментом квантовомеханической парадигмы является “встраивание” процедур измерения и приготовления состояний системы непосредственно в теорию. Наблюдение же над системой, вообще говоря, будет возмущать систему и, таким образом, изменять её вектор состояния. Рассмотрим это подробнее.

Пусть система описывается вектором состояния $|\psi\rangle$. Согласно квантовой механике результатом измерения значения наблюдаемой a должно стать одно из собственных значений α оператора a , а система

²⁾ оператором называется объект линейного пространства, преобразующий один вектор в другой. Эрмитовы операторы имеют вещественные собственные значения. Именно благодаря этому свойству они и ассоциируются с наблюдаемыми.

10.

должна перейти в собственное состояние $|\alpha\rangle$ этого оператора. Вероятность такого процесса даётся выражением $|\langle\alpha|\psi\rangle|^2$. Другими словами, $\langle\alpha|\psi\rangle$ есть амплитуда вероятности наблюдения значения a и перехода системы из начального состояния $|\psi\rangle$ в конечное $|\alpha\rangle$. Если в результате измерения над системой будет найдено, что наблюдаемая a имеет значение a , то вектором (ненормированным), описывающим систему после измерения, станет $|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle$. Поэтому повторное измерение, сделанное сразу же вслед за первым, снова даст значение a наблюдаемой a .

Таким образом, *измерение величины a вызывает переход системы в одно из состояний, являющихся собственными векторами оператора a* . Это позволяет рассматривать измерение как способ приготовления системы в данном состоянии. Измерение, которое будучи повторено немедленно вслед за первым, даёт вновь тот же результат называется *измерением первого рода*.

Теоретически можно предсказать только вероятность перехода системы из данного состояния $|\psi\rangle$ в любое из этих собственных состояний. Если действительно имеется физическая система, находящаяся в состоянии $|\psi\rangle$, то измерения позволяют проверить предсказанные вероятности.

Полнота описания состояния

Вообще говоря, физическая система описывается многими параметрами. Однако, как было показано выше, измерение одного из параметров приводит к изменению состояния системы. В таком случае у нас нет никаких оснований утверждать о том, что такие измерения одной наблюдаемой не затрагивают значений и других. В связи с этим в квантовой механике предполагается, что для каждой системы существует полный набор наблюдаемых, последовательное измерение каждой из которых не меняет результатов предыдущих измерений. Результаты же подобных совместимых измерений дают полную доступную информацию о системе и могут использоваться для характеристики её состояния. Операторы, соответствующие совместно измеряемому наблюдаемому, называются *коммутирующими*. Вся совокупность наблюдаемых, коммутирующих друг с другом, образуют *полный набор коммутирующих операторов*. Каждой совокупности собственных значений полного набора коммутирующих

наблюдаемых (квантовых чисел) соответствует только одно общее собственное состояние.

Наблюдения (измерения) в квантовой механике.

Как мы видели, в формулировке и интерпретации квантовомеханического формализма понятие акта измерения играет чрезвычайно важную роль и имеет фундаментальное значение. Различные типы физических измерений над микрообъектами в подавляющем числе сводятся к экспериментам, связанным с процессами столкновения.

Процесс столкновения можно описать так: одна частица³⁾, падающая, налетает на другую – частицу мишени – и в результате взаимодействия рассеивается. Падающая частица начинает своё движение, находясь на достаточно большом расстоянии от частицы-мишени. Если силы взаимодействия частиц имеют конечный радиус действия, то в начале эксперимента можно считать движение налетающей частицы свободным. Сама же частица при этом описывается полным набором квантовых чисел, характеризующих её свободное состояние. После взаимодействия, при достаточном удалении от частицы-мишени, движение её вновь можно считать свободным. Однако в результате взаимодействия значения квантовых чисел изменяются.

В таких экспериментах налетающие частицы специально готовятся, в результате чего квантовые числа, полностью характеризующие частицу, приобретают определённые значения. После рассеяния частицы эти характеристики опять измеряются. Такая схема эксперимента позволяет проверить и выводы теории, описывающей взаимодействие частиц мишени и налетающей, и адекватность описания частицы с помощью выбранных квантовых чисел полной системы наблюдаемых. Квантовомеханическое описание подобных измерений связано использованием аппарата так называемых *S-матриц*.

Важно отметить, что в этих процедурах участвуют *реальные* частицы, включая и возможно вновь рождённые. Это замечание

³⁾ Концепция частицы, как единичного элементарного объекта классической физики, претерпела значительные изменения в квантовой механике. Употребляя термин “частица”, мы подразумеваем некий единичный квантовомеханический объект, описываемый вектором состояния. Подробнее концепция частицы в квантовой механике представлена в главе 4.

12.

становится очень важным при интерпретации диаграмм Фейнмана, где возникает необходимость вводить и виртуальные частицы.

Физические тела макроуровневой организации материи, представимы в виде пространственно локализованных физических объектов классической физики, имеющих размеры, форму, взаиморасположение относительно других тел, скорость, массу, энергию и другие характеристики, обуславливающие взаимодействие между телами, например, заряды; определённые значения характеристик в данный момент времени (временная локализация). Многие характеристики совершенно независимы, например, положение тела и его скорость, разумеется, если между ними не проявляются какие-либо функциональные связи. Все эти свойства объединяются в единой информационной и *локализованной* сущности, которую концептуально мы и называем физическим телом. Возможность пространственной и временной локализации тел позволяют ввести пространственно-временные отношения порядка существования и сосуществования физических объектов.

Составные физические тела представляются как “аддитивная” композиция этих простых и дискретных (в силу возможности локализации) объектов. Эта же идеология охватывает и область механики сплошных сред, что позволяет работать в приближениях, соответствующих непрерывному представлению физических величин.

Кроме локализованных объектов в классической физике вводится понятие поля, как *нелокализованной* сущности. Источниками этих полей являются соответствующие заряды – электрический заряд, гравитационная масса... Назначение этих сущностей – описать опять-таки локальное взаимодействие между объектами, но с помощью нелокализованных полей – электромагнитного, гравитационного...

Таким образом, “кирпичиками” макроуровневого описания являются локализованные объекты, как носители своих свойств и нелокальные поля, но реализующие локальность взаимодействий.

Квантовомеханический подход требует радикальной смены понятийной базы описания физических явлений и объектов

Здесь под объектом понимается совершенно другая сущность с характеристиками, называемыми квантовыми числами или собственными значениями наблюдаемых. То есть, в квантовой механике нет частиц, но есть квантовые объекты, которые не “разбираются” на совершенно обособленные части. Целостность описания квантового объекта обеспечивает его вектор состояния. Другими словами, *концептуальными информационными носителями для квантовомеханических сущностей являются векторы линейного (гильбертова) пространства.*

Динамика и эволюция квантовых систем

Картина Шредингера

Запишем изменение вектора состояния со временем⁴⁾ как действие оператора $U(t, t_0)$ на начальное состояние $|t_0\rangle$, то есть

$$|t\rangle = U(t, t_0)|t_0\rangle, \quad (1.6)$$

$$U(t_0, t_0) = 1 \quad (1.7)$$

Для сохранения вероятности требуется, чтобы норма вектора не изменялась со временем

$$\langle t|t\rangle = \langle t_0|t_0\rangle = \langle t_0|U^*(t, t_0)U(t, t_0)|t_0\rangle,$$

здесь: $\langle t| = |t\rangle^* = [U(t, t_0)|t_0\rangle]^* = \langle t_0|\bar{U}^*(t, t_0)$,

то есть, чтобы выполнялось

$$U^*(t, t_0)U(t, t_0) = 1 \quad (1.8)$$

Выполнение же соотношения

$$U(t, t_0)U^*(t, t_0) = 1 \quad (1.9)$$

обеспечивает оператору U свойство *унитарности*. Соотношение (1.9) будет удовлетворено, если для U выполняется групповое свойство

$$U(t, t_1)U(t_1, t_0) = U(t, t_0) \quad (1.10)$$

Действительно, если в равенстве (1.10) положить $t = t_0$ и предположить справедливость его при $t_0 < t_1$, то найдём

$$U(t_0, t_1)U(t_1, t_0) = 1 \quad (1.11)$$

откуда

$$U(t_0, t_1) = U^{-1}(t_1, t_0) \quad (1.12)$$

Умножая (1.11) слева на $U^*(t_0, t_1)$ и используя (1.8), получаем

$$U(t_1, t_0) = U^*(t_0, t_1) = U^{-1}(t_0, t_1) \quad (1.13)$$

⁴⁾ первый "выход" концепции времени, как упорядочивающего фактора, на сцену квантовой механики. Разумеется, о метричности времени здесь пока нельзя говорить. Речь идёт о времени только как об упорядочивающем факторе, о его свойстве аффинности. Отсутствие метричности связано с отсутствием введения эталона времени и процедуры синхронизации с эталоном.

14.

Следовательно, оператор U – унитарный.

Рассмотрим разложение функции $f(t)$ в ряд Тейлора в окрестности точки t_0

$$f(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{d^k}{dt^k} f(t_0) (t - t_0)^k \quad (1.14)$$

Это разложение можно представить в символическом виде

$$f(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t - t_0)^k}{k!} \left[\frac{d}{dt} \right]^k f(t_0) = e^{(t-t_0)[D]} f(t_0) \quad (1.15)$$

где оператор $[D]$ формально определяется соотношением $[D] = d/dt$. Произведём в (1.15) замену переменных $[D] = -i[H]$, тогда

$$f(t) = e^{-i(t-t_0)[H]} f(t_0) \quad (1.16)$$

Пусть $f(t)$ представляет унитарный оператор $U(t, t_0)$. Тогда $f(t_0) = 1$, а (1.16) принимает вид

$$U(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)[H]} \quad (1.17)$$

Унитарный оператор $U(t, t_0)$ может быть представлен в виде

$$U(t, t_0) = e^{iA(t, t_0)}, \quad (1.18)$$

где $A(t, t_0)$ – эрмитов оператор. Сравнивая (1.17) и (1.18) видим, что $[H]$ является эрмитовым оператором.

Учитывая (1.17), соотношение (1.6) запишем в виде:

$$|; t\rangle = e^{-i(t-t_0)[H]} |; t_0\rangle \quad (1.19)$$

Пусть t – бесконечно мало отличается от t_0 , и $t - t_0 = \delta t$; тогда с точностью до членов первого порядка по δt можно написать

$$U(t_0 + \delta t, t_0) = 1 - i[H]\delta t, \quad (1.20)$$

а соотношение (1.19) при бесконечно малом изменении времени равенство принимает вид:

$$|; t_0 + \delta t\rangle - |; t_0\rangle = -i[H]|; t_0\rangle\delta t \quad (1.21)$$

В пределе $\delta t \rightarrow 0$, с учётом

$$\lim_{\delta t \rightarrow 0} (\delta t)^{-1} (|; t_0 + \delta t\rangle - |; t_0\rangle) = \frac{d}{dt} |; t\rangle \quad (1.22)$$

(1.21) принимает вид

$$i \frac{d}{dt} |t\rangle = [H]|t\rangle \quad (1.23)$$

Запишем (1.23) также в виде

$$i \frac{d}{dt} |\psi_S(t)\rangle = H_S |\psi_S(t)\rangle, \quad (1.24)$$

где $|t\rangle_S = |\psi_S(t)\rangle$. Уравнение (1.24) называется уравнением движения в *шредингеровском представлении*.

Соотношение (1.17) определяет оператор эволюции или *пропагатор*, а $[H]$ – *генератор инфинитезимальных преобразований*, связанных с бесконечно малым временным сдвигом. Оператор $[H]$ называется *гамильтонианом* системы.

Картина Гейзенберга

Выше была представлена следующая картина. Состояние системы в некоторый заданный момент времени t определяется результатами всех возможных экспериментов над системой в этот же момент времени. Вся информация о системе содержится в векторе состояния $|t\rangle_S = |\psi_S(t)\rangle$. Эволюция же системы определяется тем, что вектор состояния зависит от времени и изменяется по закону, определяемому уравнением Шредингера (1.24). Операторы, соответствующие физическим наблюдаемым F_S , от времени не зависят; они одни и те же для всех моментов времени: $dF_S/dt = 0$. Эти условия определяют шредингеровскую картину движения, принадлежность к которой и отмечается индексом S .

Однако возможно и другое описание квантовомеханических систем. Хотя операторы в шредингеровском представлении и не зависят от времени, их средние значения в каком-либо состоянии в общем случае зависят от времени⁵⁾.

Обозначим среднее значение

$$\bar{F}_S = \langle F_S \rangle = \langle \psi_S(t) | F_S | \psi_S(t) \rangle, \quad (1.25)$$

тогда, согласно (1.24)

$$i \frac{d}{dt} \bar{F}_S = \overline{[F_S, H_S]} + i \frac{\partial \bar{F}_S}{\partial t}, \quad (1.26)$$

⁵⁾Здесь мы по-существу вводим непрерывную зависимость квантовомеханических характеристик от координатного времени

16.

где $[F_S, H_S] = F_S H_S - H_S F_S$ - коммутатор операторов F_S и H_S . Второй член в (1.26) описывает изменение среднего значения, связанное с явной зависимостью оператора F_S от t .

Введём шредингеровский оператор dF_S/dt , среднее которого совпадает с производной по времени от среднего значения $\overline{F_S}$

$$\overline{\frac{dF_S}{dt}} = \frac{d\overline{F_S}}{dt} \quad (1.27a)$$

Представим dF_S/dt в виде

$$\overline{\frac{dF_S}{dt}} = \frac{D\overline{F_S}}{Dt} + \frac{\partial\overline{F_S}}{\partial t} \quad (1.27b)$$

Таким образом, в соответствии с (1.26) и этот оператор представлен двумя слагаемыми⁶⁾. Здесь член с производной D/Dt описывает алгебраическую часть динамики, а член с производной $\partial/\partial t$ - внешние, не алгебраические изменения, связанные с явной зависимостью переменных от времени.

Пусть $|\Phi(t)\rangle$ вектор состояния, полученный с помощью преобразования $V(t)$

$$|\Phi(t)\rangle = V(t)|\psi_S(t)\rangle, \quad (1.28)$$

где $V(t)$ – унитарный оператор со свойствами

$$V(t)V^*(t) = V^*(t)V(t) = 1 \quad (1.29)$$

$$V^*(t) = V^{-1} \quad (1.30)$$

Из (1.24) и (1.28) следует, что $|\Phi(t)\rangle$ подчиняется следующему уравнению

$$i \frac{d}{dt} |\Phi(t)\rangle = \left[i \frac{d}{dt} V(t)V^{-1}(t) + V(t)H_S V^{-1}(t) \right] |\Phi(t)\rangle \quad (1.31)$$

Если выбрать $V(t)$, удовлетворяющее условию

$$i \frac{d}{dt} V(t)V^{-1}(t) + V(t)H_S V^{-1}(t) = 0, \quad (1.32)$$

⁶⁾ Нам будут встречаться и операторы, которые в шредингеровском представлении будут явно зависеть от времени. Не являясь, строго говоря, “настоящими” элементами динамической алгебры, их введение бывает оправдано. Полная производная таких объектов при этом будет обозначаться обычным символом d/dt ; алгебраическая составляющая полной производной связанная со скобочной операцией динамической алгебры Ли - D/Dt или точкой сверху, например - \dot{F}_S ; производная “по явной” зависимости от времени - $\partial/\partial t$.

то преобразованное состояние $|\Phi_H\rangle$ окажется независящим от времени, то есть $d|\Phi_H(t)\rangle/dt = 0$.

Выразим среднее значение оператора F_S через состояния $|\Phi_H\rangle$. Из (1.28), с учётом унитарности $V(t)$ следует:

$$|\psi_S(t)\rangle = V^{-1}(t)|\Phi_H\rangle \quad (1.33)$$

$$\langle\psi_S(t)| = \langle\Phi_H|\bar{V}(t) \quad (1.34)$$

Подставляя (1.33), (1.34) в (1.25), получаем

$$\bar{F}_S = \langle\Phi_H|V(t)F_S V^{-1}(t)|\Phi_H\rangle, \quad (1.35)$$

Определим оператор $F_H(t)$ согласно

$$F_H(t) = V(t)F_S V^{-1}(t), \quad (1.36)$$

так что $F_H(t)$ будет иметь то же среднее значение в состоянии $|\Phi_H\rangle$, что и оператор F_S в состоянии $|\psi_S\rangle$: $\langle F_S\rangle = \langle F_H\rangle = \langle F\rangle$

Дифференцируя (1.29) по времени, получаем соотношение

$$\frac{d}{dt}V(t)V^*(t) + V(t)\frac{d}{dt}V^* = 0 \quad (1.37)$$

Из (1.32) получаем

$$\frac{d}{dt}V(t) = iV(t)H_S \quad (1.38)$$

Дифференцируя (1.36) по времени, с учётом (1.37), (1.38) получаем:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt}F_H(t) = \\ & = \frac{d}{dt}V(t)F_S V^{-1}(t) + V(t)F_S \frac{d}{dt}V^{-1}(t) + V(t)\frac{\partial}{\partial t}F_S V^{-1}(t) = \\ & = \frac{d}{dt}V(t)V^{-1}(t)V(t)F_S V^{-1}(t) + V(t)F_S V^{-1}(t)V(t)\frac{d}{dt}V^{-1}(t) + \\ & + V(t)\frac{\partial}{\partial t}F_S V^{-1}(t) = \\ & = \frac{d}{dt}V(t)V^*(t)F_H(t) + F_H(t)V^{-1}(t)V(t)\frac{d}{dt}V^*(t) + \\ & + V(t)\frac{\partial}{\partial t}F_S V^{-1}(t) = \end{aligned}$$

18.

$$\begin{aligned}
 &= iV(t)H_S V^{-1}(t)F_H(t) - iF_H(t)V(t)H_S V^{-1}(t) + \\
 &+ V(t) \frac{\partial}{\partial t} F_S V^{-1}(t) = \\
 &= i\{H_H(t)F_H(t) - F_H(t)H_H(t)\} + V(t) \frac{\partial}{\partial t} F_S V^{-1}(t) = \\
 &= i[H_H(t), F_H(t)] + V(t) \frac{\partial}{\partial t} F_S V^{-1}(t)
 \end{aligned}$$

Здесь $[H_H(t), F_H(t)]$ - коммутатор операторов $H_H(t)$ и $F_H(t)$, определяемый соотношением

$$[H_H(t), F_H(t)] = H_H(t)F_H(t) - F_H(t)H_H(t) \quad (1.39)$$

Таким образом, в соответствии с (1.27), окончательно имеем

$$\begin{aligned}
 &\frac{d}{dt} F_H(t) = \\
 &= i[H_H(t), F_H(t)] + V(t) \frac{\partial}{\partial t} F_S V^{-1} = \dot{F}_H + V(t) \frac{\partial}{\partial t} F_S V^{-1} \quad (1.40a)
 \end{aligned}$$

$$\dot{F}_H = i[H_H(t), F_H(t)] \quad (1.40b)$$

Полученное уравнения (1.40b) вместе с условием независимости вектора состояния от времени $d|\Phi_H\rangle/dt = 0$ определяет гейзенберговскую картину описания движения. Вектор состояния в гейзенберговской картине один и тот же для всех моментов времени; напротив, операторы зависят от времени. Вектор состояния системы $|\Phi_H\rangle$ описывает всю историю системы, то есть результаты всех возможных экспериментов над системой на протяжении её истории. Однако, если выполнить реальный эксперимент над системой, то вектор её состояния изменится. Хотя гейзенберговский вектор состояния $|\Phi_H\rangle$ не зависит от времени, он может быть задан по результатам, которые он должен предсказывать для некоторого эксперимента в некоторый фиксированный момент времени. Например, мы можем выбрать вектор состояния так, чтобы он совпадал с со значением шредингеровского вектора состояния в момент времени $t = 0$, то есть $|\Phi_H\rangle = |\psi_S(0)\rangle$.

Для замкнутой системы, у которой гамильтониан H_S не зависит от времени, унитарный оператор, осуществляющий преобразование от шредингеровской картины к гейзенберговской, получается как решение (1.38) и представляется в виде:

$$V(t) = e^{iH(t-t_0)}, \quad (1.41)$$

где сделано предположение о совпадении картин в момент времени $t = 0$. Сравнивая (1.41) и (1.17), видим, что $V(t)$ связан с оператором эволюции или пропагатором⁷⁾. Отметим, что для замкнутой системы

$$H_S = H_H = H \quad (1.42)$$

Именно операторы, преобразованные $S \rightarrow H$, будут представлять динамическую алгебру Ли в картине Гейзенберга.

Картина Дирака. Представление взаимодействия

Пусть $|\Phi_S(t)\rangle$ будет зависящим от времени вектором состояния, описывающим развитие системы в картине Шредингера, и

$$i \frac{d}{dt} |\Phi_S(t)\rangle = H_S |\Phi_S(t)\rangle = (H_{0S} + V_S) |\Phi_S(t)\rangle \quad (1.43)$$

Определим вектор состояния в картине Дирака $|\psi_D\rangle$ (в представлении взаимодействия) соотношением

$$|\psi_D(t)\rangle = e^{iH_{0S}t} |\Phi_S(t)\rangle \quad (1.44)$$

В силу (1.43) $|\psi_D(t)\rangle$ удовлетворяет уравнению

$$i \frac{d}{dt} |\psi_D(t)\rangle = V_D(t) |\psi_D(t)\rangle \quad (1.45)$$

где

$$V_D(t) = e^{iH_{0S}t} V_S e^{-iH_{0S}t} \quad (1.46)$$

Таким образом, зависимость от времени вектора состояния в картине Дирака определяется оператором энергии взаимодействия $V_D(t)$.

Если $V_S = 0$, то есть в отсутствии взаимодействия, $|\psi_D(t)\rangle$, в силу (1.19) и (1.44), не зависит от времени и картина Дирака совпадает с картиной Гейзенберга.

Соотношение между операторами в картине Дирака $Q_D(t)$ и соответствующим ему оператором в картине Шредингера $Q_S(t)$ определяется так, чтобы

$$\langle \psi_D(t) | Q_D(t) | \psi_D(t) \rangle = \langle \Phi_S(t) | Q_S(t) | \Phi_S(t) \rangle \quad (1.47)$$

откуда, используя (1.44), получаем

⁷⁾ Отметим различие соотношений (1.41) и (1.17), что связано с условием применимости формулы (п.12)

20.

$$Q_D(t) = e^{iH_0st} Q_S e^{-iH_0st} \quad (1.48)$$

Поэтому зависимость от времени операторов в картине Дирака определяется невозмущённым гамильтонианом

$$i \frac{d}{dt} Q_D(t) = +[Q_D(t), H_0], \quad (1.49)$$

причём $H_0 = H_{0S} = H_{0D}$. Ниже мы будем опускать индекс D при векторах состояния и операторах в картине Дирака, так как в оставшейся части раздела мы будем иметь дело только с величинами, определёнными в этой картине.

Введём оператор сдвига во времени $U(t, t_0)$

$$U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t)\rangle, \quad (1.50)$$

который удовлетворяет уравнению

$$i \frac{d}{dt} U(t, t_0) = V(t)U(t, t_0), \quad (1.51)$$

и граничному условию

$$U(t, t) = 1 \quad (1.52)$$

При конечных t и t_0 этот оператор имеет свойства

$$U(t, t_0)U(t_0, t') = U(t, t') \quad (1.53)$$

и

$$U(t, t_0) = U^{-1}(t_0, t) = U^*(t_0, t) \quad (1.54)$$

которые могут быть доказаны тем же способом, что и для соответствующих операторов сдвига во времени в картине Шредингера. Для получения явного вида $U(t, t_0)$ вспомним, что в картине Шредингера, согласно (1.19),

$$|\Phi_S(t)\rangle = e^{-iH_S(t-t_0)} |\Phi_S(t_0)\rangle. \quad (1.55)$$

Заменяя состояния $|\Phi_S(t)\rangle$ соответствующими состояниями в картине Дирака, получаем

$$|\psi(t)\rangle = e^{iH_0t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0t} |\psi(t_0)\rangle. \quad (1.56)$$

где $H = H_0 + V(t)$, откуда

$$U(t, t_0) = e^{iH_0t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0t_0}. \quad (1.57)$$

Основными моментами этого раздела являются представление уравнений динамики квантовомеханических систем в картинах Шредингера (1.24), Гейзенберга (1.40b), Дирака (1.45) и (1.49).

С помощью уравнения Шредингера

$$i \frac{d}{dt} |\psi_S(t)\rangle = H_S |\psi_S(t)\rangle$$

динамика квантовомеханической системы описывается изменением вектора состояния системы $|\psi_S(t)\rangle$.

Уравнение Гейзенберга

$$\dot{F}_H = i[H_H(t), F_H(t)]$$

реализует описание динамики квантовомеханической системы с помощью описания временной зависимости наблюдаемых, оставляя при этом неизменными вектора состояний.

Особенностью описания квантовомеханических систем в картине Дирака является использование уравнений и Шредингера, и Гейзенберга. При этом уравнение Гейзенберга используется для описания невозмущённой динамики наблюдаемых $Q_D(t)$

$$i \frac{d}{dt} Q_D(t) = +[Q_D(t), H_0]$$

а уравнение Шредингера для описания возмущённого взаимодействием вектора состояния $|\psi_D(t)\rangle$

$$i \frac{d}{dt} |\psi_D(t)\rangle = V_D(t) |\psi_D(t)\rangle$$

Резюме к главе 1

Изначально нет никаких посылок, для того чтобы говорить о какой-либо локализации квантовомеханических объектов. В силу этого о пространственном сосуществовании этих объектов говорить не приходится, так же как и о постановке задач типа “задачи о встрече” локализованных тел в определённые моменты времени. В этом случае исчезает возможность реализовать процедуры синхронизации пространственно разнесённых часов, основополагающие для макроуровневого описания физических явлений.

Таким образом, распространение пространственно-временного описания на явления микроуровневой организации материи требует особого отношения, внимания и аргументированного ввода сопутствующих свойств.

Необходимость описания динамики поведения квантовомеханических объектов требует введения концепции времени, как упорядочивающего фактора. Отсутствие же подходящих процедур синхронизации, обуславливает необходимость обращения со временем не как с глобальной метрической макрохарактеристикой, а как с чисто “координатной”, то есть исключительно как с *упорядочивающим фактором аффинного свойства* для данного объекта. Именно в таком качестве эта характеристика и возникает впервые в соотношении (1.6)

$$|; t\rangle = U(t, t_0)|; t_0\rangle$$

Здесь оператор $U(t, t_0)$ фактически упорядочивает состояния $|; t\rangle$ системы. Упорядоченное множество t мы и будем называть *координатным временем* квантовомеханической системы.

Чисто формально, используя тейлоровское разложение (1.14) мы представили оператор $U(t, t_0)$, согласно (1.17), в виде

$$U(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)[H]}$$

где $[H] = i[D] = i d/dt$ - оператор дифференцирования, действующий в гильбертовом пространстве.

Ограничиваясь первыми двумя членами разложения, следуя (1.21) – (1.23) мы конкретизировали действие оператора $[H]$ на вектор состояния реальным оператором гильбертова пространства H , который назвали гамильтонианом и который полностью описывает *Квантовая механика (Принципы)*

квантовомеханическую систему. Динамика вектора состояния при этом описывается уравнением Шредингера (1.24)

$$i \frac{d}{dt} |\psi_S(t)\rangle = H_S |\psi_S(t)\rangle,$$

связывающим “бесконечно малые” изменения вектора состояния с конкретным видом гамильтониана и его действием на вектор состояния.

Однако понятие производной по времени наблюдаемой не может быть определено в квантовой механике в том смысле, в котором оно понимается в классической механике. Определение производной в классической механике связано с рассмотрением величины в два близких, но различных момента времени. Но в квантовой механике, где наблюдаемые описываются операторами гильбертова пространства, величина, имеющая определённое значение в один момент времени, может не иметь в следующий момент времени вообще никакого определённого значения. Просто-напросто один и тот же оператор в один момент времени может не коммутировать сам с собой в другой момент времени. Поэтому само отношение бесконечно малых величин, определяющих производную, теряет смысл. И здесь возникает особенность в представлении свойств времени, как упорядочивающего фактора для конкретной микросистемы, и эта особенность касается связи с макроскопическим временем.

Возможность дифференцируемости по времени связана с топологическими свойствами множества, которое мы определили как время. Однако всеми такими свойствами для дифференцируемости обладает множество, которое мы используем при рассмотрении временной зависимости в макромасштабах. Воспользуемся этим моментом и здесь.

Хотя в шредингеровской картине квантовой механики вся динамика описывается временной зависимостью векторов состояний, а операторы, представляющие наблюдаемые не зависят от времени, тем не менее, средние значения наблюдаемых должны меняться со временем. Это и обуславливает возможность перехода на макроуровневое наблюдение с введением стандартной процедуры дифференцирования и определением представления операции дифференцирования операторов гильбертова пространства. Согласно соотношению (1.26) имеем:

24.

$$i \frac{d}{dt} \overline{F}_s = \overline{[F_s, H_s]} + i \frac{\partial \overline{F}_s}{\partial t}$$

Здесь учтена возможность явной зависимости шредингеровского оператора от времени (появление второго члена). Хотя это обстоятельство и является искусственным, тем не менее, оно предусмотрено в общем выражении.

Таким образом, здесь мы зафиксировали факт проецирования микроизменений на макроуровень наблюдений или факт “рождения” с микроуровня макроскопической концепции времени, как результата усреднения характеристик микропроцессов.

Зависимость наблюдаемых от времени описывается в гейзенберговской картине квантовой механики, а производная от оператора по времени, не зависящего явно от t , определяется уравнением Гейзенберга

$$\dot{F}_H = i[H_H(t), F_H(t)]$$

Таким образом, уравнение Шредингера можно рассматривать как определение операции дифференцирования для векторов состояния, а уравнение Гейзенберга, как определение этой же операции для наблюдаемых. Решение же топологических проблем непрерывности времени и дифференцируемости по времени можно свести к алгебраическим задачам для операторов в пространстве векторов состояний.

Однако существует ещё один нетривиальный момент в определении динамики квантовомеханических процессов – это процессы рождения и уничтожения частиц. Моменты рождения и уничтожения частиц – это своеобразные временные точки бифуркации и именно они ставят вопросы топологии времени, как множества, вопросы временной локализации моментов рождения и уничтожения частиц. Возможности подойти “поближе”, *но только к рассмотрению* подобных вопросов, могут представиться при обсуждении решения динамического одночастичного уравнения во внешнем поле в представлении взаимодействия (Дирака).

Глава 2. Некоторые обобщения

Алгебраическое обобщение

Динамическая алгебра

Гейзенберговская картина позволяет наделить динамику квантовой механики структурой алгебры с операциями, обладающими групповыми свойствами. Основанием для этого служит основное уравнение (1.40b) для описания эволюции динамических переменных квантовой системы. Здесь рассматриваются замкнутые системы, гамильтониан и операторы наблюдаемых в шредингеровском представлении которых не зависят явно от времени.

Из уравнения (1.40b) можно увидеть возможность замены операции дифференцирования по времени на скобочную операцию, которую мы назвали коммутатором:

$$[a, b] = ab - ba \quad (2.1)$$

Согласно (1.40b), динамика любой наблюдаемой, характеризующей систему, и шредингеровское представление которой не зависит от времени, определяется коммутатором с гамильтонианом системы.

Существует математическая теорема^[1], согласно которой для частицы без внутренних степеней свободы, операторы, удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$[q_i, p_j] = i\delta_{ij}; \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad (2.2)$$

неприводимы, что означает, что полное гильбертово n -пространство не имеет подпространств, которые оставались бы инвариантными при действии этих операторов. Это свойство эквивалентно утверждению, что любой оператор, коммутирующий с q_i и p_j , кратен единичному и что *всякий оператор является функцией q_i и p_j* , то есть описание системы в терминах q_i и p_j , является полным. Эти операторы будут называться *основными канонически сопряженными переменными*.

Скобочную операцию, определяемую соотношением (2.1), можно рассматривать как специальную алгебраическую операцию над динамическими наблюдаемыми, которая связывает с каждой парой a

26.

и b новую динамическую наблюдаемую $[a, b]$. Из представления (2.1) легко проверить следующие свойства:

$$[a, b] = -[b, a] \quad (2.3)$$

$$[a, [b, c]] + [b, [c, a]] + [c, [a, b]] = 0 \quad (2.4)$$

$$[b, \alpha] = 0 \quad (2.5)$$

Здесь α – скалярный, не зависящий от q и p параметр. Любая абстрактная операция, обладающая свойствами (2.3) – (2.5) называется в алгебре *скобкой Ли*. Коммутатор (2.1) является частной “реализацией” абстрактной скобки Ли. Свойства скобочной операции сильно отличаются от свойств обычных операций сложения и умножения. Например, соотношение (2.3) показывает, что скобка некоммутативна. Из него следует, что

$$[a, a] = 0 \quad (2.6)$$

Соотношение (2.4) означает, что скобка также и не ассоциативна. Это соотношение называется *тождеством Якоби*.

Теперь мы можем убедиться в том, что введённая скобочная операция связана с другими алгебраическими операциями следующими правилами:

$$[(a + b), c] = [a, c] + [b, c] \quad (2.7)$$

$$[ab, c] = a[b, c] \quad (2.8)$$

$$[ab, c] = a[b, c] + [a, c]b \quad (2.9)$$

Следовательно, действие оператора $[\dots, c]$ на любую динамическую наблюдаемую аналогично действию дифференциального оператора первого порядка. Используя приведённые выше правила, можно выполнить скобочную операцию для любых двух элементов при условии, что известна “скобочная таблица умножения” основных элементов q и p , роль которой играют соотношения (2.2) для основного набора канонически сопряжённых переменных.

Множество всех динамических наблюдаемых будет именоваться *динамической алгеброй* \mathcal{S} . Причина этого названия

заключается в том, что можно комбинировать любые элементы \mathcal{S} посредством операций сложения, умножения и выполнения скобочной операции не выходя за пределы множества. Любое множество, на котором определены три перечисленные операции, формально называется алгеброй, или, точнее *алгеброй Ли*, а скобочная операция – *скобкой Ли*.

Представление о скобках Ли можно использовать для определения класса операторов, действующих на динамические наблюдаемые. Пусть a – фиксированная динамическая функция, принадлежащая \mathcal{S} . Мы определим оператор $[a]$, действующий на произвольный элемент b динамической алгебры \mathcal{S} посредством формулы

$$[a]b \equiv [b, a] \quad (2.10)$$

Центральную задачу динамики теперь можно сформулировать следующим образом:

Зная динамическую наблюдаемую $b(q, p, t_0)$ в момент времени t_0 , найти динамическую наблюдаемую $b(q, p, t)$ в момент времени t , если закон движения выражается уравнением (см. (1.40b)):

$$\dot{b}(t) = i[H, b(t)] \quad (2.11)$$

Разлагая $b(t)$ в ряд Тейлора в окрестности t_0 , получаем

$$\begin{aligned} b(t) &= b(t_0) + \frac{D}{Dt} b(t_0)(t - t_0) + \frac{1}{2} \frac{D^2}{Dt^2} b(t_0)(t - t_0)^2 + \dots = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{D^k}{Dt^k} b(t_0)(t - t_0)^k \end{aligned} \quad (2.12)$$

Используя (2.11) и определение (2.10), имеем

$$\frac{D}{Dt} b = \frac{1}{i} [b, H] = \frac{1}{i} [H]b \quad (2.13)$$

$$\frac{D^2}{Dt^2} b = \frac{D}{Dt} \frac{D}{Dt} b = \frac{D}{Dt} \frac{1}{i} [b, H] =$$

28.

$$= \frac{1}{i} [H] \frac{1}{i} [H] b = \left(\frac{1}{i}\right)^2 [H]^2 b \quad (2.14)$$

$$\frac{D^k}{Dt^k} b = \left(\frac{1}{i}\right)^k [H]^k b \quad (2.15)$$

Окончательно (2.12) представим в виде:

$$b(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t-t_0)^k}{(i)^k k!} [H]^k b(t_0) = e^{-i(t-t_0)[H]} b(t_0) = U(t, t_0) b(t_0), \quad (2.16)$$

где

$$U(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)[H]} \quad (2.16a)$$

Это уравнение даёт формальное решение начальной задачи для (2.11). Оператор $U(t, t_0)$ определяет преобразование от начального значения $b(t_0)$ к значению $b(t)$ наблюдаемой в момент времени t . Сравнивая (2.16a) с (1.17), видим, что он совпадает с определённым ранее пропагатором или оператором эволюции.

Отметим, что все скаляры α остаются неизменными при преобразовании $U(t, t_0)$. В самом деле, в силу уравнения (2.5)

$$e^{-i(t-t_0)[H]} \alpha = \alpha \quad (2.17)$$

Легко убедиться, что множество всех преобразований $U(t, t_0)$, соответствующих всем допустимым значениям t , обладает структурой группы. В самом деле, если последовательно осуществить преобразования $U(t_1, t_0)$ и $U(t, t_1)$, то результат будет такой же, как и при преобразовании $U(t, t_0)$. Данная операция, очевидно, ассоциативна; существует *единичный элемент* $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$ и *обратный элемент* $e^{i(t-t_0)[H]}$.

Формально множество $U(t, t_0)$ называется *однопараметрической непрерывной группой преобразований (группой Ли)*. Привилегированный элемент H называется *генератором или производящим элементом* группы.

Важную роль играет понятие *инфинитезимального преобразования* непрерывной группы: это предел преобразования $U(t, t_0)$ при $\delta t = t - t_0 \rightarrow 0$. Согласно (2.12)

$$b(t) = b(t_0) + \frac{\delta t}{i} [b, H] \quad (2.18)$$

Как вытекает из предшествующего рассмотрения, преобразование $U(t, t_0)$ связывает с каждым элементом b из \mathcal{S} другой элемент $b(t)$ из \mathcal{S} ; это преобразование задаёт отображение \mathcal{S} на себя и обладает одним свойством, которое придаёт ему особую важность: *оно сохраняет алгебраическую структуру \mathcal{S}* . Отображение, обладающее столь важным свойством, называется *автоморфизмом*. В явном виде это означает, что если x, y, z, \dots, v - элементы \mathcal{S} , связанные операциями данной алгебры, например

$$z = x + y \quad (2.19a)$$

$$w = \alpha x \quad (2.19b)$$

$$u = xy \quad (2.19c)$$

$$v = [x, y] \quad (2.19d)$$

те же самые соотношения сохраняются и между преобразованными элементами:

$$z_t = x_t + y_t \quad (2.20a)$$

$$w_t = \alpha x_t \quad (2.20b)$$

$$u_t = x_t y_t \quad (2.20c)$$

$$v_t = [x_t, y_t] \quad (2.20d)$$

Достаточно доказать эти соотношения для инфинитезимального преобразования (2.18). Например,

$$\begin{aligned} x_t y_t &= (x + t[x, H])(y + t[y, H]) = \\ &= xy + t[x, H]y + x[y, H] + O(t^2) = xy + t[xy, H] = u_t \end{aligned}$$

Здесь было использовано свойство (2.9). Аналогичным образом доказываются и другие формулы (2.20), с использованием алгебраических свойств скобки Ли (2.3) – (2.9).

Из сказанного следует, что рассматриваемые величины в момент времени t подчиняются тем же самым законам, что и в начальный момент времени t_0 , поскольку все уравнения содержат лишь четыре основные операции алгебры. Последний факт является выражением *инвариантности квантовомеханических законов относительно эволюции системы*.

Уместно поставить вопрос о том, является ли группа, порождённая гамильтонианом H , единственной инвариантой группой

30.

в квантовой механике. Ответ очевиден: нет. С этой точки зрения в гамильтониане нет ничего специфического. Фактически каждый элемент G из \mathcal{S} порождает однопараметрическую группу автоморфизмов динамической алгебры

$$x \rightarrow e^{-i\alpha[G]}, \quad \alpha - \text{вещественный параметр} \quad (2.21)$$

Таким образом, мы получаем бесконечное семейство преобразований, которое называется *группой канонических преобразований*. Каждое из них обладает теми же свойствами, что и $U(t, t_0)$. Следовательно, мы можем сформулировать фундаментальное свойство: *динамическая алгебра \mathcal{S} инвариантна относительно всякого канонического преобразования*.

Из инвариантности алгебры \mathcal{S} относительно канонических преобразований вытекает замечательное следствие, которое можно выразить следующим образом.

Пусть базисные переменные q и p преобразуются в $q(\alpha)$ и $p(\alpha)$ некоторым каноническим преобразованием, порождаемым элементом G :

$$e^{-i\alpha[G]}q = q(\alpha), \quad e^{-i\alpha[G]}p = p(\alpha).$$

Тогда имеется следующее совершенно общее соотношение, справедливое для любой динамической операторной функции:

$$e^{-i\alpha[G]}b(q, p) = b(q(\alpha), p(\alpha)) \quad (2.22)$$

Иными словами, при каноническом преобразовании произвольная динамическая функция переходит в ту же самую функцию преобразованных переменных.

Непрерывный спектр основных канонически сопряженных переменных⁸⁾

Пусть q и p – представляют пару основных канонически сопряженных динамических переменных с непрерывным спектром собственных значений, подчиняющихся коммутационным соотношениям (2.2), которые запишем в виде (одномерный случай):

$$[q, p] = i \quad (2.23)$$

⁸⁾ Заметим, что канонически сопряжённые переменные p и q пока никак не ассоциируются с пространственно-временными характеристиками.

Назовём представление гильбертова пространства в базисе q векторов q -представлением, а в базисе p векторов – p -представлением. Очевидно, что в q -представлении оператор q диагонален, а в p -представлении диагонален оператор p .

В q -представлении вектор состояния $|\psi\rangle$ задаётся компонентами, отнесёнными к базисным векторам $|q\rangle$, которые являются собственными векторами оператора q . Компоненты $\langle q|\psi\rangle$ имеют прямой физический смысл: $|\langle q|\psi\rangle|^2 dq$ есть вероятность того, что при измерении q значение этой переменной будет найдено между q и $q + dq$.

Собственные вектора $|q'\rangle$ удовлетворяют уравнению

$$q|q'\rangle = q'|q'\rangle \quad (2.24)$$

и нормируются на δ -функцию

$$\langle q'|q''\rangle = \delta(q' - q'') \quad (2.25)$$

Реальным же физическим состояниям $|\ \rangle$ соответствуют нормируемые векторы, являющиеся такой суперпозицией базисных векторов, при которой собственные значения “локализованы” в окрестности значения q'_0 :

$$|\ \rangle = \int dq' f(q' - q'_0) |q'\rangle, \quad (2.26)$$

где функция $f(q' - q'_0)$ как функция q' в основном сосредоточена в окрестности q'_0 . Норма вектора $|\ \rangle$ равна

$$\langle |\ \rangle = \int dq' f(q') f(q'), \quad (2.27)$$

так что состояние $|\ \rangle$ будет нормируемо, если f квадратично интегрируема. Условие полноты можно записать в виде:

$$\int |q'\rangle dq' \langle q'| = 1 \quad (2.28)$$

Вид оператора p в q -представлении получается с помощью перестановочного соотношения (2.23). Получим матричный элемент от (2.23). Из левой части равенства получаем

$$\langle q''|[q,p]|q'\rangle = \langle q''|qp - pq|q'\rangle = (q'' - q')\langle q''|p|q'\rangle \quad (2.29)$$

32.

Правая часть (2.23) с учётом нормировки (2.25) и известного соотношения $x\delta'(x) = -\delta(x)$ принимает вид

$$i\langle q''|q'\rangle = i\delta(q'' - q') = -i(q'' - q')\frac{\partial}{\partial q''}\langle q''|q'\rangle \quad (2.30)$$

Приравнивая правые части (2.29) и (2.30), получим матричный элемент оператора p в q -представлении

$$\langle q''|p|q'\rangle = -i\frac{\partial}{\partial q''}\langle q''|q'\rangle. \quad (2.31)$$

Аналогичным образом можно получить

$$\langle q|p|\psi\rangle = -i\frac{\partial\psi(q)}{\partial q}. \quad (2.32)$$

Интерпретация подобных соотношений будет приведена в главе 4

Аналогичным образом можно получить матричный элемент оператора q в p -представлении и вид оператора q :

$$\langle p''|q|p'\rangle = i\frac{\partial}{\partial p''}\langle p''|p'\rangle, \quad (2.33)$$

$$\langle p|q|\Phi\rangle = i\frac{\partial\Phi(p)}{\partial p}. \quad (2.34)$$

Унитарное преобразование от q -представления к p -представлению может быть найдено, если умножить

$$p|p'\rangle = p'|p'\rangle \quad (2.35)$$

на $\langle q'|$. Имеем:

$$\begin{aligned} p'\langle q'|p'\rangle &= \langle q'|p|p'\rangle = \int \langle q'|p|q''\rangle dq''\langle q''|p'\rangle = \\ &= -i\frac{\partial}{\partial q'}\langle q'|q''\rangle dq''\langle q''|p'\rangle = -i\frac{\partial}{\partial q'}\langle q'|p'\rangle \end{aligned}$$

Окончательно,

$$p'\langle q'|p'\rangle = -i\frac{\partial}{\partial q'}\langle q'|p'\rangle \quad (2.36)$$

Решая дифференциальное уравнение (2.36) относительно $\langle q'|p'\rangle$ с учётом нормировки (2.25) получим:

$$\langle q'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ip'q'} \quad (2.37)$$

Из соотношения (2.37) непосредственно следует, что волновая функция $\psi(q) = \langle q|\psi\rangle$ в q -представлении и волновая функция $\Phi(p) = \langle p|\psi\rangle$ в p -представлении связаны обычным преобразованием Фурье:

$$\psi(q) = \langle q|\psi\rangle = \int dp \langle q|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{ipq} \Phi(p) \quad (2.38)$$

Соотношения неопределённостей

Назовём неопределённостью ΔA динамической A величину, определяемую, как стандартное среднеквадратическое отклонение с помощью формулы

$$(\Delta A)^2 = \overline{(A - \bar{A})^2} = \overline{A^2} - \bar{A}^2 \quad (2.39)$$

Вводя для нормы вектора $|b\rangle$ обозначение

$$\|b\| = \sqrt{\langle b|b\rangle} \quad (2.40)$$

и используя свойство эрмитовости A , можно записать

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \overline{(A - \langle b|A|b\rangle)^2} = \langle b| [A - \langle b|A|b\rangle]^2 |b\rangle = \\ &= \langle [A - \langle b|A|b\rangle]b|[A - \langle b|A|b\rangle]b\rangle = \|[A - \langle b|A|b\rangle]b\|^2 \end{aligned} \quad (2.41)$$

Справедлива следующая теорема. Если операторы P и Q , представляющие две наблюдаемые, удовлетворяют соотношению

$$PQ - QP = -iI \quad (2.42)$$

то

$$\Delta P \Delta Q \geq \frac{1}{2} \quad (2.43)$$

Неравенство (2.43) называется соотношением неопределённостей Гейзенберга.

Докажем это неравенство. Введём обозначения

$$\hat{P} = P - \bar{P} = P - \langle b|P|b\rangle \quad (2.44)$$

$$\hat{Q} = Q - \bar{Q} = Q - \langle b|Q|b\rangle \quad (2.45)$$

Из (2.79) следует

$$\hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P} = -iI \quad (2.46)$$

34.

В силу (2.78)

$$\Delta P \Delta Q = \|\hat{P}b\| \cdot \|\hat{Q}b\| \quad (2.47)$$

Воспользуемся теперь хорошо известным неравенством Коши-Буняковского

$$\|u\| \cdot \|v\| \geq |\langle u|v\rangle|. \quad (2.48)$$

Знак равенства в (2.48) имеет место лишь в том случае, если $|u\rangle$ и $|v\rangle$ отличаются самое большое на постоянный комплексный множитель. Отсюда находим

$$\Delta P \Delta Q \geq |\langle \hat{P}b|\hat{Q}b\rangle| \quad (2.49)$$

а, следовательно, и

$$\Delta P \Delta Q \geq \text{Im}|\langle \hat{P}b|\hat{Q}b\rangle| \quad (2.50)$$

Применяя тождество $\text{Im}(\alpha + i\beta) = -\frac{i}{2}[(\alpha + i\beta) - (\alpha - i\beta)]$, используя тот факт, что $\langle u|v\rangle^* = \langle v|u\rangle$, и предполагая вектор состояния $|b\rangle$ нормированным, находим

$$\begin{aligned} \Delta P \Delta Q &\geq -\frac{i}{2}(\langle \hat{P}b|\hat{Q}b\rangle - \langle \hat{Q}b|\hat{P}b\rangle) = -\frac{i}{2}(\langle \hat{Q}\hat{P}b|b\rangle - \langle \hat{P}\hat{Q}b|b\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}\langle i(\hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P})b|b\rangle = \frac{1}{2}\|b\|^2 = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (2.51)$$

что и требовалось доказать. Из этого вывода следует, что произведение двух неопределённостей минимальным, если вектор состояния $|b\rangle$ уравнению

$$\hat{P}|b\rangle = i\gamma\hat{Q}|b\rangle \quad (2.52)$$

где γ - действительная положительная величина. Такие вектора состояний называются *оптимальными*.

Соотношение (2.11) позволяет заменить дифференцирование по времени алгебраической скобочной операцией Ли, а (2.16) - представить динамику дискретным рядом подобных операций, по существу квантуя время.

Представление динамической алгебры \mathcal{L} с помощью координат классического непрерывного 6-мерного фазового пространства (q, p) можно зафиксировать как факт распространения макроскопической концепции пространственных отношений на квантовомеханическом уровне описания микроявлений. Представление же скобочной операции (2.23) для основных канонически сопряжённых переменных в непрерывном спектре значений вполне реализует это.

Однако соотношения неопределённости Гейзенберга иллюстрируют противоречивость пространственно-временных отношений в микромире. Согласно (2.43) нельзя одновременно задать положение объекта и его скорость (импульс). Очевидно, что в этом случае описание пространственного движения с помощью непрерывных траекторий становится невозможным. Вызывает сомнения и возможность представления длин и промежутков времени в метрических шкалах измерения.

36.

Решение уравнения динамики в представлении взаимодействия

Найдём общее решение уравнения (1.45). Для этого рассмотрим эквивалентное ему интегральное уравнение

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle + (-i) \int_{t_0}^t dt_1 V(t_1) |\psi(t_1)\rangle \quad (2.53)$$

где $|\psi(t_0)\rangle$ – вектор состояния системы в начальный момент времени. Начальный вектор должен быть задан. Наша задача состоит в том, чтобы найти вектор состояния системы в любой последующий момент времени. Подставляя под знак интеграла в правой части (2.53) вместо $|\psi(t_1)\rangle$

$$|\psi(t_0)\rangle + (-i) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_2) |\psi(t_2)\rangle$$

получаем

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle = & |\psi(t_0)\rangle + (-i) \int_{t_0}^t dt_1 V(t_1) |\psi(t_0)\rangle + \\ & + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 V(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_2) |\psi(t_2)\rangle \end{aligned} \quad (2.54)$$

Последовательно продолжая эту процедуру, находим

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle = & [1 + (-i) \int_{t_0}^t dt_1 V(t_1) + \\ & + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 V(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_2) + \dots \\ & + (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 V(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_2) \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V(t_n) + \dots] |\psi(t_0)\rangle \end{aligned} \quad (2.55)$$

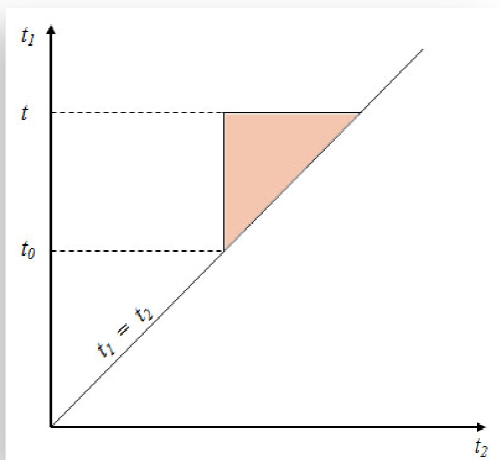
Таким образом, общее решение уравнения (1.45) получается в виде ряда по степеням гамильтониана взаимодействия. Мы не будем сейчас обсуждать вопросы сходимости этого ряда и возможность его

суммирования. Отметим только, что в случае, когда взаимодействие характеризуется малой константой, уже несколько членов ряда (2.55) могут давать решения с достаточно хорошей точностью.

Используя (1.50), запишем найденное решение в виде:

$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$. Тогда для $U(t, t_0)$ получаем

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 V(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_2) \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V(t_n) \quad (2.56)$$



Представим члены ряда (2.56) в более удобном виде. Рассмотрим сначала третий член ряда. Интегрирование выражения $V(t_1)V(t_2)$ ведётся по заштрихованной области (см. рис.) Вначале интегрирование производится по t_2 от t_0 до t_1 , а затем по t_1 от t_0 до t . Проинтегрируем $V(t_1)V(t_2)$ по той же области, но вначале по t_1 от t_2 до t , а затем по t_2 от t_0 до t . Предполагая, что значение интеграла не зависит от порядка интегрирования, находим

38.

$$\begin{aligned} & \int_{t_0}^t dt_1 V(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_2) = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_1) V(t_2) = \\ & = \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 V(t_1) V(t_2) = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 V(t_2) V(t_1) \end{aligned} \quad (2.57)$$

Последнее равенство получено путём переобозначения переменных интегрирования $t_1 \leftrightarrow t_2$. Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} & \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_1) V(t_2) = \\ & = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \left[\int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_1) V(t_2) + \int_{t_1}^t dt_2 V(t_2) V(t_1) \right]. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Это выражение может быть записано более компактно. Для этого введём *хронологический оператор Дайсона*:

$$P(V(t_1)V(t_2)) = \begin{cases} V(t_1)V(t_2) \text{ при } t_1 > t_2 \\ V(t_2)V(t_1) \text{ при } t_2 > t_1 \end{cases} \quad (2.59)$$

Оператор P , действуя на произведение зависящих от времени операторов, расставляет их так, чтобы временной аргумент убывал слева направо. Из (2.58) и (2.59) получаем

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_1) V(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 P(V(t_1)V(t_2)) \quad (2.60)$$

С помощью метода математической индукции можно доказать справедливость общего соотношения

$$\begin{aligned} & \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V(t_1) V(t_2) \dots V(t_n) = \\ & = \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n P(V(t_1)V(t_2) \dots V(t_n)) \end{aligned} \quad (2.61)$$

где хронологический оператор Дайсона P определён так, что

$$\begin{aligned}
 & P(V(t_1), V(t_2) \dots V(t_n)) = \\
 & = V(t_1), V(t_2) \dots V(t_n) \text{ при } t_1 > t_2 > \dots > t_n
 \end{aligned}
 \tag{2.62}$$

Учитывая (2.61) оператор $U(t, t_0)$ может быть записан в виде:

$$\begin{aligned}
 & U(t, t_0) = \\
 & = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n P(V(t_1), V(t_2) \dots V(t_n))
 \end{aligned}
 \tag{2.63}$$

Теперь сформулируем постановку основной задачи – задачи о *столкновении частиц*. Предположим, что начальная функция задана при $t_0 \rightarrow \infty$ и нас интересует состояние, в котором она окажется при $t \rightarrow \infty$. Из (1.50) получаем

$$|\psi(\infty)\rangle = U(\infty, -\infty)|\psi(-\infty)\rangle \tag{2.64}$$

Обозначим

$$S = U(\infty, -\infty) \tag{2.65}$$

Этот оператор носит название S -матрицы. Тогда

$$|\psi(\infty)\rangle = S|\psi(-\infty)\rangle \tag{2.66}$$

Итак, оператор S , действуя на начальный вектор состояния системы, заданный в бесконечно удалённом прошлом ($t \rightarrow -\infty$) даёт вектор состояния системы в бесконечно удалённом будущем ($t \rightarrow \infty$). Имеем

$$\begin{aligned}
 & S = \\
 & = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^{\infty} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n P(V(t_1), V(t_2) \dots V(t_n))
 \end{aligned}
 \tag{2.67}$$

Пусть $|\chi_n\rangle$ - некоторая полная система функций. Используя условие полноты (1.5) запишем (2.66) в виде

$$|\psi(\infty)\rangle = \sum_n |\chi_n\rangle \langle \chi_n | S |\psi(-\infty)\rangle \tag{2.68}$$

40.

Предположим, что в начальный момент система находилась в состоянии $|\chi_m\rangle$, то есть $\psi(-\infty) = |\chi_m\rangle$. Тогда

$$|\psi(\infty)\rangle = \sum_n |\chi_n\rangle \langle \chi_n | S | \chi_m \rangle \quad (2.69)$$

Матричный элемент $\langle \chi_n | S | \chi_m \rangle$ представляет собой, таким образом, амплитуду вероятности перехода из состояния $|\chi_m\rangle$ в состояние $|\chi_n\rangle$. В задачах о столкновении частиц в качестве полной системы функций $|\chi_n\rangle$ выбирается система функций, описывающих свободные частицы с определёнными импульсами. При этом в общем случае частицы в начальном и конечном состояниях могут быть и разными. Кроме того, в процессе столкновения могут образовываться и новые частицы.

Основной целью этого раздела является решение динамического уравнения (1.45) для частицы во внешнем поле в представлении взаимодействия и представление решения в виде (2.67). Это позволит в дальнейшем увидеть, как “появляются на свет” виртуальные частицы – внепространственно-временные объекты, носители внешнего поля.

Матрица плотности

Общие положения

Описание системы с помощью вектора состояний соответствует наиболее полному возможному в квантовой механике описанию.

Однако существует способ описания состояния квантовомеханического объекта, отличающийся от описания с помощью вектора состояния тем, что в нём не возникает произвола, связанного с фазой. Этот способ заключается в использовании эрмитовой матрицы $M(c)$, элементы которой выражаются через компоненты c_i соответствующего вектора состояния $|c\rangle$ в некотором ортонормированном базисе следующим образом:

$$M_{ik}(c) = c_i c_k^* \text{ или } M(c) = |c\rangle\langle c|. \quad (2.70)$$

Матрица $M(c)$ называется *матрицей плотности*. Рассмотрим этот способ описания.

Среднее значение $\bar{F} = \langle F \rangle$ наблюдаемой F квантовомеханической системы \mathcal{C} в состоянии $|c\rangle$ вычисляется следующим образом:

$$\bar{F} = \text{Sp}\{M(c)F\} = \text{Sp}\{FM(c)\} \quad (2.71)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \bar{F} &= \langle c|F|c\rangle = \sum_{i,k} \langle c|i\rangle\langle i|F|k\rangle\langle k|c\rangle = \sum_{i,k} F_{ik} |\langle k|c\rangle\langle c|i\rangle| = \\ &= \sum_{i,k} F_{ik} M_{ki}(c) = \sum_{i,k} \{FM(c)\}_{ii} = \text{Sp}\{FM(c)\} \end{aligned} \quad (2.72)$$

Здесь произведение вектора $|c\rangle$ на самого себя представлено, как оператор $M(c) = |c\rangle\langle c|$ с соответствующими матричными элементами $M_{ki}(c)$; F_{ik} - матричные элементы наблюдаемой F ; через $\text{Sp}O = \sum_i O_{ii}$ обозначен след оператора O (сумма диагональных элементов).

Очевидно, что условие нормировки вектора состояния $\langle c|c\rangle = 1$ эквивалентно условию

42.

$$\text{Sp}M(c) = 1 \quad (2.73)$$

Действительно,

$$\text{Sp}M(c) = \sum_i M_{ii}(c) = \sum_i c_i c_i^* = \langle c|c \rangle = 1 \quad (2.74)$$

Из определения (2.70) следует, что если матрица $M(c)$ описывает чистое состояние $|c\rangle$, то она удовлетворяет условию

$$M^2(c) = M(c) \quad (2.75)$$

Действительно, учитывая условие нормировки $\langle c|c \rangle = 1$, получаем

$$(M^2(c))_{ik} = \sum_j M_{ij}(c)M_{jk}(c) = (|c\rangle\langle c|c\rangle\langle c|)_{ik}$$

Таким образом, матрица плотности обладает свойствами проекционного оператора. Из того, что собственные значения проекционного оператора равны либо 0, либо 1, а $\text{Sp}M(c) = 1$, следует, что только одно собственное значение матрицы плотности принимает значение, равное 1, остальные равны 0. Это следует из того, что матрица $M(c)$ может быть приведена к диагональному виду унитарным преобразованием, оставляющим неизменным след, то есть

$$\text{Sp}(U^*M(c)U) = \text{Sp}(M(c)UU^*) = \text{Sp}M(c)$$

На геометрическом языке это означает, что $M(c)$ – оператор проектирования, который действуя на произвольный вектор $|a\rangle$, проектирует его на собственный вектор $|c\rangle$, принадлежащий собственному значению 1 оператора M .

Действительно, если $|c_r\rangle$ – собственный вектор $M(c_r)$, принадлежащий собственному значению 1, а $|c_s\rangle$ при $s \neq r$ – остальные собственные векторы, принадлежащие собственным значениям, равным 0, то есть

$$M(c_r)|c_s\rangle = |c_r\rangle\langle c_r|c_s\rangle = \delta_{rs}|c_r\rangle$$

то из соотношения

$$|a\rangle = \sum_s |c_s\rangle\langle c_s|a\rangle$$

немедленно следует, что

$$\begin{aligned}
 M(c_r)|a\rangle &= M(c_r) \sum_s |c_s\rangle \langle c_s|a\rangle = |c_r\rangle \langle c_r| \sum_s |c_s\rangle \langle c_s|a\rangle = \\
 &= |c_r\rangle \sum_s \langle c_r|c_s\rangle \langle c_s|a\rangle = |c_r\rangle \sum_s \delta_{rs} \langle c_s|a\rangle = |c_r\rangle \langle c_r|a\rangle
 \end{aligned}$$

Таким образом, оператор проектирования $M(c_r)$ играет роль своего рода символа селективного измерения, поскольку он выбирает из всех исследуемых объектов только те, у которых характеристика C имеет значение, равное c_r , и отбрасывает все остальные.

Среднее значение матрицы плотности $M(c)$ в состоянии $|a\rangle$ оказывается теперь равным вероятности обнаружить значение c наблюдаемой C , если известно, что величина A принимает значение a :

$$\overline{M(c)} = \langle a|M(c)|a\rangle = \langle a|c\rangle \langle c|a\rangle = |\langle a|c\rangle|^2 \quad (2.76)$$

Поскольку среднее значение эрмитова оператора $M(c)$ в состоянии $|a\rangle$, которое характеризуется $M(a)$, вычисляется по общей формуле (2.71), можно получить следующий результат:

$$|\langle a|b\rangle|^2 = \text{Sp}[M(a)M(b)] \quad (2.77)$$

Мы получили важный результат: *используя только матрицу плотности, можно получить полное физическое описание чистых состояний.*

Однако квантовомеханическое описание с помощью матрицы плотности обладает тем преимуществом, что оно позволяет придать смысл даже в тех случаях, когда объект не находится в чистом состоянии и когда матричные элементы M принципиально невозможно представить в виде, аналогичном (2.70). С помощью матрицы плотности можно описывать состояния, которые не характеризуются каким-либо вектором состояния. Такие состояния называются *смешанными*.

Необходимость описания с помощью матрицы плотности возникает в связи с рассмотрением следующей ситуации.

Рассмотрим систему \mathfrak{C} . Согласно квантовомеханическому подходу её состояние описывается с помощью вектора состояния, и это состояние называется *чистым состоянием*. Пусть нас интересует поведение не всей системы в целом, а лишь её части, то есть

44.

подсистемы \mathcal{B} . Тогда оставшуюся часть \mathcal{A} полной системы \mathcal{C} мы должны рассматривать как окружение, влияющее на эволюцию \mathcal{B} . Формально же отношение рассматриваемых подсистем \mathcal{A} и \mathcal{B} к системе \mathcal{C} можно записать так: $\mathcal{C} = \mathcal{A} \cup \mathcal{B}$.

Вектор состояния системы \mathcal{C} или её волновая функция не распадаются на произведение волновых функций подсистем \mathcal{A} и \mathcal{B} . Поэтому ни подсистема \mathcal{A} , ни \mathcal{B} не могут быть описаны с помощью векторов состояний. Для того чтобы волновая функция системы \mathcal{C} распалась (в данный момент времени) на такое произведение, измерение, в результате которого была создана такая конфигурация, должно полным образом описывать и систему \mathcal{C} , и подсистемы \mathcal{A} и \mathcal{B} . Для того же, чтобы волновая функция продолжала иметь такой вид и в будущие моменты времени, необходимо, также, чтобы подсистемы \mathcal{A} и \mathcal{B} замкнутой системы \mathcal{C} не взаимодействовали между собой. Однако, ни то, ни другое теперь не предполагается.

Рассмотрим ситуацию, когда измерения производятся над статистическим ансамблем, состоящим из N частиц, которые могут находиться в различных квантовых состояниях. Предположим, что каждая из N частиц может находиться в некотором числе возможных квантовых состояний и описывается матрицей плотности $M_n = M(b_n)$.

Максимальная информация относительно наблюдаемой A будет получена в этом случае, если средние значения \bar{A}_n наблюдаемой A усреднить ещё и по ансамблю, а именно

$$\bar{\bar{A}} = \sum_n p_n \bar{A}_n, \quad (2.78)$$

где p_n – вероятность найти значение \bar{A}_n в ансамбле

$$\sum_n p_n = 1, p_n \geq 0 \quad (2.79)$$

Формула, позволяющая вычислять среднее значение какой-либо характеристики в чистом состоянии при помощи матрицы

плотности, может быть обобщена на рассматриваемый случай, если ввести обобщённую матрицу плотности

$$M = \sum_n p_n M_n, \quad (2.80)$$

которая в силу соотношения (2.79) удовлетворяет условию

$$\text{Sp}M = 1 \quad (2.81)$$

и приводит к требуемому результату

$$\bar{A} = \text{Sp}(MA) = \sum_n p_n \text{Sp}(M_n A) = \sum_n p_n \bar{A}_n \quad (2.82)$$

Обобщённая матрица плотности (2.80) больше не удовлетворяет условию $M^2 = M$, за исключением случая, когда все M_n равны M . Таким образом, условие $M^2 = M$ является условием того, что система находится в чистом состоянии.

Чтобы убедиться в этом, рассмотрим систему, состоящую из двух подсистем, описываемых матрицами плотности M_1 и M_2 , так что

$$M = p_1 M_1 + p_2 M_2, \quad p_1, p_2 \geq 0, p_1 + p_2 = 1 \quad (2.83)$$

Квадрат этой матрицы

$$M^2 = p_1^2 M_1^2 + p_2^2 M_2^2 + p_1 p_2 (M_1 M_2 + M_2 M_1) \quad (2.84)$$

в силу тождеств

$$M_1 M_2 + M_2 M_1 = M_1^2 + M_2^2 - (M_1 - M_2)^2 \quad (2.85)$$

и

$$p_1^2 + p_1 p_2 = p_1 (p_1 + p_2) = p_1, \quad p_2^2 + p_1 p_2 = p_2 \quad (2.86)$$

может быть записан в виде

$$M^2 = p_1 M_1^2 + p_2 M_2^2 - p_1 p_2 (M_1 - M_2)^2 \quad (2.87)$$

Так как матрицы M_1 и M_2 каждая в отдельности удовлетворяют условию $M^2 = M$, находим

$$M - M^2 = p_1 p_2 (M_1 - M_2)^2 \quad (2.88)$$

Правая часть (2.88) представляет собой положительную матрицу; следовательно, M будет равна M^2 только в том случае, если $(M_1 - M_2)^2 = 0$. Квадрат эрмитовой матрицы обращается в нуль только тогда, когда все её элементы равны нулю. Поэтому необходимым

46.

условием выполнения равенства $M^2 = M$ является равенство $M_1 = M_2$. Доказательство для общего случая следует по индукции.

Заметим здесь, что в квантовой статистической механике выражение $\Sigma = -\overline{(\ln M)} = -\text{Sp}(M \ln M)$ определяет энтропию статистического ансамбля, описываемого матрицей плотности M . Энтропия обращается в нуль в случае чистого состояния, и только в этом случае.

Необходимо ещё раз отметить, что факторизация ансамбля, описываемого с помощью матрицы плотности, на подсистемы с определёнными параметрами в рамках описанной модели с операционалистской точки зрения становится фиктивной, если из эксперимента в принципе нельзя получить информации о подсистемах всего ансамбля. Например, n -частичную систему частиц нельзя рассматривать просто как систему, состоящую из n частиц. Это станет особенно очевидно при описании ансамбля в представлении чисел заполнения.

Уравнение динамики

Соотношение (1.27а) выражает основной постулат динамики в квантовой механике. Запишем его в виде:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{A}}{dt} &= i\overline{[H, A]} + \frac{\partial \bar{A}}{\partial t} = \\ &= i\langle b|[H, A]|b\rangle + \langle b|\frac{\partial A}{\partial t}|b\rangle = i\text{Sp}([H, A]) + \text{Sp}\left(\frac{\partial A}{\partial t}\right) \end{aligned} \quad (2.89)$$

В зависимости от того, представляется ли среднее значение \bar{A} наблюдаемой A в виде $\bar{A} = \langle b|A|b\rangle$ или $\bar{A} = \text{Sp}(AM)$, скорость изменения \bar{A} в каждом случае записывается по-разному, а именно

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \langle b|\frac{dA}{dt}|b\rangle + \left(\frac{d}{dt}\langle b|\right)A|b\rangle + \langle b|A\left(\frac{d}{dt}|b\rangle\right) \quad (2.90)$$

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \text{Sp}\left(\frac{dA}{dt}M\right) + \text{Sp}\left(A\frac{dM}{dt}\right) \quad (2.91)$$

Нетрудно видеть, что уравнение (2.88) включает в себя уравнения динамики всех рассмотренных картин: Шредингера, Гейзенберга и Дирака.

Из соотношений (2.89), (2.91) следует уравнение эволюции состояния объекта со временем на языке матрицы плотности в представлении Шредингера:

$$\frac{dM_S}{dt} = i[H, M_S] + \frac{\partial M_S}{\partial t} \quad (2.92)$$

Обобщение уравнений (1.24), (1.40b), (2.92), представляющих дифференциальные формы законов эволюции, называется теоремой Стоуна (1932).

Представим квантовомеханическую систему многих не взаимодействующих частиц со спином. Волновая функция такой системы получается с помощью известной процедуры. Сначала строится произведение одночастичных функций. Это допустимо, поскольку частицы не взаимодействуют друг с другом. Затем полученная мультипликативная волновая функция подвергается процедуре симметризации. Это делается для того, чтобы удовлетворить принципу тождественности частиц: для частиц с полуцелым спином результирующая функция должна быть антисимметричной, для частиц с целым спином – симметричной.

Что же произойдет в результате выполнения такой процедуры? Вначале мы четко знали, что имеем дело с системой, состоящей из n частиц. Однако в результате выполненной процедуры симметризации мы теряем информацию о числе частиц, составляющих многочастичную квантовомеханическую систему: частицы, оставляющие систему полностью тождественны, они неразличимы, их невозможно пересчитать! Многочастичная квантовомеханическая система перестала быть таковой. Мы “искалечили” её волновую функцию до неузнаваемости! Закономерны вопросы: А имеем ли мы дело со многими частицами? Не имеем ли мы дело с одночастичной системой в многосвязном пространстве? Таким образом, при рассмотрении многочастичных задач в квантовой механике необходимо решать весьма серьезные топологические вопросы структуры пространства или же найти такой способ описания систем, для которых не существует волновых функций

Более того, для систем взаимодействующих частиц процедура получения многочастичной волновой функции, подобная описанной выше, здесь просто-напросто неприменима. Необходима формализация описания как бы “многочастичных” систем, но без использования волновых функций. Именно эти возможности и предоставляет использование в описании квантовомеханических систем с помощью матриц плотности.

Резюме к главе 2

Алгебраические методы довольно широко используются при решении задач квантовой механики. Однако существует и веские аргументы, обосновывающие необходимость не только включения алгебраических методов, но и к построению самой архитектуры квантовой механики на основе алгебраических подходов. Алгебраический подход в квантовой теории – это не только и не столько определённый математический аппарат, но и ещё определённая физическая идеология. Коротко говоря, это есть направление в описании квантовых систем с помощью методов теории алгебр и в терминах *наблюдаемых* и *состояний* как основных исходных физических объектов микроуровневой организации материи. Связь же между микроуровневым описанием и макроуровневым описанием при этом рассматривается как активная процедура *наблюдения*, то есть проецирования микроизменений на макроуровень наблюдения.

Сутью этих подходов является представление динамической алгебры алгебраическими структурами с топологическими свойствами, отличающимися от классических, представление движений или эволюции квантовомеханических систем группами автоморфизмов с их инфинитезимальными генераторами (производящими операторами).

В своих главных чертах подход является прямым аналогом и продолжением алгебраических формулировок нерелятивистской квантовой механике, развивавшихся ещё с 20-х годов прошлого столетия фон Нейманом, Дираком, Йорданом, продолженных И.М. Гельфандом, М.А. Наймарком, Ж. Диксмье, Ж. Эмхом, У. Браттели, Д. Робинсоном ...

Мы из алгебраического подхода извлекли следующее.

Переход от шредингеровской картины описания квантовой механики к гейзенберговской картине даст возможность связать *координатное время* квантовой механики с *метрическим временем* классической (макро) механики (*Принцип соответствия*. См. главу 4). Эта возможность конкретизируется через определение оператора дифференцирования по времени в гильбертовом пространстве.

Через описание динамики векторов состояний или матрицы плотности мы ввели понятие координатного времени, выполняющего роль упорядочивающего фактора (аффинного), фиксирующего изменения состояния микросистемы.

И именно через описание динамики наблюдаемых (операторов) и через связь динамики микроизменений с макроизмеримыми величинами у нас и появляется возможность связать координатное время микроизменений квантовой механики с метрическим временем макроявлений классической физики.

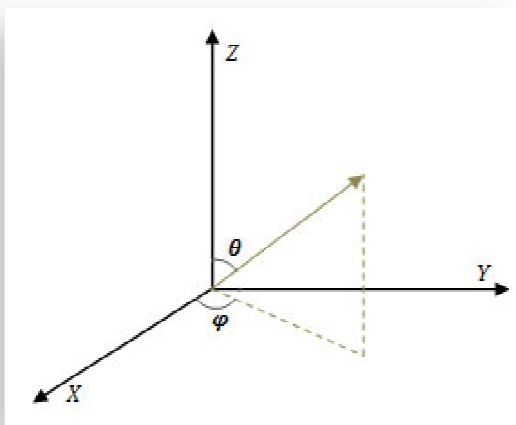
Реализация же (представление) скобочной операции динамической алгебры \mathcal{D} в непрерывном спектре 6 -мерного фазового пространства (q, p) даст нам возможность “выйти” в классическое трёхмерное и непрерывное пространство макромира.

Описание явлений микромира с помощью векторов состояний или матриц плотности в гильбертовом пространстве позволяет обобщить построение квантовой механики на основе алгебраического подхода. При этом пространственно-временные отношения в этом описании возникают как проекции или реализации динамической алгебры \mathcal{D} на макроуровень наблюдения: t – как результат проекции микроизменений, q – как проекции автоморфизмов динамической алгебры. Как результат в квантовую механику входят понятия непрерывных $3+1$ -мерных пространственно-временных отношений.

Резюмируя общую идеологию алгебраического построения квантового мира и проецирования его на макромир, можно по-сути сказать, что *макромир является трёхмерным “конденсатом” микромира.*

Глава 3. Спин

Спин квантовомеханической частицы представляет собой собственный момент количества движения, который измеряется в единицах постоянной Планка $\hbar = h/2\pi$. Особенность этой характеристики состоит в том, что проекция спина на направление внешнего магнитного поля принимает только дискретные значения. Взаимодействие частицы с внешним магнитным полем обусловлено появлением у заряженной частицы собственного магнитного момента, связанного с наличием спина.



Для электрона проекция спина на какое-либо направление может принимать только два значения – по направлению $(1/2)$, либо противоположное $(-1/2)$. Будем задавать это направление двумя полярными углами θ и φ . Спиновое состояние с определённым направлением проекции может быть реализовано в экспериментах типа Штерна-Герлаха путём приложения внешнего поля в направлении θ, φ и выделения соответствующей компоненты расщеплённого пучка. Это состояние может быть описано двумерным единичным комплексным вектором, обозначаемым следующим образом:

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

где комплексные числа α_1 и β_1 являются функциями углов θ и φ , определяющих направление спина. Величина a_1 представляет собой квантовое число, соответствующее проекции спина на направление θ, φ . Из условия нормировки вектора (3.1) следует

$$\langle a_1 | a_1 \rangle = |a_1|^2 + |\beta_1|^2 = 1 \quad (3.2)$$

Из (3.2) следует, что величинам α_1 и β_1 можно придать вероятностную интерпретацию в соответствии со следующим экспериментальным фактом.

Пусть пучок частиц со спином $1/2$, ориентированный вдоль направления θ, φ вновь пропускается через установку Штерна-Герлаха, но с магнитным полем, направленным вдоль оси Z . В результате этого измерения окажется, что спины одних частиц будут направлены вдоль оси Z , спины других - в противоположном. Соотношение между числом тех и других частиц может быть оценено только статистически. Тогда для описания результата такого эксперимента необходимо ввести два числа: первое - для оценки вероятности обнаружить частицу со спином вдоль оси Z , второе - для оценки вероятности обнаружить частицу с противоположным направлением спина. Введём вектор состояний

$$|a_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ и } |a_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Здесь вектор $|a_+\rangle$ описывает состояние, в котором проекция спина на направление Z принимает с достоверностью значение $+1$, а вектор $|a_-\rangle$ - состояние с противоположным направлением проекции спина, то есть в котором принимает значение -1 .

Скалярные произведения векторов $|a_1\rangle$ и $|a_+\rangle$, $|a_1\rangle$ и $|a_-\rangle$, принимают вид

$$\langle a_+ | a_1 \rangle = (1, 0) \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \alpha_1 \text{ и } \langle a_- | a_1 \rangle = (0, 1) \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \beta_1 \quad (3.4)$$

В соответствии с квантовомеханической интерпретацией, α_1 и β_1 представляют собой амплитуды вероятностей обнаружить в частицу в состоянии с проекцией спина в положительном направлении оси Z и в отрицательном направлении, соответственно, если первоначальным состоянием было состояние с проекцией спина, направленной вдоль направления θ, φ . Квадраты модулей этих величин $|\alpha_1|^2$ и $|\beta_1|^2$ представляют соответствующие вероятности,

52.

оцениваемые в эксперименте, что соответствует условию нормировки (3.2)

По отношению к направлению, задаваемому θ, φ необходимо ввести вектор

$$|a_2\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

характеризующий состояние со спином, антипараллельным направлению θ, φ и ортогональный вектору $|a_1\rangle$

$$\langle a_2 | a_1 \rangle = 0 \quad (3.6)$$

так как известно, что если частица находится в спиновом состоянии $|a_1\rangle$, то вероятность обнаружить противоположное направление спина равно нулю.

Введённые двухкомпонентные величины $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$, описывающие векторы состояний $|a\rangle$, называются *спинорами*.

Введём оператор проекции σ спина s

$$\sigma = 2s \quad (|s| = \frac{1}{2}) \quad (3.7)$$

Спиновому состоянию $|a_1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$ соответствует проекция на направление θ, φ со значением +1.

Пусть в опыте Штерна-Герлаха с направлением магнитного поля вдоль оси Z измеряется σ_3 – проекция спина на направление Z . Результатом измерения будет либо состояние $|a_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, либо состояние $|a_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, то есть будет найдено, что σ_3 принимает значения либо +1, либо -1 с вероятностями $|\alpha_1|^2$ и $|\beta_1|^2$, соответственно. Естественно ожидать, что среднее значение спина при поворотах системы координат преобразуется как вектор. Тогда величина $\bar{\sigma}_3$ будет равна просто проекции единичного вектора в направлении θ, φ на направление Z , то есть

$$\bar{\sigma}_3 = \cos \theta \quad (3.8)$$

Аналогично средние значения проекций спина на σ_1 и σ_2 в состоянии $|a_1\rangle$ будут равны

$$\bar{\sigma}_1 = \sin \theta \cos \varphi \quad (3.9)$$

Квантовая механика (Принципы)

$$\bar{\sigma}_2 = \sin \theta \sin \varphi \quad (3.10)$$

Представим эрмитовый оператор, соответствующий наблюдаемой проекции спина на направление θ и φ , в виде квадратной двухрядной матрицы

$$\sigma_{\theta,\varphi} = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21}^* & A_{22} \end{vmatrix} \quad (3.11)$$

(где A_{11} и A_{22} - действительные величины) с собственными векторами $|a_1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$ и $|a_2\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix}$, отвечающими собственным значениям $+1$ и -1 , соответственно:

$$\sigma_{\theta,\varphi}|a_1\rangle = +|a_1\rangle, \quad \sigma_{\theta,\varphi}|a_2\rangle = -|a_2\rangle \quad (3.12)$$

Записанные в компонентах уравнения (3.12) имеют вид

$$\begin{aligned} A_{11}\alpha_1 + A_{12}\beta_1 &= \alpha_1, & A_{11}\alpha_2 + A_{12}\beta_2 &= -\alpha_2 \\ A_{12}^*\alpha_1 + A_{22}\beta_1 &= \beta_1, & A_{12}^*\alpha_2 + A_{22}\beta_2 &= -\beta_2 \end{aligned} \quad (3.13)$$

Необходимым и достаточным условием существования ненулевых решений полученных систем уравнений является обращение в нуль их детерминантов:

$$\begin{aligned} A_{11}A_{22} - |A_{12}|^2 + 1 - A_{11} - A_{22} &= 0 \\ A_{11}A_{22} - |A_{12}|^2 + 1 + A_{11} + A_{22} &= 0 \end{aligned} \quad (3.14)$$

Последние уравнения эквивалентны следующим:

$$A_{11} + A_{22} = 0, \quad A_{11}A_{22} - |A_{12}|^2 + 1 = 0 \quad (3.15)$$

Из (3.15) следует, что $\sigma_{\theta,\varphi}$ можно представить в виде

$$\sigma_{\theta,\varphi} = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12}^* & -A_{11} \end{vmatrix}, \quad A_{11}^2 + |A_{12}|^2 = 1 \quad (3.16)$$

где A_{11} - действительная величина.

Для определения зависимости величин α_i, β_i , а также A_{11}, A_{12} от полярных углов θ, φ , рассмотрим сначала z -компоненту спина σ_3 . Соответствующий оператор получается из общего выражения (3.16), при $\theta = 0$. Запишем его в виде

$$\sigma_3 = \begin{vmatrix} Z_{11} & Z_{12} \\ Z_{12}^* & -Z_{11} \end{vmatrix}, \quad Z_{11}^2 + |Z_{12}|^2 = 1, \quad (3.17)$$

где Z - действительная величина.

54.

Матричные элементы Z_{11} и Z_{12} должны быть выбраны так, чтобы векторы состояний

$$|a_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ и } |a_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

были собственными векторами оператора σ_3 , отвечающими собственным значениям $+1$ и -1 , соответственно:

$$\sigma_3|a_+\rangle = +|a_+\rangle, \quad \sigma_3|a_-\rangle = -|a_-\rangle \quad (3.19)$$

то есть компоненты оператора σ_3 должны быть выбраны следующим образом:

$$Z_{11} = 1, Z_{12}^* = 0, Z_{12} = 0, -Z_{11} = -1 \quad (3.20)$$

Таким образом, σ_3 представляется матрицей

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Если в соответствии с (3.8) потребовать, чтобы среднее значение σ_3 в состоянии $|a_1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$ было равно $\cos \theta$, то получим следующее условие, налагаемое на значения величин α_1 и β_1 :

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_3 &= \langle a_1 | \sigma_3 | a_1 \rangle = (\alpha_1^*, \beta_1^*) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \\ &= |\alpha_1|^2 - |\beta_1|^2 = \cos \theta, \end{aligned} \quad (3.22)$$

что вместе с условием нормировки

$$|\alpha_1|^2 + |\beta_1|^2 = 1 \quad (3.23)$$

приводит к следующему решению:

$$\alpha_1 = e^{i\psi} \cos \frac{\theta}{2}, \quad \beta_1 = e^{i(\chi+\psi)} \sin \frac{\theta}{2} \quad (3.24)$$

где фазы χ и ψ произвольны. Поскольку собственный вектор вообще определён лишь с точностью до фазового множителя, одинакового для обеих компонент, фазу β_1 удобно записать в виде суммы $(\chi + \psi)$ и в дальнейшем положить фазу ψ равной нулю. При этом вектор $|a_+\rangle$ будет частным случаем вектора $|a_1\rangle$ при $\theta = 0$. Таким образом,

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\chi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Оставшуюся неизвестную фазу χ найдём из условий (3.9) и (3.10). Представляя операторы σ_1 и σ_2 в виде

$$\sigma_1 = \begin{vmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{21}^* & -X_{22} \end{vmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{vmatrix} Y_{11} & Y_{12} \\ Y_{21}^* & -Y_{22} \end{vmatrix} \quad (3.26)$$

$$X_{11}^2 + |X_{12}|^2 = 1, \quad Y_{11}^2 + |Y_{12}|^2 = 1 \quad (3.27)$$

Здесь X_{11} и Y_{11} - действительные величины. Вычисляя средние значения σ_1 и σ_2 в состоянии, описываемым вектором $|a_1\rangle$ согласно (3.25), и учитывая условия (3.9) и (3.10), получаем в результате тригонометрических преобразований

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_1 &= \langle a_1 | \sigma_1 | a_1 \rangle = X_{11} \cos \theta + \frac{1}{2} (X_{12} e^{i\chi} + X_{12}^* e^{-i\chi}) \sin \theta = \\ &= \sin \theta \cos \varphi \\ \bar{\sigma}_2 &= \langle a_1 | \sigma_2 | a_1 \rangle = Y_{11} \cos \theta + \frac{1}{2} (Y_{12} e^{i\chi} + Y_{12}^* e^{-i\chi}) \sin \theta = \\ &= \sin \theta \sin \varphi \end{aligned} \quad (3.28)$$

Так как функции $\sin \theta$ и $\cos \theta$ линейно независимы, то из последних соотношений следует, что

$$X_{11} = Y_{11} = 0 \quad (3.29)$$

поэтому, согласно (3.27), X_{12} и Y_{12} по модулю равны единице и, следовательно, представимы в виде

$$X_{12} = e^{i\xi}, \quad Y_{12} = e^{i\eta} \quad (3.30)$$

Подставив (3.30) в (3.28), получим уравнения

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} [e^{i(\chi+\xi)} + e^{-i(\chi+\xi)}] &= \cos \varphi \\ \frac{1}{2} [e^{i(\chi+\eta)} + e^{-i(\chi+\eta)}] &= \sin \varphi \end{aligned} \quad (3.31)$$

Первое из этих уравнений даёт

$$\chi + \xi = \varphi \quad (3.32)$$

Второе из уравнений (3.31) с учётом (3.32) принимает вид

$$\frac{1}{2} [e^{i(\varphi+\eta-\xi)} + e^{-i(\varphi+\eta-\xi)}] = \sin \varphi \quad (3.33)$$

Последнее равенство может иметь место только в том случае, если

$$\eta - \xi = -\frac{\pi}{2} \quad (3.34)$$

Таким образом, одна из фаз χ, η, ξ остаётся неопределённой.

56.

Если выбрать

$$\xi = 0 \quad (3.35)$$

то

$$\eta = -\frac{\pi}{2}, \quad \chi = \varphi \quad (3.36)$$

и, следовательно,

$$X_{12} = 1, \quad Y_{12} = -i \quad (3.37)$$

Рассуждая точно так же в случае вектора $|a_2\rangle$, окончательно получаем следующие результаты

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

$$|a_2\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

$$\sigma_1 = \left\| \begin{matrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{matrix} \right\|, \quad \sigma_2 = \left\| \begin{matrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{matrix} \right\|, \quad \sigma_3 = \left\| \begin{matrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{matrix} \right\| \quad (3.40)$$

Таким образом, так называемые матрицы Паули (3.40) являются частным случаем оператора спина, общий вид которого находится из уравнений (3.13), (3.16) при учёте (3.38) и (3.39):

$$\sigma_{\theta,\varphi} = \left\| \begin{matrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{matrix} \right\| \quad (3.41)$$

Можно заметить, что связь между оператором $\sigma_{\theta,\varphi}$ и его декартовыми компонентами $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ такая же, как между обычным вектором, направленным по оси с полярными углами θ, φ , и его проекциями в декартовой системе координат

$$\sigma_{\theta,\varphi} = \sigma_1 \sin \theta \cos \varphi + \sigma_2 \sin \theta \sin \varphi + \sigma_3 \cos \theta \quad (3.42)$$

Матрицы Паули (3.40) обладают следующими алгебраическими свойствами

$$\sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i = 2\delta_{ik} I, \quad \sigma_1 \sigma_2 - \sigma_2 \sigma_1 = 2i\sigma_3 \quad (3.43)$$

Вводя вектор $s_i = 1/2 \sigma_i$, получаем следующее коммутационное соотношение

$$s_1 s_2 - s_2 s_1 = i s_3 \quad (3.44)$$

Остальные коммутационные соотношения получаются циклической перестановкой индексов 1, 2, 3. Таким коммутационным соотношениям удовлетворяют любые три оператора, представляющие в квантовой механике момент количества движения.

Резюме к главе 3

Концепция спина введена в физику в 1925 году американскими учёными Дж. Уленбеком и С. Гаудсмитом, предположившими на основе анализа спектроскопических данных, что электрон можно рассматривать как “вращающийся волчок” с собственным механическим моментом $\hbar/2$ и собственным магнитным (спиновым) моментом, равным *магнетону* Бора $\mu_B = \hbar e/2mc$ (e и m – заряд и масса электрона). Таким образом, для спина электрона гиромагнитное отношение $\gamma = e/mc$ с точки зрения классической электродинамики является аномальным: для орбитального движения электрона и для любого движения классической системы заряженных частиц с данным отношением e/m оно в два раза меньше ($e/2mc$).

Учёт спина электрона позволил В. Паули сформулировать принцип запрета, утверждающий, что в произвольной физической системе не может быть двух электронов, находящихся в одном и том же квантовом состоянии. Наличие у электрона спина $1/2$ объяснило мультиплетную структуру атомных спектров, особенности расщепления спектральных линий в магнитном поле (эффект Зеемана), порядок заполнения электронных оболочек в многоэлектронных атомах, ферромагнетизм и многие другие явления.

Существование у протона спина $1/2$ постулировано на основе опытных данных английским физиком Д.М. Деннисоном. Экспериментальная проверка этой гипотезы привела к открытию сверхтонкой структуры атомных уровней энергии.

Спиновая характеристика ($1/2$) представляет наиболее простой пример дихотомической переменной, позволяющей понять логику выводов в квантовой механике. Кроме спина $1/2$ примерами дихотомических переменных являются заряд нуклона, четность совокупности пионов в системе центра масс, число фермионов в данном квантовом состоянии ...

Глава 4. Основные уравнения квантовой механики

Принцип соответствия

Алгебраическая формулировка динамики позволяет установить соответствие между классической и квантовой механикой, как между двумя представлениями динамической алгебры \mathcal{S} . Кроме того, что такое соответствие просто-напросто необходимо для рационального понимания физических явлений, оно же позволит устанавливать и функциональные зависимости между наблюдаемыми в операторной форме. Соответствие устанавливается между гамильтоновой формой классической механики и квантовомеханическим описанием динамики в картине Гейзенберга.

В гамильтоновой формулировке классической механики уравнение, описывающее изменение динамической переменной \hat{f} , независящей явно от времени, записывается в виде⁹⁾

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \{\hat{H}, \hat{f}\} \quad (4.1)$$

где

$$\{\hat{H}, \hat{f}\} = \sum_k \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_k} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{q}_k} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}_k} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{p}_k} \quad (4.2)$$

Выражение, определяемое (4.2) называется *скобкой Пуассона*.

Сравнивая (4.1) с (1.40b) и (2.11), можно заметить, что скобка Пуассона в классической гамильтоновой динамике играет роль оператора дифференцирования, как и коммутатор $[H, F]$ в квантовой механике в представлении Гейзенберга. Непосредственной же проверкой можно убедиться в том, что для скобки Пуассона выполняются свойства (2.3) – (2.9). Это означает, что наряду с коммутатором, определяемым в квантовой механике соотношением (2.1), скобка Пуассона (4.2) так же может рассматриваться как реализация скобочной операции Ли, а динамика Гамильтона в классической механике, как реализация динамической алгебры \mathcal{S} .

Уравнения для основных канонически сопряжённых переменных \hat{p}_i и \hat{q}_k , определяющих динамику системы согласно

⁹⁾ величины, соответствующие классической механике, отмечены “шляпками” сверху.

60.

законам классической механики и описываемой гамильтонианом \hat{H} , получаются из (4.1) и (4.2)

$$\hat{q}_k = \{\hat{H}, \hat{q}_k\}, \quad \hat{p}_k = \{\hat{H}, \hat{p}_k\} \quad (4.3)$$

а скобки Пуассона для p_i и q_k , определяются из (4.2) соотношениями

$$\{\hat{p}_i, \hat{q}_k\} = \delta_{ik} \quad (4.5)$$

Динамическая алгебра классической механики представляется действительными функциями вещественных переменных, а динамическая алгебра квантовой механики - самосопряжёнными операторами гильбертова пространства. Принцип ковариантности зависимостей между представлениями наблюдаемых динамической алгебры \mathcal{D} , формулируемый как существование автоморфизмов динамической алгебры, позволяет сформулировать *принцип соответствия* между классическим и квантовомеханическим способами описания физических объектов. Остановимся на этом соответствии подробнее.

Первое. Неприводимость представления операторов q и p квантовомеханического описания динамики и полнота описания классической динамики с помощью канонически сопряженных переменных \hat{q} и \hat{p} в гамильтоновом формализме систем без внутренних степеней свободы означает, что *любая* динамическая наблюдаемая может быть выражена через эти переменные.

Второе. Принадлежность основных канонических переменных к динамической алгебре означает, что для выражения динамических наблюдаемых достаточно трёх операций алгебры Ли: сложения, умножения и скобочной операции. При этом скобочная операция заменяет операцию дифференцирования и фактически по-новому трактует соотношение между бесконечно малыми величинами: бесконечно “близкое” состояние (арифметизуемое “временем”) и бесконечно близкое значение соответствующей динамической наблюдаемой.

Третье. Введённые алгебраические операции позволяют с помощью сходящихся степенных рядов устанавливать однозначное соответствие между функциональными зависимостями классического и квантовомеханического представлений динамики на уровне

тождества зависимостей между собственными значениями динамических наблюдаемых.

Четвёртое. Переход в функциональное пространство картины Шредингера осуществляется при конкретизации действия операторов основных канонических переменных на эти функции. В результате этой конкретизации получается основное уравнение квантовой механики для волновой функции, которое, собственно, и носит имя Шредингера, впервые получившего это уравнение. Уравнением для волновой функции определяется вся динамика квантовомеханической системы при заданном гамильтониане.

Волновой функцией называется проекция вектора состояния $|\psi(t)\rangle$ на конфигурационное пространство, натянутое на ортонормированный базис векторов $|q\rangle$

$$\psi(q, t) = \langle q|\psi(t)\rangle \quad (4.6)$$

Представим уравнение (1.24), записанное в векторном виде как уравнения для компонент конфигурационного пространства. Для этого умножим для этого обе части (1.24) на бра-вектор $\langle q|$. В результате получим:

$$i \langle q| \left[\frac{d}{dt} \right] \psi(t)\rangle = \langle q|H|\psi(t)\rangle. \quad (4.7)$$

Левая часть (4.7) принимает вид

$$i \langle q| \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = i \frac{d}{dt} \langle q|\psi(t)\rangle = i \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) \quad (4.8)$$

Здесь знак производной вынесен за скобки, поскольку базисные вектора конфигурационного пространства постоянны. Появление же частной производной по времени связано с тем, что дифференцирование должно производиться по переменной t , явно входящей в выражение волновой функции $\psi(q, t)$; сама же волновая функция будет также неявно зависеть от t , но через зависимость q от t .

Правая часть (4.7) преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle q|H|\psi(t)\rangle &= \int_{q'} \langle q|H|q'\rangle \langle q'|\psi(t)\rangle dq' = \\ &= \int_{q'} \psi(q', t) \langle q|H|q'\rangle dq' \end{aligned} \quad (4.9)$$

62.

Окончательно получаем

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = \int_{q'} \psi(q', t) \langle q | H | q' \rangle dq' \quad (4.10)$$

Таким образом, конкретный вид уравнения динамики в шредингеровской картине определяется свёрткой матричных элементов гамильтониана с волновой функцией системы.

Вычислим свёртку матричного элемента $\langle q | H | q' \rangle_\psi$ правой части (4.10) для оператора $H = p^2/2m$. Имеем:

$$\begin{aligned} \langle q | H | q' \rangle_\psi &= \int_{q'} \psi(q', t) \langle q | H | q' \rangle dq' = \\ &= \frac{1}{2m} \int_{q'} \psi(q', t) \langle q | p^2 | q' \rangle dq' = \\ &= \frac{1}{2m} \iint_{q' q''} \psi(q', t) \langle q | p | q'' \rangle dq'' \langle q'' | p | q' \rangle dq' \end{aligned} \quad (4.11)$$

Согласно (2.31) и (2.25)

$$\langle q | p | q' \rangle = -i \frac{\partial}{\partial q} \delta(q - q') \quad (4.12)$$

Используя это соотношение, из (4.11) получаем

$$\begin{aligned} \langle q | H | q' \rangle_\psi &= \\ &= \frac{1}{2m} \iint_{q' q''} dq' dq'' \psi(q', t) (-i) \frac{\partial}{\partial q} \delta(q - q'') (-i) \frac{\partial}{\partial q''} \delta(q'' - q') \end{aligned} \quad (4.13)$$

Выделим из (4.13) выражение, содержащее интегрирование по q' и преобразуем его:

$$\begin{aligned} &\int_{q'} dq' \psi(q', t) \frac{\partial}{\partial q''} \delta(q'' - q') = \\ &= - \int_{q'} dq' \psi(q', t) \frac{\partial}{\partial q'} \delta(q'' - q') = \\ &= \{-\psi(q', t) \delta(q'' - q')\}_{-\infty}^{+\infty} + \int_{q'} dq' \frac{\partial \psi(q', t)}{\partial q'} \delta(q'' - q') = \\ &= \frac{\partial \psi(q'', t)}{\partial q''} \end{aligned} \quad (4.14)$$

С учётом (4.14), продолжая аналогичные преобразования в (4.13), касающиеся интегрирования по q'' , получаем:

$$\begin{aligned}
 \langle q|H|q' \rangle_\psi &= \frac{i^2}{2m} \int_{q''} dq'' \frac{\partial \psi(q'', t)}{\partial q''} \frac{\partial}{\partial q} \delta(q - q'') = \\
 &= \frac{1}{2m} \int_{q''} dq'' \frac{\partial \psi(q'', t)}{\partial q''} \frac{\partial}{\partial q''} \delta(q - q'') = \\
 &= \frac{1}{2m} \left\{ \frac{\partial \psi(q'', t)}{\partial q''} \delta(q - q'') \right\}_{-\infty}^{+\infty} - \\
 &- \frac{1}{2m} \int_{q''} dq'' \frac{\partial^2 \psi(q'', t)}{\partial q''^2} \delta(q - q'') = - \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi(q, t)}{\partial q^2} \quad (4.15)
 \end{aligned}$$

Окончательно имеем

$$\begin{aligned}
 \langle q|(p^2/2m)|q' \rangle_\psi &= \int_{q'} \psi(q', t) \langle q|(p^2/2m)|q' \rangle dq' = \\
 &= - \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi(q, t)}{\partial q^2} \quad (4.16)
 \end{aligned}$$

Результату применения гамильтониана H в конфигурационном пространстве на волновую функцию Шредингера можно придать и другой вид. Подставляя (4.8) в (4.7), получаем

$$\langle q|(H|\psi(q, t)) = \langle q|i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(q, t)) = i \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) \quad (4.17)$$

Аналогичное выражение для оператора импульса p можно получить, используя те же методы, что и при получении (4.16)

$$\langle q|p|\psi(q, t)) = -i \frac{\partial}{\partial q} \psi(q, t) \quad (4.18)$$

Кроме того, очевидно

$$\langle q|f(q)|\psi(q, t)) = f(q)\psi(q, t), \quad (4.19)$$

где $f(q)$ – функция от q .

Полученные результаты дают возможность установить соответствие между классическим описанием динамики и её квантовомеханическим аналогом.

Принцип соответствия позволяет переносить функциональные зависимости между динамическими переменными классической механики, представляемые действительными функциями на функциональные зависимости между динамическими

64.

наблюдаемыми, представляемые эрмитовыми операторами, при выполнении следующего соответствия между скобкой Пуассона классической механики и коммутатором квантовой механики:

$$\{ \quad \} \Rightarrow -i[\quad] \quad (4.20)$$

В этом случае соответствие между коммутационными соотношениями для основных канонически сопряжённых можно записать в виде:

$$\{\hat{p}_i, \hat{q}_k\} = \delta_{ik} \Rightarrow [q_i, p_k] = i\hbar\delta_{ik}, \quad (4.21)$$

а соответствие между уравнениями динамики приобретает форму:

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \hat{f} = \{\hat{H}, \hat{f}\} \Rightarrow \frac{Df}{dt} = \dot{f} = \frac{i}{\hbar}[H, f] \quad (4.22)$$

Появление множителя i в формулах обусловлено тем, что коммутатор эрмитовых операторов является антиэрмитовым оператором, в то время, как все динамические наблюдаемые в классической механике являются действительными.

Константа \hbar , имеющая размерность действия ($p \cdot q$) приводит соотношения к традиционной системе единиц измерения (*cgs*); в полученных ранее формулах p и q были безразмерными величинами, что формально означало $\hbar = 1$.

Именно здесь (4.21) мы наблюдаем возможность “превращения” одной из канонически сопряжённых переменных - координатной переменной q - в метрическую пространственную макрохарактеристику.

При установлении соответствия между функциональными зависимостями классической механики и квантовой механики с помощью принципа соответствия необходимо обращать внимание на проблему, которая возникает при умножении операторов. Вообще говоря, произведение некоммутирующих операторов не является эрмитовым. Например,

$$(b^2c)^* = c^*b^*b^* = cb^2 \neq b^2c \quad (4.23)$$

В этих случаях для классических выражений всегда можно построить симметризованные варианты и после этого находить для них квантовомеханические аналоги. Однако даже эти процедуры симметризации неоднозначны. В самом деле, в вышеприведённом примере можно рассмотреть два симметризованных произведения:

$$\frac{1}{2}(b^2c + cb^2); \quad bcb \quad (4.24)$$

Оба этих выражения (или их линейная комбинация) представляют эрмитовый оператор и могут быть связаны с классической динамической функцией b^2c . Однозначных правил для осуществления подобных процедур симметризации не существует, поэтому выбрав какую-либо комбинацию, необходимо дополнительно проверить соответствие левой и правой частей равенства с помощью разложения их в степенной ряд.

Приведём пример. При оперировании с экспоненциальными функциями от операторов всегда требуется большая осторожность для правильного учёта некоммутативности. В частности, экспонента суммы операторов *не равна* произведению отдельных экспонент. Если коммутатор операторов b и c является действительным числом (c -числом), справедлива следующая формула:

$$\exp(b + c) = \exp(b) \exp(c) \exp\left(-\frac{1}{2}[b, c]\right) \quad (4.25)$$

Эту формулу можно проверить разложением в ряд. Из неё вытекает следствие

$$\exp(b) \exp(c) = \exp(c) \exp(b) \exp(-[c, b]) \quad (4.26)$$

Алгебраический подход дал возможность построить общую архитектуру динамических закономерностей в физике в виде динамической алгебры \mathcal{S} , что позволило в рамках этой алгебры описывать как классическую динамику, так и квантовую. Этим двум описаниям соответствуют два представления алгебры с помощью функций и операторов. Связь между двумя представлениями динамической алгебры \mathcal{S} осуществляется с помощью принципа соответствия

Принцип же соответствия фактически реализует идею двухуровневого описания сложных систем, у которых стохастический характер поведения на микроуровне сочетается с регулярным проявлением изменений на макроуровне

В приложении 4 описывается идеология подобного рассмотрения в задачах, уже не физического содержания. Пример реализация динамической алгебры в физике позволит по-новому взглянуть на подобные задачи уже для произвольных двухуровневых иерархических систем.

Нерелятивистское уравнение Шредингера

Вывод уравнения

Следуя принципу соответствия, запишем гамильтониан классической нерелятивистской частицы во внешнем поле $V(t)$ в операторном виде

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (4.27)$$

и подставим в (1.24). Имеем:

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left\{ \frac{p^2}{2m} + V(q) \right\} |\psi(t)\rangle, \quad (4.28)$$

Умножая обе части (4.28) на $\langle q|$, используя (4.16) и (4.19), получим

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) &= \langle q| \left\{ \frac{p^2}{2m} + V(q) \right\} |\psi(t)\rangle = \\ &= -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi(q, t)}{\partial q^2} + V(q) \psi(q, t) \end{aligned}$$

Окончательно,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi(q, t)}{\partial q^2} + V(q) \psi(q, t) \quad (4.29)$$

Обобщая это уравнение для трёхмерного случая, получаем в системе cgs (появление постоянной Планка \hbar)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{q}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{q}} \psi(\mathbf{q}, t) + V(\mathbf{q}), \quad (4.30)$$

Уравнение (4.30) называется *нерелятивистским волновым уравнением Шредингера в координатном представлении*.

Принципу соответствия можно придать форму и более практическую для применения. Порядок получения волнового уравнения (4.30) можно кратко описать так:

- i. Умножим соотношение, связывающее энергию и импульс частицы

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{q}) \quad (4.31)$$

на волновую функцию $\psi(\mathbf{q}, t)$

ii. Произведём замену

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (4.32)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla \quad (4.33)$$

iii. В результате получим уравнение в виде (4.30)

Возможность осуществления такой процедуры основывается на принципе соответствия и на полученных формулах (4.17), (4.18), (4.19), описывающих результаты действия операторов энергии, импульса и координат на волновую функцию в конфигурационном пространстве (координатном представлении).

Уравнение непрерывности

Важным соотношением в вероятностной интерпретации квантовой механики является уравнение непрерывности. Выведем это уравнение.

Несколько замечаний, следующих из предыдущего рассмотрения.

Скалярное произведение $\langle \varphi | \psi \rangle$ векторов состояний $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ следующим образом выражается через волновые функции $\psi(q)$ и $\varphi(q)$:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \langle \varphi | q \rangle \langle q | \psi \rangle dq = \int \varphi^*(q) \psi(q) dq \quad (4.34)$$

Это скалярное произведение интерпретируется как амплитуда вероятности перехода $|\psi\rangle \rightarrow |\varphi\rangle$ при измерении $|\varphi\rangle$ в состоянии $|\psi\rangle$

Из этого следует, что $|\langle q | \psi \rangle|^2 dq$ будет представлять собой вероятность локализовать квантовый объект в элементе dq , а $|\langle \mathbf{q} | \psi \rangle|^2 dV$ - вероятность локализовать квантовый объект в объёме dV , ($dV = dq_1 dq_2 dq_3$). Таким образом, интеграл

$$\int_V |\langle \mathbf{q} | \psi \rangle|^2 dV = \int_V |\psi|^2 dV$$

будет представлять собой вероятность локализовать квантовый объект в пределах конечного объёма V .

Вернёмся к выводу уравнения непрерывности. Вычислим производную от этой вероятности по времени. Имеем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V |\psi|^2 dV &= \int_V \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dV = \\ &= \int_V (\psi H \psi^* - \psi^* H \psi) dV \end{aligned} \quad (4.35)$$

68.

Используя соотношение, следующее из (4.30)

$$H = H^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{q}) \quad (4.36)$$

и известную формулу векторного анализа

$$\psi\Delta\psi^* - \psi^*\Delta\psi = \operatorname{div}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) \quad (4.37)$$

получим

$$\frac{d}{dt} \int_V |\psi|^2 dV = - \int_V \operatorname{div} \mathbf{j} dV \quad (4.38)$$

где \mathbf{j} – обозначает вектор

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) = \frac{1}{2m} (\psi\mathbf{p}\psi^* - \psi^*\mathbf{p}\psi) \quad (4.39)$$

Если представить ψ в виде

$$\psi = |\psi|e^{i\alpha} \quad (4.40)$$

то

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} |\psi|^2 \nabla\alpha \quad (4.41)$$

Интеграл от $\operatorname{div} \mathbf{j}$ может быть преобразован, согласно теореме Гаусса-Остроградского, в интеграл по замкнутой поверхности, окружающей объём V :

$$\frac{d}{dt} \int_V |\psi|^2 dV = - \oint_S \mathbf{j} ds \quad (4.42)$$

Из (4.42) можно видеть, что вектор \mathbf{j} может рассматриваться как вектор *плотности потока вероятности* или просто *плотностью потока*. Интеграл от этого вектора по поверхности есть вероятность того, в течение единицы времени частица пересечёт эту поверхность. Вектор \mathbf{j} и плотность вероятности $|\psi|^2$ удовлетворяют *уравнению непрерывности*:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0 \quad (4.43)$$

Концепция частицы в нерелятивистской квантовой механике

В классической механике скорость частицы связана с её импульсом соотношением $\mathbf{p} = m \mathbf{v}$. Естественно ожидать существование такой связи и для операторов в квантовой механике. Действительно, учитывая (4.21) и (4.36) имеем в одномерном случае:

$$\begin{aligned}
 \dot{q} &= \frac{1}{i\hbar} (qH - Hq) = \frac{1}{i\hbar} \left[q \left(\frac{q^2}{2m} + V \right) - \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) q \right] = \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{qp^2}{2m} + qV - \frac{qp^2}{2m} - Vq \right] = \\
 &= \frac{1}{2mi\hbar} (qp^2 - p^2q) = \frac{1}{2mi\hbar} (qpp - ppq) = \\
 &= \frac{1}{2mi\hbar} [(pq + i\hbar)p - ppq] = \\
 &= \frac{1}{2mi\hbar} (pqp + i\hbar p - ppq) = \frac{1}{2mi\hbar} [i\hbar p + p(qp - pq)] = \\
 &= \frac{1}{2mi\hbar} (i\hbar p + pi\hbar) = \frac{p}{m}
 \end{aligned}$$

то есть $v = \dot{q} = p/m$ или, обобщая на трёхмерный случай

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{q}} = \frac{\mathbf{p}}{m} \quad (4.44)$$

Далее, вычислим производную \dot{v} . Аналогично предыдущим вычислениям имеем:

$$\begin{aligned}
 \dot{v} &= \frac{1}{i\hbar} (vH - Hv) = \\
 &= \frac{1}{i\hbar m} \{pH - Hp\} = \frac{1}{i\hbar m} \left\{ p \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) - \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) p \right\} = \\
 &= \frac{1}{i\hbar m} \left\{ \frac{p^3}{2m} + pV - \frac{p^3}{2m} - Vp \right\} = \frac{1}{i\hbar m} \{pV - Vp\}
 \end{aligned}$$

Используя соотношение (п.14), окончательно получаем для трёхмерного случая

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{q}) \quad (4.45)$$

Результаты (4.44) и (4.45) находятся в полном соответствии с принципом соответствия, устанавливающим связь между классическим и квантовомеханическим способами описания динамики.

Рассмотрим простую модель объекта классической механики. Пусть это будет некоторая локализованная (точечная) частица во внешнем поле: точечный объект в непрерывном пространстве-времени, на который воздействует некоторое поле $V(\mathbf{q})$. Основными характеристиками этого объекта являются: координаты (\mathbf{q}), скорость (\mathbf{v}), масса (m), заряд (e), импульс (\mathbf{p}), энергия (E). Состояние классической частицы можно рассматривать, как её местоположение в непрерывном пространстве, а поведение – как изменение этого местоположения в процессе движения, упорядочиваемое непрерывной последовательностью, называемой временем. Динамика такого поведения частицы описывается уравнением:

$$\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{F}} = -\nabla \hat{V}(\hat{\mathbf{q}}) \quad (4.46)$$

Связь между основными динамическими характеристиками частицы устанавливается соотношениями:

$$\hat{\mathbf{v}} = \dot{\hat{\mathbf{q}}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \quad (4.47)$$

$$\hat{E} = \frac{m\hat{\mathbf{v}}^2}{2} + \hat{V}(\hat{\mathbf{q}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\mathbf{q}}) = \hat{H}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}) \quad (4.48)$$

По форме гамильтониан классической частицы (4.48) совпадает с гамильтонианом квантовомеханической системы (4.27), уравнение движения (4.46) - с уравнением (4.45), связь между импульсом и скоростью (4.47) – с (4.44). Это совпадение обусловлено действием принципа соответствия, сформулированным, исходя из алгебраической формы законов динамики. Различие же между двумя описаниями обусловлено различием представлений физических наблюдаемых динамической алгебры \mathcal{S} .

Классическому описанию соответствует представление алгебры динамических наблюдаемых *числами* и *функциями* в функциональном пространстве. При этом наблюдаемые могут совершенно независимо друг от друга принимать свои значения. Например, возможность независимо принимать значений для скорости и координаты позволяет говорить о непрерывном движении частицы по определённой траектории, определяемой решением

уравнения движения (4.46), представляющим некоторую функциональную зависимость $q(t)$.

Квантовомеханическому описанию соответствует представление динамических наблюдаемых *операторами в векторном пространстве*. Это представление существенно меняет не только картину движения и уже не частицы, а квантовомеханического объекта, но и ставит вопросы о последовательном *существовании* фиксируемых состояний (временной эволюции), казалось бы одного и того же генетически тождественного самому себе объекта или о *сосуществовании* в становлении уже разных объектов. Дело в том, что локализованный квантовомеханический объект с $\Delta q = 0$, в силу соотношения неопределённостей Гейзенберга, будет иметь неопределённость в значении импульса $\Delta p = \infty$ (или $\Delta v = \infty$). Это означает, что для локализованной в какой-то момент частицы невозможно предсказать её положение в следующий момент, а движения такого объекта невозможно представить траекторией.

В классической механике генетическое тождество частицы самой себе обеспечивается именно непрерывностью её движения по траектории. Кроме того, двигающемуся классическому объекту для его однозначной идентификации в процессе движения можно добавить дополнительную характеристику (например, “покрасить”). При квантовомеханическом же описании критерий непрерывности движения теряется, а добавить дополнительные характеристики просто невозможно – набор квантовых чисел фиксирован. Генетическое тождество объекта в квантовой механике обеспечивается волновой функцией. Однако, хотя волновая функция объекта и обеспечивает целостность описания объекта и его генетическое тождество самому себе, тем не менее, она не наблюдаема, а потому не пригодна для самоидентификации объекта при наблюдении в движении. Очевидно, что наблюдение при таких условиях будет сопровождаться потерей информации об объекте.

И здесь мы фактически видим следующее: *пространственная локализация точечного объекта не совместима с последующей возможностью наблюдения непрерывного в обычном понимании движения*, поскольку исчезает понятие траектории, как упорядоченной конструкции из “близких” точек. Невозможность наблюдения траекторий ведёт к потере информации о генетическом средстве последовательных положений точечного объекта. Для

72.

многочастичных задач встаёт вопрос: та частица или не та будет представлена в последующем состоянии? Несуществование траекторий движения не позволяет поставить и задачу о встрече двух точечных частиц, что ставит под сомнение рациональную осмысленность связки - локализованная (точечная) частица и непрерывное движение в квантовой механике.

Далее, составные физические тела, представляемые как “аддитивная” композиция простых и дискретных объектов, не могут быть геометрически устойчивыми. *При микроуровневом описании исчезает понятие физического тела с устойчивой геометрической формой.* Но в этом случае становится невозможным построить и систему координат на микроуровне, как устойчивой системы отсчёта пространственных отношений микрообъектов. Все пространственные зависимости должны будут отсчитываться от системы координат уже “неродного” макроуровневого описания. А это значит, что координатное представление квантовой картины, безусловно, должно быть связано с макроуровневым описанием, то есть описанием, свойственным классической физике, а измерение координаты q необходимо рассматривать, как проецирование квантового состояния на определённую позицию макроуровневого описания и такое проецирование всегда будет сопровождаться потерей информации о состоянии микрообъекта.

Таким образом, попытка определить очередное положение точечной частицы в бесконечно близкий момент времени с помощью традиционной парадигмы непрерывности движения, очевидно, терпит неудачу вследствие действия соотношения неопределённостей между координатой и импульсом частицы. “Камнями преткновения” становятся такие понятия, как локализация и арифметизация близости пространственно-временных отношений. Возникает необходимость установление новой топологии этих отношений. И здесь уравнение непрерывности в интегральной (4.42) или дифференциальной (4.43) формах позволяет сменить метрическую меру близости, связанную с расстоянием между двумя точками, на вероятностную меру. Возникают совершенно новые пространственно-временные топологические понятия непрерывности, сходимости по вероятностной мере. Рассмотрим это подробнее.

В классической механике, если известно решение уравнения движения (4.46) в виде $\mathbf{q} = \mathbf{q}(t)$, то при начальных условиях $\mathbf{q}(t_1) = \mathbf{q}_1$ вероятность перемещения $Pr\{\mathbf{q}_2 \leftarrow \mathbf{q}_1\}$ частицы из точки \mathbf{q}_1 в точку $\mathbf{q}_2 = \mathbf{q}(t_2)$ равна единице:

$$Pr\{\mathbf{q}_2 \leftarrow \mathbf{q}_1\} = 1 \quad (4.49)$$

где $\mathbf{q}_2 = \mathbf{q}_1 + d\mathbf{q}$. Причём

$$|d\mathbf{q}| = |\mathbf{v}|dt, \quad (4.50)$$

где $|\mathbf{v}| = |\dot{\mathbf{q}}|$, а переход $\mathbf{q}_1 \rightarrow \mathbf{q}_2$ осуществляется непрерывным образом. Степень близости точек \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 (формализующей непрерывность) определяется стандартной мерой, как $|d\mathbf{q}|$. При таком описании индивидуальность частицы не теряется ни в одночастичных, ни в многочастичных задачах.

В квантовой механике вероятность $Pr\{\mathbf{q}_2 \leftarrow \mathbf{q}_1\}$ перехода $\mathbf{q}_1 \rightarrow \mathbf{q}_2$ представляется выражением

$$Pr\{\mathbf{q}_2 \leftarrow \mathbf{q}_1\} = |\langle \psi(\mathbf{q}_2, t) | \psi(\mathbf{q}_1, t) \rangle|^2 dV_2 < 1 \quad (4.51)$$

В отличие от классического случая непрерывное соответствие, аналогичное (4.50), здесь отсутствует. Более того, в общем случае вероятность перехода в любую другую точку не равна нулю. Именно поэтому (4.51) представляет собой строгое неравенство.

Вместо (4.50) непрерывность “движения” квантовомеханического объекта описывается уравнением непрерывности (4.42). Однако, это движение не самого объекта, а его “виртуального облака” и движение этого “облака” действительно непрерывно: изменение вероятности нахождения объекта в некотором объёме ΔV однозначно связано с потоком этой вероятности через поверхность, ограничивающую объём $S(\Delta V)$:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Delta V} |\psi|^2 dV = - \oint_{S(\Delta V)} \mathbf{j} ds \quad (4.52)$$

Для нашей задачи:

$$\frac{d}{dt} |\psi|^2 dV_2 = - \int_{S(dV_2)} \mathbf{j} ds_2 \quad (4.53)$$

74.

Вероятность обнаружить объект в объёме dV_2 в единицу времени равна величине притока вероятности через площадку $S(dV_2)$, ограничивающую dV_2 . Именно эта величина и будет являться оценкой близости исходного положения \mathbf{q}_1 и последующего \mathbf{q}_2 . Мерой возможности реализации траектории конечного движения объекта – вероятность реализации такой траектории, как случайного процесса, регистрируемого на макроуровне.

Таким образом, движение квантовомеханического объекта, ассоциируемого с частицей (например, элементарной частицей), можно описать как движение виртуального “облака” вероятности, описываемого квадратом дифференциала $|\psi(\mathbf{q}, t)|^2 dV$, получаемого в результате решения уравнения Шредингера (4.30). Кроме того, движение этого “облака” в операторном виде подчиняется уравнению (4.45), по форме совпадающее с классическим (4.46). При движении виртуального “облака” выполняется уравнение непрерывности (4.42), (4.43).

Состояние такой квантовой частицы характеризуется собственными числами вектора $|\psi(\mathbf{q}, t)\rangle$. При измерении положения квантовой частицы мы получаем “одномоментное” локализованное состояние в соответствии с плотностью вероятности $|\langle \mathbf{q} | \psi(\mathbf{q}, t) \rangle|^2$.

Разумеется, движение виртуального “облака” вероятности нельзя отождествлять с движением квантовой частицы даже в каком-либо распределённом состоянии, то есть, рассматривая плотность вероятности, как плотность распределения частицы.

Поскольку квантовомеханический объект приобретает определённую макропространственную существование только в связи с обменом информацией между микроуровнем и макроуровнем, реализуемым в процедуре измерения, а концепция непрерывного времени при микроуровневом описании существенно отличается от макроуровневой, “движения” микроуровневой организации материи не описывается простым механическим движением.

Нерелятивистское уравнение Шредингера позволяет решить задачу динамики квантового объекта. Решение уравнения представляется волновой функцией в координатном представлении. С помощью Фурье-преобразования это же решение можно представить и в альтернативном импульсном представлении.

Уравнение Шредингера допускает решение задачи для единичного квантовомеханического объекта, а уравнение непрерывности для плотности вероятности даёт возможность интерпретации движения этого объекта, как “частицы”. И хотя эта интерпретация существенно отличается от описания движения классической частицы, тем не менее, она даёт возможность рационального понимания движения единичного квантовомеханического объекта.

Релятивистское уравнение Клейна - Гордона

Как и при получении уравнения Шредингера (4.30) с помощью подстановок (4.32) и (4.33) в (4.31), сделаем замены $E \rightarrow i\hbar \partial/\partial t$, $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$ в релятивистском соотношении между энергией и импульсом для свободной частицы с массой m

$$E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4 \quad (4.54)$$

В результате приходим к уравнению

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(\mathbf{q}, t) = (-\hbar^2 c^2 \Delta_{\mathbf{q}} + m^2 c^4) \psi(\mathbf{q}, t) \quad (4.55)$$

Это уравнение известно, как уравнение Клейна – Гордона.

Физическую интерпретацию уравнению Клейна – Гордона попытаемся дать по аналогии, как это было сделано в случае нерелятивистского уравнения Шредингера. Определим плотность вероятности ρ и поток вероятности \mathbf{j} таким образом, чтобы выполнялось уравнение непрерывности аналогичное (4.43). Если выбрать ρ и \mathbf{j} согласно формулам

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\psi^*(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{q}, t)}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*(\mathbf{q}, t)}{\partial t} \psi(\mathbf{q}, t) \right] \quad (4.56)$$

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = \frac{1}{2m} (\psi \mathbf{p} \psi^* - \psi^* \mathbf{p} \psi) \quad (4.57)$$

то с учётом (4.55) эти величины действительно будут удовлетворять уравнению непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0 \quad (4.58)$$

Если в формуле для ρ (4.57) заменить $i\hbar \partial \psi / \partial t$ на $E\psi$, то получим выражение

$$\rho = \frac{E}{mc^2} |\psi|^2 \quad (4.59)$$

которое действительно при $E \approx mc^2$ переходит в плотность вероятности нерелятивистской квантовой механики (см.4.42).

Необходимо отметить следующее. Уравнение (4.55) содержит вторую производную по времени. Это значит, что в некоторый момент времени t_0 волновая функция ψ и её производная $\partial \psi / \partial t$ могут быть заданы независимо и произвольно. Кроме того, ψ и ψ^* являются комплексными функциями. (Принципы Квантовой механики)

$\partial\psi/\partial t$ являются функциями пространственных координат \mathbf{q} , то ρ может быть положительной в одних частях пространства и отрицательной в других. В этом случае трудно интерпретировать ρ как обычную плотность вероятности.

Тем не менее, Паули и Вайскопф (1934) дали новую интерпретацию уравнению Клейна – Гордона, как полювому уравнению.

Уравнение Клейна - Гордона с самого начала предназначалось для решения задач динамики релятивистского квантового объекта.

Решение уравнения представляется волновой функцией в координатном представлении. С помощью Фурье-преобразования это же решение можно представить и в альтернативном импульсном представлении.

Уравнение непрерывности не позволяет интерпретировать решение уравнения Клейна-Гордона, как решение задачи для единичного квантовомеханического объекта и интерпретации движения этого объекта, как “частицы”.

Однако этому уравнению была дана новая полевая интерпретация, что послужило отправным моментом возникновения и утверждения новой концепции микроуровневой организации материи – полевой.

Резюме к главе 4

Динамическая алгебра \mathcal{D} , построенная на основе общего алгебраического подхода, представляет собой единую архитектуру для описания классической механики и квантовой механики. Двум описаниям динамики соответствуют два представления алгебры с помощью функций и операторов.

Принцип соответствия устанавливает связь между двумя представлениями динамической алгебры \mathcal{D} - классическим и квантовомеханическим.

Исходя из конкретного вида гамильтонианов для классической нерелятивистской и релятивистской механики, принцип соответствия позволил сформулировать нерелятивистское уравнение Шредингера и релятивистское уравнение Клейна – Гордона, которые позволяют решать задачи динамики или эволюции этих объектов.

Решения уравнений представляются волновыми функциями в координатном представлении. С помощью Фурье-преобразований эти же решения можно представить и в альтернативном импульсном представлении.

Уравнение Шредингера допускает решение задачи для единичного квантовомеханического объекта, а уравнение непрерывности для плотности вероятности даёт возможность интерпретации движения этого объекта, как “частицы”. И хотя эта интерпретация существенно отличается от описания движения классической частицы, тем не менее, она даёт возможность рационального понимания движения единичного квантовомеханического объекта.

Однако в отличие от нерелятивистского случая, интерпретация уравнения Клейна – Гордона, трактующая его как одночастичное уравнение движения для скалярной релятивистской квантовой частицы встречает серьёзные трудности. Дело в том, что для волновой функции, полученной как решение уравнения Клейна – Гордона, не выполняется уравнение непрерывности (возникновение отрицательных плотностей), поэтому в этом случае исчезает возможность интерпретировать движение даже в форме виртуального

“облака” вероятности, как при движении нерелятивистского квантовомеханического объекта.

Именно здесь мы должны зафиксировать свершившийся факт: с появлением уравнения Клейна - Гордона закончилась эра “частиц-одиночек” и одночастичных решений, началась эпоха квантовой теории поля и решений для коллективов виртуальных частиц.

Глава 5. Классические поля

Трудности с квантованием поведения релятивистских частиц - невозможность определения непрерывности даже для “облака” вероятности, обеспечивающего целостность представления объекта, могущего быть локализованным, обуславливает необходимость квантовомеханического рассмотрения нелокализованных физических объектов, то есть полей.

Уравнения движения

Принцип наименьшего действия

Частицы

Классическая система из N точек описывается $3N$ функциями времени $\mathbf{q}_i(t)$ ($i = 1, \dots, N$), которые подчиняются уравнениям Ньютона (4.46).

Как известно, уравнения движения (4.46) могут быть получены из вариационного принципа наименьшего действия. Напомним его формулировку. Для простоты ограничимся одномерным случаем для одной частицы. Определим действие

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q}) dt \quad (5.1)$$

где функция Лагранжа равна

$$L(q, \dot{q}) = \frac{mv^2}{2} - V(q) \quad (5.2)$$

В общем случае функция Лагранжа, так же как и гамильтониан, полностью характеризует физическую систему.

Из (5.1) видим, что действие определяется отрезке от t_0 до t_1 и является функционалом $q(t)$. Рассмотрим наряду с $q(t)$ функцию

$$q'(t) = q(t) + \delta q(t) \quad (5.3)$$

где $\delta q(t)$ – бесконечно малая. Будем считать, что

$$\delta q(t_0) = \delta q(t_1) = 0 \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned}
\delta S &= \int_{t_0}^{t_1} \delta L(q, \dot{q}) dt = \int_{t_0}^{t_1} [L(q', \dot{q}') - L(q, \dot{q})] dt = \\
&= \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right) dt = \\
&= \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{d}{dt} \delta q \right) dt = \\
&= \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right) - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right] dt = \\
&= \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_0}^{t_1} + \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q dt = \\
&= \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q dt
\end{aligned} \tag{5.5}$$

Приращение действия при замене $q(t)$ на $q'(t)$ (вариация действия) с точностью до бесконечно малых первого порядка равно

При получении (5.5) мы воспользовались тем, что $\delta \dot{q} = \dot{q}' - \dot{q} = d\delta q/dt$, произвели дифференцирование по частям с учётом (5.4). Потребуем обращения в нуль вариации действия (5.5). Так как $\delta q(t)$ произвольна внутри границ рассматриваемого отрезка, то из (5.5) следует

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0. \tag{5.6}$$

Дифференцируя функцию Лагранжа (5.2) по q и \dot{q} , получаем из (5.5)

$$m\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q}, \tag{5.7}$$

то есть (5.6) представляет собой уравнение движения. Таким образом, функция $q(t)$, являющаяся решением уравнения движения, отвечает экстремуму действия (5.1) при условии (5.4).

82.

Отметим, что с помощью функции Лагранжа можно получить также энергию (гамильтониан H) и импульс p частицы. Более того, из однородности времени и пространства из уравнения Лагранжа (5.6) следуют законы сохранения энергии и импульса.

Действительно, в силу однородности времени функция Лагранжа не должна зависеть явно от времени. Тогда, учитывая (5.6), имеем:

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \ddot{q} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \ddot{q} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q}$$

или

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L \right) = 0$$

Отсюда видно, величина

$$H = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L = \frac{m\dot{q}^2}{2} + V \quad (5.8)$$

остаётся неизменной при движении. Эта величина называется энергией.

Далее, в силу однородности пространства

$$\frac{dL}{dq} = \frac{\partial L}{\partial q}$$

Из уравнения Лагранжа следует

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0$$

и мы приходим к выводу, что величина

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q} \quad (5.9)$$

сохраняется при движении. Эта величина называется импульсом.

Поля

Наряду с локализованными объектами классическая физика рассматривает также и нелокализованные сущности. К таким сущностям необходимо, прежде всего, отнести поля.

Состояние физического тела в классической физике характеризуется координатами и их производными по времени: первой производной - скоростью, второй производной – ускорением и более высокими производными, которые могут возникнуть в каких-либо специальных задачах динамики. Уравнения, определяющие динамику состояния – это уравнения Ньютона. Эти уравнения являются дифференциальными уравнениями второго порядка по времени, что является одним из фундаментальнейших принципов физики, впервые заявленным Ньютоном в его Втором законе динамики. Для получения уравнений второго порядка по времени функция Лагранжа должна зависеть от параметров состояния системы и их первых производных. Параметрами состояния классической частицы являются характеристики её положения, то есть координаты. В этом случае функция Лагранжа должна определяться координатами положения частицы и скоростями, а вариационный принцип наименьшего действия даст нам динамические уравнения второго порядка по времени. Положение точечной частицы в классической механике описывается тремя координатами, положение твердого тела конечных размеров - тремя координатами центра масс и тремя угловыми координатами, например, углами Эйлера. В первом случае говорят о системе с тремя степенями свободы, во втором случае – с шестью степенями свободы. Очевидно, система из N точечных частиц имеет $3N$ степеней свободы. Функция Лагранжа (5.2) описывает систему с одной степенью свободы – точечную частицу при одномерном движении.

Поле, в отличие от локализованного объекта, является системой с бесконечным числом степеней свободы, поскольку оно присутствует в каждой точке пространства. Поэтому функция Лагранжа поля должна описываться через плотность функции, называемой в дальнейшем *лагранжианом*. Параметры, характеризующие поле, будем описывать функциями с индексами $\psi_\alpha(x)$, где α – принимает целочисленные значения, а x – является вектором 4-пространства-времени Минковского: $x = (\mathbf{q}, x^0)$. Учитывая необходимость выполнения принципа Лоренц-ковариантности, лагранжиан системы должен быть функцией $\psi_\alpha(x)$ и её производных по координатам пространства-времени Минковского $\partial\psi_\alpha/\partial x^i$.

Введём обозначение: $\partial\psi_\alpha/\partial x^i \equiv \psi_{\alpha,i}$, и в дальнейшем будем

84.

использовать правило суммирования Эйнштейна: суммирование по дважды повторяющимися латинским индексам.

Запишем функцию Лагранжа для поля в виде:

$$L = \int \mathcal{L} \left(\psi, \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) d\mathbf{q} \quad (5.10)$$

Здесь $\mathcal{L} \left(\psi, \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)$ – лагранжиан поля (функция Лагранжа для поля единицы объёма). Как и в классическом случае, эта величина зависит лишь от функций $\psi_\alpha(x)$ и их первых производных $\partial \psi_\alpha / \partial x^i$.

Определим действие

$$S = \int_{\Omega} \mathcal{L} \left(\psi, \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) d\Omega \quad (5.11)$$

где $dx = d\mathbf{q}dx^0$, а Ω – некоторый объём пространства-времени.

Вариация действия равна

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\alpha} \delta \psi_\alpha + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\alpha,i}} \delta \psi_{\alpha,i} \right) d\Omega = \\ &= \int_{\Omega} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\alpha} \delta \psi_\alpha + \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\alpha,i}} \delta \psi_\alpha \right) - \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\alpha,i}} \right) \delta \psi_\alpha \right] d\Omega \end{aligned}$$

При условии, что функции $\delta \psi_\alpha$ обращаются в нуль на границе области интегрирования и применяя теорему Гаусса-Остроградского для второго члена последнего выражения, получаем:

$$\delta S = \int_{\Omega} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\alpha} - \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\alpha,i}} \right) \right] \delta \psi_\alpha d\Omega \quad (5.12)$$

Уравнения поля вытекают из вариационного принципа, согласно которому

$$\delta S = 0 \quad (5.13)$$

Это равенство должно выполняться при произвольных вариациях $\delta \psi_\alpha$, обращающихся в нуль на границе. Отсюда следуют уравнения поля

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\alpha} - \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\alpha,i}} \right) = 0 \quad (5.14)$$

Из (5.14) видим, что уравнения поля полностью определяются видом лагранжиана квантовой системы. Вид же лагранжиана определяется свойствами симметрии системы. Среди свойств симметрии есть общие, например, лоренцевская симметрия пространственно-временных отношений. Требование лоренцевской симметрии позволяет во многом определить вид лагранжиана и диктует свойство Лоренц-ковариантности для любых релятивистских систем: уравнения поля (5.14) должны сохранять свой форму при преобразованиях Лоренца.

Будем рассматривать такие функции поля, которые преобразуются при преобразовании координат либо как тензоры, либо как спиноры. В квантовой теории квантами таких полей являются частицы с определённым спином и внутренней чётностью. Приведём примеры преобразований наиболее простых функций. Скалярная $\Phi(x)$, псевдоскалярная $\Phi_P(x)$ и векторная функции преобразуются следующим образом:

$$\Phi'_P(x') = -\Phi_P(x) \quad (5.16)$$

$$A'^i(x') = L_k^i A^k(x) \quad (5.17)$$

Здесь L_k^i - лоренцевская матрица преобразования координат пространства-времени Минковского.

Спинорная функция¹⁰⁾ преобразуется следующим образом:

$$\psi'_\sigma(x') = \Sigma_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}(x), \quad \bar{\psi}'_\sigma(x') = \bar{\psi}_{\sigma'}(x) \Sigma_{\sigma'}^{-1} \quad (5.18)$$

или в матричном виде

$$\psi'_\sigma(x') = \Sigma \psi_\sigma(x), \quad \bar{\psi}'_\sigma(x') = \bar{\psi}_\sigma(x) \Sigma^{-1} \quad (5.19)$$

Здесь индексы σ и σ' пробегает четыре значения, $\bar{\psi} = \psi^* \gamma_4$, а матрица Σ удовлетворяет соотношениям

$$\Sigma^{-1} \gamma_\mu \Sigma = L_{\mu\nu} \gamma_\nu \quad (5.20)$$

(γ_μ – эрмитовы 4×4 – матрицы, подчиняющиеся соотношениям антикоммутирования $\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}$).

Очевидно, что требование релятивистской ковариантности

¹⁰⁾ Динамическое состояние частицы со спином 1/2, например, электрона, определяется волновой функцией, имеющей четыре компоненты

86.

уравнений поля (5.14) равносильно требованию скалярности лагранжиана $\mathcal{L}\left(\psi, \frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$.

Рассмотрим в качестве примера электромагнитное поле¹¹⁾.

Уравнениями поля являются уравнения Максвелла^[6]

$$\frac{\partial F^{ik}}{\partial x^k} = -4\pi j^i \quad (5.20)$$

где j^i - плотность тока, а тензор электромагнитного поля F_{ik}

равен

$$F_{ik} = \left(\frac{\partial A_k}{\partial x^i} - \frac{\partial A_i}{\partial x^k} \right) \quad (5.21)$$

С учётом калибровки Лоренца для потенциалов A_k

$$\frac{\partial A_k}{\partial x^k} = 0 \quad (5.22)$$

и соотношения

$$F^{ik} = g^{il} g^{km} F_{lm} \quad (5.23)$$

получаем

$$\frac{\partial F^{ik}}{\partial x^k} = \frac{\partial^2 A^i}{\partial x^k \partial x_k} \quad (5.24)$$

Здесь под производной $\partial/\partial x_k$ подразумевается

$$\frac{\partial}{\partial x_k} = g^{km} \frac{\partial}{\partial x^m} \quad (5.25)$$

Учитывая (5.24), уравнение (5.20) приобретает вид

$$\frac{\partial^2 A^i}{\partial x^k \partial x_k} = -4\pi j^i \quad (5.26)$$

или

$$\square A^i = -4\pi j^i \text{ или } \square A_i = -4\pi j_i \quad (5.27)$$

где

$$\square = \partial^2 / \partial x^k \partial x_k \quad (5.28)$$

В релятивистских теориях принято сокращённое обозначение операции дифференцирования. Например, для производной вектора A_i по координате x^k это сокращение будет выглядеть так:

$$\frac{\partial A_i}{\partial x^k} = A_{i,k} \quad (5.29)$$

Обобщение для тензоров очевидно.

¹¹⁾ В дальнейшем будем использовать систему единиц измерения, в которой $\hbar=c=1$.
Квантовая механика (Принципы)

Уравнения поля (5.14) запишем в виде

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_i} - \frac{\partial}{\partial x^k} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_{i,k}} \right) = 0 \quad (5.30)$$

Построим лагранжиан \mathcal{L} так, чтобы уравнения (5.30) совпадало с (5.20). Очевидно, что производные потенциала должны входить в лагранжиан квадратично и что ток j^i в (5.20) происходит от дифференцирования лагранжиана по A_i .

Нетрудно убедиться, что лагранжиан

$$\mathcal{L} = -A_m j^m - \frac{1}{16\pi} F^{mn} F_{mn} \quad (5.31)$$

удовлетворяет всем необходимым требованиям.

Действительно, первый член в (5.30), согласно (5.31), равен

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_i} = -j^i \quad (5.32)$$

Для второго члена (5.30) имеем:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_{i,k}} = -\frac{1}{8\pi} \frac{\partial F_{mn}}{\partial A_{i,k}} F^{mn} \quad (5.33)$$

$$\frac{\partial F_{mn}}{\partial A_{i,k}} F^{mn} = -2F^{ik} \quad (5.34)$$

Из (5.33) и (5.34) следует

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_{i,k}} = -\frac{1}{4\pi} F^{ik} \quad (5.35)$$

Окончательно, согласно (5.30), (5.31) и (5.35), получаем уравнения Максвелла (5.20). Очевидно, что лагранжиан (5.31) и уравнения поля удовлетворяют требованиям релятивистской инвариантности и ковариантности.

Сохраняющиеся величины

Известно, что независимость явно функции Лагранжа для частицы от пространственно-временных координат или трансляционная инвариантность функции Лагранжа приводит к закону сохранения энергии-импульса частицы. Убедимся, что это же утверждение справедливо при трансляционной инвариантности лагранжиана поля, подчиняющегося уравнению (5.14). Рассмотрим сначала случай скалярного поля, сохранив при этом индекс α . В этом случае в лагранжиан будет входить одна функция ψ_α и одна её

88.

производная $\partial\psi_\alpha/\partial x^i$. Индекс α потребуется нам при обобщении результата для спинорного поля, когда индекс может принимать несколько значений.

Вычислим производную по координатам x^i лагранжиана $\mathcal{L}(\psi_\alpha, \partial\psi_\alpha/\partial x^k)$. Имеем:

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x^i} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_\alpha} \frac{\psi_\alpha}{\partial x^i} + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_{\alpha,k}} \frac{\partial\psi_{\alpha,k}}{\partial x^i} \quad (5.35)$$

С учётом уравнений поля (5.14) и соотношения $\psi_{\alpha,k,i} = \psi_{\alpha,i,k}$, получаем

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x^i} = \frac{\partial}{\partial x^k} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_{\alpha,k}} \frac{\psi_\alpha}{\partial x^i} + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_{\alpha,k}} \frac{\partial\psi_{\alpha,k}}{\partial x^i} = \frac{\partial}{\partial x^k} \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_{\alpha,k}} \frac{\partial\psi_\alpha}{\partial x^i} \right) \quad (5.36)$$

Заменяв левую часть (5.35) согласно

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x^i} = \delta_i^k \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x^k} \quad (5.37)$$

и введя обозначение

$$T_{\alpha i}^k = \frac{\partial\psi_\alpha}{\partial x^i} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_{\alpha,k}} - \delta_i^k \mathcal{L} \quad (5.38a)$$

получим

$$\frac{\partial T_{\alpha i}^k}{\partial x^k} = 0 \quad (5.39a)$$

Обобщение для спинорного поля очевидно:

$$T_i^k = \sum_{\alpha} \frac{\partial\psi_\alpha}{\partial x^i} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_{\alpha,k}} - \delta_i^k \mathcal{L} \quad (5.38)$$

$$\frac{\partial T_i^k}{\partial x^k} = 0 \quad (5.39)$$

Величины T_i^k преобразуются как тензор второго ранга. Этот тензор носит название *тензора энергии-импульса* поля.

Используя 4-теорему Гаусса-Остроградского из (5.39) получаем

$$P^i = \int_{\Omega} \frac{\partial T^{ik}}{\partial x^k} d\Omega = \oint_S T^{ik} dS_k \quad (5.40)$$

Здесь S - трёхмерная замкнутая гиперповерхность, ограничивающая 4-объём Ω . 4-вектор P^i является вектором энергии-импульса поля, локализованного в 4-объёме Ω .

Если интегрирование в (5.40) производить по гиперплоскости $x^0 = \text{const}$, то P^i приобретает вид

$$P^i = \int T^{i0} dV, \quad (5.41)$$

где интегрирование производится по всему трёхмерному пространству

Соотношение (5.39) представляет собой дифференциальную форму закона сохранения энергии-импульса. Как показано в приложении 2, 4-вектор P^i , определяемый соотношением (5.41), сохраняется, то есть не зависит от времени. Нулевая компонента вектора энергии-импульса равна

$$P^0 = \sum_{\alpha} \int \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\alpha,0}} \frac{\partial \psi_{\alpha}}{\partial x^0} - \mathcal{L} \right) dV = H, \quad (5.42)$$

где H – энергия поля (ср. с выражением (5.8)). Для плотности энергии поля \mathcal{H} находим

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\alpha,0}} \frac{\partial \psi_{\alpha}}{\partial x^0} - \mathcal{L} \quad (5.43)$$

Глава 6. Спутанность

История

Мысли Эйнштейна и новая реальность Аспека

Координата и импульс - элементы реальности, поскольку они представляют свойства реального объекта. Соотношение неопределённости Гейзенберга не позволяют их совместное измерение (лучше сказать — эти характеристики не могут сосуществовать).

Вывод по мнению Эйнштейна: квантовая механика либо даёт неполное описание реальности, либо её интерпретация неверна.

Для усиления своей аргументации группа ЭПР предложила мысленный эксперимент такого типа.

Предположим, что в точке с *известными координатами* некая частица распадается на две, летящие в противоположные стороны. Когда частицы разлетелись на достаточное расстояние так, что можно было бы сказать, что между ними исчезло всякое взаимодействие и всякая связь, частицы подвергаются детектированию и измерению их импульсов. По результатам измерений вычисляется *импульс исходной частицы*. Нам удалось обойти запрет соотношений неопределённости Гейзенберга. Для исходной частицы мы измерили импульс. Помог нам закон сохранения импульса, а координаты исходной частицы были известны заранее.

Вывод ЭПР: для удовлетворения принципу неопределённости можно предположить (по Эйнштейну) существование элементов некой *новой реальности, описываемой скрытыми параметрами, которые не позволят нам точно измерять импульсы*.

Конкретные исследования в этом направлении связаны с теоретическими работами Белла и экспериментами Аспека.

Суть выводов Белла. Для дихотомической (принимающей только два значения) переменной с достаточно произвольной функцией распределения вероятностей были выведены общие неравенства. Аналогичные формулы были выведены для

дихотомических наблюдаемых, описываемых квантовой теорией. Оказалось, что квантовомеханические соотношения нарушают неравенства Белла.

Суть экспериментов Аспека. В качестве дихотомической переменной Аспек выбрал поляризацию фотона и, в конечном счёте, подтвердил теоретические результаты Белла. Суть этих подтверждений состояла в регистрации корреляционной связи между поляризациями двух фотонов, а в форме мысленного эксперимента с импульсами можно говорить о существовании корреляции между импульсами частиц, которые и не позволяют нарушить принцип неопределённости Гейзенберга.

Вывод: в результате вместо "элементов реальности" по Эйнштейну, требуемых для объяснения мысленного эксперимента ЭПР, вполне и бесспорно проявила себя "новая реальность" квантовой возможности, причём и теоретически, и экспериментально. Возникает вопрос: что дальше, что с ней можно делать?

Когерентность

Важную роль в разрешении возникших вопросов играют состояния систем так называемых *запутанных* частиц. Чтобы понять, как концептуально строятся системы запутанных частиц, рассмотрим пример получения решения для пары фотонов в эксперименте Аспека.

Рассмотрим, как получается решение волнового уравнения для двухфотонной системы.

Поскольку фотоны не взаимодействуют между собой, уравнение для замкнутой двухфотонной системы допускает разделение переменных по обоим частицам, что даёт возможным представить два независимых решения для каждого фотона одним и тем же общим вектором состояния $|\psi\rangle$, поскольку фотоны находятся в идентичных состояниях, хотя и с разными параметрами.

Обозначим вектор первого фотона через $|\psi\rangle_1$, второго через $|\psi\rangle_2$. Следует отметить, что хотя $|\psi\rangle_1, |\psi\rangle_2$ и принадлежат к однотипным (одночастичным) гильбертовым пространствам, тем не менее, эти пространства разные. Поэтому вектор состояния двухчастичной системы необходимо записать в виде

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2. \quad (6.1)$$

92.

Этот вектор принадлежит уже к двухчастичному гильбертовому пространству.

В координатном представлении вектора представляются волновыми функциями. Пусть ψ_1, ψ_2 волновые функции, соответствующие первому и второму фотонам. Учитывая, что волновые функции определены с точностью до множителя по модулю равным единице, представим эти функции в нормированном виде, выделив явно пространственно-временную и фазовую зависимости:

$$\psi_1 = \psi_1(x_1, y_1, z_1, t_1)e^{i\varphi_1}, \quad \psi_2 = \psi_2(x_2, y_2, z_2, t_2)e^{i\varphi_2}. \quad (6.2)$$

Состояния, описываемые векторами или волновыми функциями, называются *чистыми* состояниями.

Согласно (1), общее решение волнового уравнения для двухчастичной системы представляется в виде:

$$\begin{aligned} & \tilde{\psi}(x_1, y_1, z_1, t_1, \varphi_1; x_2, y_2, z_2, t_2, \varphi_2) = \\ & = \psi_1(x_1, y_1, z_1, t_1) \cdot \psi_2(x_2, y_2, z_2, t_2)e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)} = \tilde{\psi}e^{i\chi}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Волновая функция пары фотонов, как бозонов, должна быть симметричной относительно перестановки частиц. Чтобы удовлетворить этому требованию мы должны произвести операцию симметризации найденного решения после разделения переменных и получения решения в виде произведения волновых функций фотонов. После этого волновая функция Ψ для двухфотонной системы принимает вид:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\tilde{\psi}_1e^{i\chi_1} + \tilde{\psi}_2e^{i\chi_2}\} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\tilde{\psi}_1 + \tilde{\psi}_2e^{i\delta}\}e^{i\chi_1} \quad (6.4)$$

И в связи с переходом от одночастичных описаний (6.2) к целостному описанию (6.4) происходит нечто, которое называется потерей индивидуальности фотонов с фиксацией фазового соотношения между входящими волновыми функциями фотонов. Во-первых, волновая функция Ψ симметрична относительно перестановки фотонов. Во-вторых, фазовый множитель δ становится внутренней характеристикой двухфотонной системы, которую теперь необходимо рассматривать как пару когерентных фотонов безотносительно к тому - где первый, а где второй. Именно *когерентность*, то есть жёсткое закрепление фазовой разницы δ , и даёт эффект спутанности (связи) фотонов. Их же общая

симметризованная волновая функция Ψ сама остаётся определённой с точностью до нового фазового множителя по модулю равным единице - $e^{i\chi_1}$, где χ_1 уже может принимать произвольные значения, поскольку когерентность фотонов, составляющих систему, фиксируется фазой δ .

Элементарные (но довольно пространные) расчёты для спутанной фотонной пары приведены, например, в ^[10].

Однако внутрифазовая связь по δ остаётся постоянной до тех пор, пока не будет разрушена целостность системы в результате рассогласования фаз между входящими в систему фотонами и эти компоненты не приобретут самостоятельность и независимость существования. Этот процесс естественно назвать *декогеренцией*.

В неразрушенной системе (системе спутанных когерентных фотонов (4)) каждый фотон уже не может быть представлен чистым состоянием, стандартно описываемым вектором или волновой функцией. Его описание возможно только с помощью, так называемых, матриц плотности - описания, которое является более общим в дисциплине квантовой механики.

Состояния, описываемые матрицами плотности, называются *смешанными* состояниями.

Характерным отличием смешанных состояний от чистых является следующее: энтропия чистых состояний равна нулю, энтропия E смешанных состояний определяется по формуле

$$E = -\overline{(\ln M)} = -\text{Sp}(M \ln M), \quad (6.5)$$

где M - матрица плотности системы. Энтропия обращается в нуль в случае чистого состояния, и только в этом случае. Неравенство нулю энтропии смешанного состояния означает наличие у таких систем информационно ёмкости. В силу этого, именно с помощью модуляции фазы δ между компонентами системы спутанных частиц можно пытаться реализовать возможность сверхсветовой передачи данных.

В чём особенности экспериментов со спутанными фотонами?

1. Фотон — релятивистский объект. Все события, связанные с движением фотона можно рассматривать как времениподобные, так и пространственноподобные. Первое позволяет рассматривать эти события как происходящие в одной точке, то есть как локально причинно связанные; второе — как одновременные и разноместные, причинно несвязанные (нелокальность). Однако движение фотона происходит в конкретной системе отсчёта и события реально разделены и пространственно, и по времени. То есть, локальность/нелокальность, причинность/непричинность — "всё в одном". Однако в этих состояниях, вообще говоря, нет ни прошлого, ни будущего, ни близкого, ни далёкого, хотя в конкретной системе отсчёта присутствует и первое, и второе, и третье, и четвёртое.

Квантовая же теория связывает их в одно целое с помощью спутанных состояний нескольких частиц, могущих быть зарегистрированными детекторами, как отдельные объекты.

2. Спутанные квантовые объекты, как целое, могут описываться как чистые состояния, то есть с помощью волновых функций. Компоненты, составляющие эту спутанную целостность суб'объекты и именуемые "частицами", не могут быть описаны волновыми функциями. Они описываются матрицами плотности. Главной особенностью описания состояний с помощью матриц плотности - их ненулевая энтропия, что означает наличие у этого объекта информационной ёмкости. Это даёт принципиальную возможность обмена информацией между объектами, входящими в целостность.

3. Фотон — квантовый объект и обладает дихотомическим свойством — "поляризацией". Этим же свойством обладает и монохроматический луч света (по-видимому, это одно из немногих свойств в классической физике, подчиняющееся реальному квантованию). На этом основании эксперименты со светом могут достаточно адекватно имитировать поведение фотонов в отношении их поляризации.

4. В экспериментах с фотонами, в силу сказанного, присутствие Боба с Алисой совершенно неуместно. Например, если Алису и Боба поместить в системы отсчёта пенала и карандаша одноименного парадокса, они никогда не смогут договориться. В задачах анализа событий, связанных распространением фотонов, их положение усугубляется фактом нулевого значения интервала, то есть единством пространственной и временной подобности событий.

В разговорах с Аспеком ^[10, 11] Белл выразил поддержку фундаментального курса на использование регулируемых анализаторов во время "полёта" частиц. Свойство времениподобности области эксперимента для фотонов даёт концептуальную возможность для конкретизации этой идеи: *пространственная нелокализованность и причинная несвязанность событий эксперимента, коммутруемость операторов измерения создают все необходимые предпосылки для рассмотрения возможности осуществления эксперимента, о котором говорил Белл.*

Технологическое использование пространственной и временной нелокальности запутанной трёхфотонной системы для сверхсветовой передачи информации при модуляции корреляционных зависимостей двух фотонов с помощью третьего во время передачи информации — именно в этом преимущество многочастичных спутанных систем перед двухчастичными. Подробнее о GHZ-состояниях см. ^{[12], [13]}. Использование свойств спутанности трёхфотонной системы предложено в работе ^[14].

Критика подходов Гринбергера и Йенсена к сверхсветовой передаче данных изложена в ^[15]. Однако следует отметить, что авторы эссе не отвергают саму идею Гринбергера, а лишь указывают на возможные технические недоработки при реализации концепции. Между тем и в их аргументации присутствуют очевидные некорректности связанные с учётом особенностей релятивистского фона, на котором планируется эксперимент в фотонном исполнении (см. примечания 3, 4, 5, 6 перевода статьи).

Глава 7. Квантование электромагнитного поля (нерелятивистский случай¹²) [16]

Квантование гармонического осциллятора

Прежде чем приступить к квантованию электромагнитного поля, напомним решение задачи о квантовании одномерного гармонического осциллятора. Его гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2}. \quad (7.1)$$

После введения размерных констант координаты $q_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$, импульса $p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}$ и энергии $H_0 = \hbar\omega$, безразмерный гамильтониан примет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{q}^2}{2}. \quad (7.2)$$

Процедура квантования аналогична той, что мы уже использовали, а именно необходимо заменить скобку Пуассона на коммутатор операторов. Далее необходимо найти собственные состояния гамильтониана $\hat{H}|n\rangle = E_n$ (фоковские состояния в методе вторичного квантования). Для этого вводятся операторы \hat{a}^+ (рождения) и \hat{a} (уничтожения), которые выражаются через безразмерные координату и импульс как $\hat{a} = (\hat{q} + i\hat{p})/\sqrt{2}$, $\hat{a}^+ = (\hat{q} - i\hat{p})/\sqrt{2}$. Их действие на фоковские состояния следующее: $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$. Из этого следует, что n – целые неотрицательные значения: 0, 1, 2, ..., а собственная энергия гамильтониана имеет вид $E_n = n + 1/2$.

Отметим, что фоковские состояния не всегда удобны для анализа, поскольку не описывают переход к классическому осциллятору. Действительно, средние значения координаты и импульса в этих состояниях равны нулю: $\langle n|\hat{q}|n\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0$, а неопределённость координаты и импульса: $\Delta q \Delta p = (2n + 1)/4$, т. е. увеличивается с увеличением энергии фоковского состояния. Для адекватного перехода к классическому осциллятору необходимо ввести когерентные глауберовы состояния.

¹²) Имеется ввиду случай низкоэнергетических фотонов
Квантовая механика (Принципы)

Когерентные (глауберовы) состояния

Помимо фоковских $|N\rangle$ у осциллятора имеются еще *глауберовы* $|z\rangle$ состояния, отличительные свойства которых мы изучим позднее. А сейчас рассмотрим их формальные характеристики. Это собственные вектора оператора уничтожения

$$\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle, \quad (7.3)$$

а соответствующие им собственные значения можно найти следующим образом. Будем их искать в виде разложения по фоковскому базису: $|z\rangle = \sum_N \langle N|z\rangle \cdot |N\rangle$, пользуясь его полнотой. Тогда $\langle N|\hat{a}|z\rangle = z\langle N|z\rangle$, откуда, используя $\langle N|\hat{a}|z\rangle = \sqrt{N+1}\langle N+1|z\rangle$, получаем рекуррентное соотношение

$$\langle N+1|z\rangle = \frac{z}{\sqrt{N+1}}\langle N|z\rangle, \quad (7.4)$$

т. е.

$$\langle N|z\rangle = \frac{z^N}{\sqrt{N!}}\langle 0|z\rangle \quad (7.5)$$

и значит,

$$|z\rangle = \langle 0|z\rangle \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{\sqrt{N!}} |N\rangle. \quad (7.6)$$

Множитель $\langle 0|z\rangle$ фактически является нормировочным. Из $\langle z|z\rangle = 1$ находим

$$\langle z|z\rangle = |\langle 0|z\rangle|^2 \sum_N \sum_M \frac{z^{N+M}}{\sqrt{N!M!}} \langle M|N\rangle = \sum_N \frac{z^{2N}}{N!} = \dots = e^{z^2}, \quad (7.7)$$

где $\langle M|N\rangle = \delta_{MN}$.

Таким образом, нормированное *когерентное состояние* – это вектор

$$|z\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_N \frac{z^N}{\sqrt{N!}} |N\rangle. \quad (7.8)$$

Этот вектор является собственным при любом комплексном z . Спектр \hat{a} занимает всю комплексную плоскость. Это неудивительно, так как \hat{a} неэрмитов. С этим же обстоятельством связана и неортогональность

$$\langle z_1|z_2\rangle = e^{-\frac{|z_1|^2+|z_2|^2}{2}} \sum_{M,N} \frac{z_1^M z_2^N}{\sqrt{N!M!}} \langle M|N\rangle = e^{-\frac{|z_1-z_2|^2}{2}}, \quad (7.9)$$

Из (7.9) видим, что только при $|z_1 - z_2| \gg 1$ они ортогональны. В отличие от собственных векторов эрмитовых операторов, собственные вектора a принадлежат непрерывному спектру, но имеют конечную норму. Их базис переопределен.

Свойства когерентных состояний

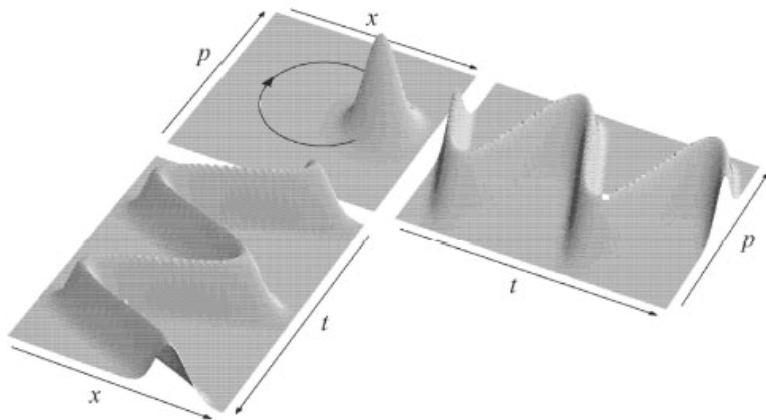


Рис. 3. Динамика когерентного состояния в фазовом пространстве

1. Когерентное состояние не расплывается в фазовом пространстве.
2. Если поле находится в когерентном состоянии, то минимизируется соотношение неопределённости.

3. Выполняется соотношение $(\overline{\Delta N^2})_{\text{когер.}} = \bar{N}$, тогда как для теплового шума $(\overline{\Delta N^2})_{\text{тепл.}} = \bar{N} + \bar{N}^2$.

4. В базисе когерентных состояний возможен переход от операторов к c -числам.

Квантование электромагнитного поля в резонаторе

Мы рассмотрим самый простой случай электромагнитного поля — единственную моду закрытого прямоугольного резонатора (МР) длиной L и объемом V . Это нужно для того, чтобы выявить суть квантования электромагнитного поля не отвлекаясь на

геометрические подробности, упростив структуру мод свободного пространства и т. д.

Поле в пустом резонаторе (без вещества и токов) описывается уравнениями Максвелла для свободного пространства:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad (7.10)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (7.11)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (7.12)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \quad (7.13)$$

Итак, наш резонатор имеет длину L вдоль оси z и плоские стенки в плоскостях $(x, y, 0)$ и (x, y, L) . Рассмотрим сначала МР с электрическим полем, линейно поляризованным вдоль оси x и зависящим только от z . Поскольку уравнения Максвелла линейны, вторую поляризацию можно потом рассмотреть независимо. Из (7.12, 7.13) видно, что продольных компонент у \mathbf{E} и \mathbf{B} нет, поле поперечно: $E_z = B_z = 0$. Кроме того, поле \mathbf{B} поляризовано строго вдоль y , т. е. $\mathbf{E} = (E_x(z, t), 0, 0)$ и $\mathbf{B} = (0, B_y(z, t), 0)$. Тогда (7.12) и (7.13) приобретают вид:

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} = -\frac{\partial B_y}{\partial t}, \quad (7.14)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} = -\frac{\partial B_y}{\partial t}. \quad (7.15)$$

Подставляя (7.15) в (7.14), получаем для E_x волновое уравнение $c^2 \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2} = 0$. Решать его будем методом разделения переменных.

Представим электрическое поле в виде $E_x(z, t) = E_0(t)f(z)$. Такая подстановка в волновое уравнение даёт

$$E_0(t)f''(z) - \ddot{E}_0(t)f(z)/c^2 = 0, \quad (7.16)$$

откуда получаем

$$\ddot{E}_0(t)/E_0(t) = c^2 f''(z)/f(z) = \text{const} \equiv -\omega^2, \quad (7.17)$$

потому что обе части уравнения зависят от разных аргументов и могут быть равны только в том случае, если равны константе. Здесь мы предположили, что эта константа отрицательна. Тогда

$$f(z) = C_1 \sin(\omega z) + C_2 \cos(\omega z). \quad (7.18)$$

Граничное условие для поля – равенство нулю тангенциальной компоненты электрического поля на стенках резонатора, т. е. $E_x(0, t) = E_x(L, t) = 0$. Это даёт и $C_2 = 0$, и $\omega \equiv \omega_m = \pi nc/L, m = 0, 1, \dots$. Здесь ω_m – частота МР, принимающая дискретные значения. Отметим, что если бы мы взяли константу положительной, то получившееся решение было бы суммой двух действительных экспонент и имело бы только один нуль. Это является отражением общей теоремы о том, что все собственные значения оператора Лапласа являются отрицательными. Таким образом электрическое поле представляется в виде дискретных мод резонатора:

$$E_x''(z, t) = E_0''(t) \sin(\omega_n z/c) \quad (7.19)$$

Из уравнения (7.19) видно, что координатная часть магнитного поля есть $\cos(\omega_n z/c)$, поэтому его можно записать в виде

$$B_x''(z, t) = B_0''(t) \cos(\omega_n z/c) \quad (7.20)$$

Все константы интегрирования мы оставили в размерных множителях $E_0''(t)$ и $B_0''(t)$.

Теперь вычислим энергию ЭМ поля в резонаторе:

$$H = \frac{1}{8\pi} \int dv \left[\frac{E_x^2}{2} + \frac{B_y^2}{2} \right] = \sum_n \frac{V}{8\pi} \left(\frac{(E_0^n(t))^2}{2} + \frac{(B_0^n(t))^2}{2} \right). \quad (7.21)$$

Вводя размерное значение энергии каждой моды в виде $H_0^{(n)} = \hbar\omega_n$, получаем безразмерную энергию в виде

$$H = \sum_n \frac{V}{8\pi\hbar\omega_n} \left(\frac{(E_0^n(t))^2}{2} + \frac{(B_0^n(t))^2}{2} \right) = \sum_n \left(\frac{q_n^2(t)}{2} + \frac{p_n^2(t)}{2} \right), \quad (7.22)$$

где мы ввели безразмерные электрическое и магнитное поля:

$$q_n(t) = E_0^n(t) \sqrt{\frac{V}{8\pi\hbar\omega_n}}, \quad (7.23)$$

$$p_n(t) = B_0^n(t) \sqrt{\frac{V}{8\pi\hbar\omega_n}}. \quad (7.24)$$

которые удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\dot{q}_n(t) = \omega_n p_n(t), \quad (7.25)$$

$$\dot{p}_n(t) = -\omega_n q_n(t). \quad (26)$$

Мы видим, что для электрического и магнитного полей мы получили гамильтониан гармонического осциллятора (7.2), из которого формально следуют уравнения Гамильтона. Эти два факта позволяют воспользоваться процедурой квантования, развитой для гармонического осциллятора. Отметим, что на данном этапе мы должны постулировать коммутационное соотношение для безразмерных электрического и магнитного полей. Само коммутационное соотношение ниоткуда не следует и обоснованием ему служит только эксперимент.

Итак, мы выяснили, что гамильтониан МР – это гамильтониан гармонического осциллятора с частотой ω , а $p = \dot{q}$ играет роль канонического импульса «частицы» осциллятора единичной массы. Таким образом, моды ЭМ поля – это осцилляторы, причем электрическое и магнитное поля играют роль канонических координаты и импульса. После канонического квантования они превращаются в операторы, удовлетворяющие коммутационным соотношениям $[\hat{q}, \hat{p}] = i$. Квантами возбуждения МР являются фотоны МР, операторы рождения $\hat{a}^+ = (\hat{q} - i\hat{p})$ и уничтожения $\hat{a} = (\hat{q} + i\hat{p})$ которых удовлетворяют коммутационному соотношению $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$. Тогда гамильтониан МР есть $\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$, а состояниями поля МР являются векторы $|N\rangle$, соответствующие N фотонам в МР: $\hat{a}^+ \hat{a} |N\rangle = N |N\rangle$. Рассмотрим это подробнее.

При очень большом числе фотонов в МР, $N \gg 1$, поле становится классическим. Тогда операторы рождения и уничтожения становятся c -числами $\hat{a}^+ \approx \hat{a} \approx \sqrt{N}$, а электрическое поле – также классическим c -числом. Из (7.22) видно правило соответствия величины классического поля N -фотонному состоянию:

$$E_{class} = 2\sqrt{N}\epsilon_0; \quad B_{class} = 2i\sqrt{N}\epsilon_0. \quad (7.27)$$

Электрическому и магнитному полям МР тогда соответствуют операторы

$$\hat{E}_x(z, t) = \mathfrak{E}_0(\hat{a}^+ + \hat{a}) \sin\left(\frac{\omega z}{c}\right) \quad (7.28)$$

$$\hat{E}_x(z, t) = \mathfrak{B}_0(\hat{a}^+ - \hat{a}) \cos\left(\frac{\omega z}{c}\right) \quad (7.29)$$

102.

где $\mathfrak{E}_0 = \mathfrak{B}_0 = \left(\frac{4\pi h\omega}{v}\right)^{1/2}$ – электрическое и магнитное поля «на один фотон».

Квантование электромагнитного поля тел произвольной формы

Обобщим полученную схему на резонаторы произвольной формы. Для этого введём понятие функции Грина. Пусть дано линейное уравнение

$$\hat{L}\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}(\mathbf{r}). \quad (7.30)$$

Функцией Грина данного уравнения называют решение уравнения

$$\hat{L}\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{I}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (7.31)$$

Если решение уравнения (7.31) известно, то решение уравнения (7.30) можно записать в следующем виде

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \int \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\mathbf{B}(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}'. \quad (7.32)$$

Электрическое и магнитное поля выражаются через скалярный и векторный потенциалы следующим образом

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \nabla\varphi(\mathbf{r}, t). \quad (7.33)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\mu_0\mu} \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (7.34)$$

Представим все величины в виде интеграла Фурье по частотам:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \int d\omega \mathbf{F}(\mathbf{r}, t, \omega) \exp(-i\omega t). \quad (7.35)$$

Тогда уравнения переписутся в виде:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) - \nabla\varphi(\mathbf{r}, \omega), \quad (7.36)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{\mu_0\mu} \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega). \quad (7.37)$$

Подставляя эти соотношения во второе уравнение Максвелла

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega), \quad (7.38)$$

получаем

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) = \mu_0 \mu \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \mu_0 \mu \varepsilon_0 \varepsilon (i\omega \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) - \nabla \varphi(\mathbf{r}, \omega)). \quad (7.39)$$

Используя соотношение и обобщённую лоренцевскую калибровку

$$\nabla \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \mu_0 \mu \varepsilon_0 \varepsilon \varphi(\mathbf{r}, \omega) = 0, \quad (7.40)$$

получаем

$$(\Delta + k^2) \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) = \mu_0 \mu \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega), \quad (7.41)$$

и аналогично для скалярного потенциала

$$(\Delta + k^2) \varphi(\mathbf{r}, \omega) = -\rho(\mathbf{r}, \omega) / \varepsilon_0 \varepsilon. \quad (7.42)$$

Решением этого уравнения будет

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) = \mu_0 \mu \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r}', \omega) d^3 \mathbf{r}', \quad (7.43)$$

где скалярная функция Грина $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ удовлетворяет уравнению

$$(\Delta + k^2) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (7.44)$$

При этом электрическое и магнитное поля будут иметь вид:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega \mu \mu_0 \int \mathbf{G}(\ddot{\mathbf{r}}, \mathbf{r}) \mathbf{j}(\mathbf{r}') dV' = E_0 \mathbf{f}_E(\mathbf{r}), \quad (7.45)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \int [\nabla \times \ddot{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \mathbf{j}(\mathbf{r}') dV' = H_0 \mathbf{f}_H(\mathbf{r}), \quad (7.46)$$

где диадная функция Грина определяется как

$$\ddot{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left[\ddot{\mathbf{I}} + \frac{1}{k^2} \nabla \otimes \nabla \right] G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (7.47)$$

Отметим, что уравнения (7.41 – 7.42) являются обобщением волновых уравнений (7.14 – 7.15) на случай произвольной среды. В (7.41 – 7.42) явно выделены размерные константы E_0 и H_0 , а пространственная зависимость полей находится в функциях: $\mathbf{f}_E(\mathbf{r})$ и $\mathbf{f}_H(\mathbf{r})$, которые предполагаются ортонормированными:

$$\int \mathbf{f}_{E,n}(\mathbf{r}) \mathbf{f}_{E,m}^*(\mathbf{r}) dV = V \delta_{nm}, \quad \int \mathbf{f}_{H,n}(\mathbf{r}) \mathbf{f}_{H,m}^*(\mathbf{r}) dV = V \delta_{nm}.$$

Отметим, что размерные константы E_0 и H_0 не определены, как и должно быть, поскольку собственные моды определены с точностью до константы.

104.

Выражения (7.41 – 7.42) определяют пространственное распределение поля. Зная их, можно определить «объём моды»

$$V_{CM} = \frac{\int |\mathbf{f}|^2 dV}{\max |\mathbf{f}|^2}. \quad (48)$$

Видно, что чем более неравномерно распределено поле, чем сильнее оно локализовано в некоторой области пространства, тем объём моды меньше.

Для определения поля на «один фотон» необходимо воспользоваться выражением для энергии *диспергирующей слабодиссипативной* среды:

$$W = \frac{1}{2} \int \left(\varepsilon_0 \frac{\partial \varepsilon \omega}{\partial \omega} |\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{H}|^2 / \mu_0 \right) dV \quad (49)$$

Поле «на один фотон» тогда определится как амплитуда, энергия которой равна $\hbar \omega_{CM}$:

$$\mathfrak{E}_0 = \sqrt{\frac{\hbar \omega_{CM}}{\varepsilon_0 \int \frac{\partial \varepsilon \omega}{\partial \omega} |\mathbf{f}_E|^2 dV}}, \quad \mathcal{H}_0 = \sqrt{\frac{\hbar \omega_{CM} \mu_0}{\int |\mathbf{f}_H|^2 dV}} \quad (50)$$

Константы \mathfrak{E}_0 и \mathcal{H}_0 выбраны таким образом, чтобы энергии квантов электрического и магнитного полей были одинаковыми и равными $\hbar \omega_{CM}/2$, как потенциальная и кинетическая энергии в гармоническом осцилляторе. Они аналогичны введенным в предыдущем параграфе полям «на один фотон».

Отметим, что для того, чтобы уравнения для определения квантов полей в среде были замкнутыми, необходимо определить связь между $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ и $\varepsilon(\mathbf{r})$.

Заключение

Продолжение следует ...

Приложение 1. Математические основания квантовой механики

Линейное пространство

Векторы

Символами $|\varphi\rangle, |\psi\rangle, |\chi\rangle$ будем обозначать векторы линейного пространства (в дираковской нотации), обладающие следующими свойствами:

1. Любые два вектора либо тождественны ($|\varphi\rangle = |\psi\rangle$), либо различны ($|\varphi\rangle \neq |\psi\rangle$). Если $|\varphi\rangle = |\psi\rangle$, то и $|\psi\rangle = |\varphi\rangle$. Если $|\varphi\rangle = |\psi\rangle$ и $|\psi\rangle = |\chi\rangle$, то $|\varphi\rangle = |\chi\rangle$.
2. Сумма двух векторов $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ является вектором $|\varphi\rangle + |\psi\rangle$. Векторное сложение коммутативно: $|\varphi\rangle + |\psi\rangle = |\psi\rangle + |\varphi\rangle$, ассоциативно: $|\varphi\rangle + (|\psi\rangle + |\chi\rangle) = (|\varphi\rangle + |\psi\rangle) + |\chi\rangle$.
3. Если α, β – произвольные числа, действительные или комплексные, то для каждого вектора $|\varphi\rangle$ определено произведение $\alpha|\varphi\rangle$, которое также является вектором. Умножение вектора на число дистрибутивно: $\alpha(|\varphi\rangle + |\psi\rangle) = \alpha\varphi + \alpha\psi$, $\alpha + \beta\varphi = \alpha\varphi + \beta\varphi$, $1\varphi = \varphi$, $0\varphi = |\mathbf{0}\rangle$. По определению: $|\varphi\rangle - |\psi\rangle = |\varphi\rangle + (-1)|\psi\rangle$.
4. Всякая пара векторов $|\varphi\rangle$ и $|\psi\rangle$ обладает *скалярным произведением*, которое будем обозначать как $\langle\varphi|\psi\rangle$ или (φ, ψ) : $\langle\varphi|\psi\rangle \equiv (\varphi, \psi)$. Первое обозначение скалярного произведения приводит к более компактным выражениям, во втором обозначении возникает иногда необходимость при уточнения деталей¹³⁾. Свойства скалярного произведения, по определению:
 - a) $\langle\varphi|\varphi\rangle \geq 0$, причём $\langle\varphi|\varphi\rangle = 0$ тогда и только тогда, когда $|\varphi\rangle = |\mathbf{0}\rangle$

¹³⁾ необходимость уточнения некоторых записей в дираковской нотации видна уже при рассмотрении свойств b) и c) скалярного произведения двух векторов с дополнительными множителями.

- [$\langle \varphi, \varphi \rangle \geq 0$, причём $\langle \varphi, \varphi \rangle = 0$ тогда и только тогда, когда $|\varphi\rangle = |\mathbf{0}\rangle$];
- b) $\langle \varphi | (|\psi\rangle + |\chi\rangle) = \langle \varphi | \psi\rangle + \langle \varphi | \chi\rangle$ и $\langle \varphi | \tilde{\alpha} | \psi\rangle = \alpha \langle \varphi | \psi\rangle$
 [$\langle \varphi, \psi + \chi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle + \langle \varphi, \chi \rangle$ и $\langle \varphi, \alpha \psi \rangle = \alpha \langle \varphi, \psi \rangle$];
- с) $\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$; $\langle \varphi | \tilde{\alpha} | \psi \rangle = \langle \psi | \tilde{\alpha}^* | \varphi \rangle^* = \alpha^* \langle \psi | \varphi \rangle^* = \alpha^* \langle \varphi | \psi \rangle$
 [$\langle \varphi, \psi \rangle = \langle \psi, \varphi \rangle^*$, где $\langle \psi, \varphi \rangle^*$ обозначает величину, комплексно сопряжённую с $\langle \varphi, \psi \rangle$. Следует заметить, что $\langle \alpha \varphi, \psi \rangle = \langle \psi, \alpha \varphi \rangle^* = [\alpha \langle \psi, \varphi \rangle]^* = \alpha^* \langle \psi, \varphi \rangle$

Говорят, что конечная или счётно-бесконечная последовательность векторов $|\psi^{(1)}\rangle, |\psi^{(2)}\rangle \dots$ является *полной*, если любой вектор, принадлежащий этому же пространству, можно представить в виде

$$|\psi\rangle = \sum_j \gamma_j |\psi^{(j)}\rangle, \quad (\text{п.1})$$

где γ_j — некоторые числа. Говорят, что векторы $|\psi^{(1)}\rangle, |\psi^{(2)}\rangle \dots$ *линейно независимы*, если любое соотношение между ними вида

$$\sum_j \gamma_j |\psi^{(j)}\rangle = |\mathbf{0}\rangle$$

предполагает, что все γ_j равны нулю. Очевидно, что нуль-вектор $|\mathbf{0}\rangle$ не может принадлежать множеству линейно-независимых векторов.

Число $\|\varphi\| = \langle \varphi | \varphi \rangle^{1/2}$, то есть корень квадратный из скалярного произведения вектора $|\varphi\rangle$ самого на себя, называется *нормой*, или *длиной* вектора $|\varphi\rangle$. Если $\|\varphi\| = 1$, то говорят, что вектор $|\varphi\rangle$ *нормирован*. Всякий вектор $|\varphi\rangle$, за исключением нуль-вектора $|\mathbf{0}\rangle$, можно нормировать, разделив его на $\|\varphi\|$. Если $\langle \varphi | \psi \rangle = 0$, то говорят, что векторы $|\varphi\rangle$ и $|\psi\rangle$ *ортогональны*.

Пусть имеется полная система линейно независимых векторов $|\psi^{(j)}\rangle$, где $j = 1, 2, 3 \dots$ Методами линейной алгебры можно показать, что любая такая система векторов может быть преобразована в полную ортонормированную систему линейно независимых векторов $|\delta^{(j)}\rangle$ со свойствами:

$$\langle \delta^{(i)} | \delta^{(k)} \rangle = \delta_{ik}. \quad (\text{п.2})$$

Здесь δ_{ik} — δ -символ Кронекера, определяемый соотношением

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = k \\ 0 & \text{при } i \neq k \end{cases} \quad (\text{п.3})$$

Отсюда следует, что любой вектор линейного пространства $|\psi\rangle$ может быть разложен по этой полной ортонормированной системе векторов:

$$|\psi\rangle = \sum_j \psi_j |\delta^{(j)}\rangle, \quad (\text{п.4})$$

где, согласно (п1.2)

$$\psi_j = \langle \delta^{(j)} | \psi \rangle \quad (\text{п.5})$$

Величины ψ_j называются компонентами вектора $|\psi\rangle$ в полной ортонормированной системе функций $|\delta^{(j)}\rangle$. Легко убедиться, что:

- из равенства $|\varphi\rangle = |\psi\rangle$ следуют равенства $\varphi_j = \psi_j$ для всех $j = 1, 2 \dots$ и обратно;
- $(\varphi + \psi)_k = \varphi_k + \psi_k$;
- $(\alpha\varphi)_k = \alpha\varphi_k$;
- $\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_k \varphi_k^* \psi_k$.

Линейные операторы

Линейный оператор A есть соответствие или правило, с помощью которого всякому вектору $|\psi\rangle$ сопоставляется вектор $A|\psi\rangle$, так что

- $A|\varphi\rangle = A|\psi\rangle$, если $|\varphi\rangle = |\psi\rangle$;
 - $A(\gamma|\varphi\rangle) = \gamma(A|\psi\rangle)$;
 - $A(|\varphi\rangle + |\psi\rangle) = A|\varphi\rangle + A|\psi\rangle$.
- (п.6)

Если A и B – линейные операторы и $|\psi\rangle$ – произвольный вектор, то

- γA обозначает оператор, определённый соотношением $(\gamma A)|\psi\rangle = \gamma(A|\psi\rangle)$;
- $A + B$ обозначает оператор, определённый соотношением $(A + B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle$;
- AB обозначает оператор, определённый соотношением $(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$;

108.

- g) $\mathbf{1}$ обозначает единичный оператор, определяемый соотношением $\mathbf{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$.

Гильбертово пространство

Рассмотрим два примера гильбертовых пространств, применяемых в квантовой механике.

1. Конечная или бесконечная последовательность действительных или комплексных чисел $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \dots$ является вектором при условии, что

- a) тождественность двух последовательностей $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \dots$ и $\psi_1, \psi_2, \psi_3 \dots$ предполагает равенство $\varphi_k = \psi_k$ для всех $k = 1, 2, 3 \dots$;
- b) сумма двух последовательностей $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \dots$ и $\psi_1, \psi_2, \psi_3 \dots$ определена как последовательность

$$\varphi_1 + \psi_1, \varphi_2 + \psi_2, \varphi_3 + \psi_3 \dots;$$

- c) произведение числа α и последовательности $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \dots$ определено как последовательность $\alpha\varphi_1, \alpha\varphi_2, \alpha\varphi_3 \dots$, так что последовательность $0, 0, 0 \dots$ представляет собой нуль-вектор;
- d) скалярное произведение двух последовательностей $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \dots$ и $\psi_1, \psi_2, \psi_3 \dots$ по определению равно

$$\langle \varphi | \psi \rangle = (\varphi, \psi) = \sum_k \varphi_k^* \psi_k \quad (\text{п.7})$$

Векторы такого рода общеупотребительны в матричной формулировке квантовой механики (гейзенберговская картина), их можно назвать векторами в *пространстве последовательностей*. Числа $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \dots$ носят название компонент вектора φ .

2. Функция $\varphi(x)$ действительного переменного x определённая на произвольном интервале $b < x < c$ и непрерывная на нём, является вектором при условии, что:

- a) из тождественности $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ вытекает равенство функций $\varphi(x) = \psi(x)$ на интервале $b < x < c$;

- b) сумма двух векторов $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ определяется, как вектор $\varphi(x) + \psi(x)$;
- c) произведение числа α и вектора $\varphi(x)$ определяется, как вектор $\alpha\varphi(x)$;
- d) скалярное произведение двух векторов $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ по определению равно

$$\langle \varphi | \psi \rangle = (\varphi, \psi) = \int_b^c \varphi^*(x) \psi(x) dx \quad (\text{п.8})$$

С векторами такого рода обычно приходится встречаться в волновой формулировке квантовой механике (шредингеровская картина), их можно назвать векторами в *функциональном пространстве*.

Представление линейных операторов матрицами

Предположим, что в пространстве состояний множество линейно независимых векторов не более чем счётно и что $\delta^{(1)}, \delta^{(2)} \dots$ есть ортонормированная система векторов. Тогда любой вектор $|\psi\rangle$ можно представить в виде $\sum_j \psi_j |\delta^{(j)}\rangle$, где ψ_j определяется (п1.5).

Если A – произвольный линейный оператор, а A_{kl} – компоненты вектора $A|\delta^{(l)}\rangle$, то компоненты вектора $A|\psi\rangle$ будут равны

$$(A|\psi\rangle)_k = \sum_l (\psi_l A \delta^{(l)})_k = \sum_l A_{kl} \psi_l \quad (\text{п.9})$$

Полный набор компонент $\|A_{kl}\|$ есть матрица, о которой говорят, что она представляет линейный оператор A . Линейный оператор $\mathbf{1}$ представляется диагональной матрицей $\|\delta_{kl}\|$.

Если число векторов ортонормированной системы $|\delta^{(j)}\rangle$ ($j=1, 2 \dots$) бесконечно, то матрица $\|A_{kl}\|$ будет бесконечномерной. Её можно записать следующим образом:

$$A = \left\| \begin{array}{cccc} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right\| \quad (\text{п.10})$$

Так как число строк и столбцов этой матрицы бесконечно, то показать все элементы, разумеется, невозможно. Однако, если векторы принадлежат n -мерному пространству, то имеется только конечное

110.

число n векторов $|\delta^{(j)}\rangle$ и у матрицы будет n^2 элементов, которые можно разместить в n строках и n столбцах.

Собственные векторы и собственные значения

Если $A|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle$, где α – число, то говорят, что α есть *собственное значение* оператора A , а $|\psi\rangle$ – *собственный вектор* (предполагается, что $|\psi\rangle$ не равно нулю).

Если A и B имеют общий собственный вектор, то

$$(AB - BA)|\psi\rangle = 0.$$

Если α и β – соответствующие собственные значения, то

$$(AB)|\psi\rangle = A(B)|\psi\rangle = \beta A|\psi\rangle = \beta\alpha|\psi\rangle = \alpha\beta|\psi\rangle$$

и аналогично $(BA)|\psi\rangle = \alpha\beta|\psi\rangle$. Отсюда следует, что если каждый собственный вектор оператора A является в то же время и собственным вектором оператора B , то $AB = BA$, то есть операторы A и B *коммутируют*.

Специальные типы операторов

Проекционные операторы

Оператор P , удовлетворяющий соотношению $P = P^2$, называют *проекционным* оператором. Очевидно, что все собственные значения такого оператора – единицы или нули.

Эрмитовы операторы

Линейный оператор A^* называют *эрмитово сопряжённым* с оператором A , если для произвольных векторов φ и ψ $(A\varphi)^*\psi = \varphi^*(A^*\psi)$. Здесь использована традиционная (не дираковская) нотация.

Дираковская нотация. Ранее мы определили $\langle\varphi| = |\varphi\rangle^*$. Тогда равенство $(\vec{A}|\varphi\rangle)^* = \langle\varphi|\vec{A}^*$ определяет эрмитово сопряжённый оператор A^* . Стрелки над операторами указывают направление действия оператора.

Оператор A называют *эрмитовым*, если $A^* = A$.

Равенство $\langle\varphi|\vec{A}^*|\psi\rangle = \langle\varphi|\vec{A}|\psi\rangle$ определяет эрмитов оператор в дираковской нотации. Для эрмитовых операторов в записи $\langle\varphi|A|\psi\rangle$ отсутствует неопределённость, связанная с действием оператора на левую или правую “обкладку” матричного элемента оператора.

Сопоставляя оба определения, можно видеть, что в матричном представлении эрмитово сопряжённым операторам соответствуют транспонированные матрицы с комплексно сопряжёнными элементами. Эрмитов оператор в матричном представлении обладает при этом свойством $(A_{ik})^* = A_{ki}$.

Все собственные значения эрмитова оператора действительны, а собственные векторы, принадлежащие различным собственным значениям эрмитова оператора, взаимно ортогональны.

Поскольку ортогональные векторы с необходимостью линейно независимы, система собственных векторов эрмитовой матрицы полна.

Унитарные операторы

Унитарным оператором U называется оператор, удовлетворяющий соотношению

$$U^*U = \mathbf{1} \quad (\text{п.11})$$

Все собственные значения унитарного оператора равны по модулю единице.

Функции от операторов

Квадрат и высшие степени оператора A , а также и многочлены от A были определены ранее (п1.6, “d”-“g”). Можно определить и функцию f от оператора A при условии, что, во-первых, существует функция $f(\alpha)$ для всякого собственного значения α оператора A и, во-вторых, система собственных векторов оператора A полна.

Действительно, пусть $|\psi\rangle$ - произвольный вектор и пусть разложение этого вектора по собственным векторам $|\psi^{(j)}\rangle$ оператора A имеет вид (система векторов предполагается счётной)

$$|\psi\rangle = \sum_j \gamma_j |\psi^{(j)}\rangle$$

Тогда функцию $f(A)$ можно определить с помощью соотношения

$$f(A)|\psi\rangle = \sum_j \gamma_j f(\alpha^{(j)}) |\psi^{(j)}\rangle \quad (\text{п.12})$$

112.

Пусть далее $P^{(j)}$ - проекционный оператор для собственного вектора $|\psi^{(j)}\rangle$, то есть

$$P^{(j)}|\psi\rangle = \gamma_j|\psi^{(j)}\rangle,$$

тогда

$$f(A) = \sum_j f(\alpha^{(j)})P^j \quad (\text{п.13})$$

Пользуясь этими определениями нетрудно показать, что

- a) оператор e^{iA} существует и унитарен, если оператор A эрмитов;
- b) $e^{A+B} = e^A e^B$, если операторы A и B – коммутируют.

Выведем ещё одно полезное коммутационное соотношение.

Если

$$qp - pq = i\hbar$$

то нетрудно найти, что

$$q^2p - pq^2 = q(qp - pq) + (qp - pq)q = i\hbar q + i\hbar q = 2i\hbar$$

$$q^3p - pq^3 = q(q^2p - pq^2) + (qp - pq)q^2 = 2i\hbar q^2 + i\hbar q^2 = 3i\hbar q^2$$

и по индукции

$$q^n p - p q^n = n i \hbar q^{n-1}$$

Определяя производную от функции $f(q)$ оператора q соотношением

$$f'(q) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\{f(q + \varepsilon \mathbf{1}) - f(q)\}}{\varepsilon},$$

нетрудно получить

$$f(q)p - pf(q) = i\hbar \frac{\partial}{\partial q} f'(q); \quad (\text{п.14})$$

здесь $f(q)$ – какой-либо полином от q или функция от оператора, которую можно разложить в ряд по степеням переменной q .

Аналогичное рассмотрение для отрицательных n распространяет результат (п.14) на функции, которые можно разложить в ряд по обратным степеням q .

Если γ – некоторая постоянная, то

$$(q - \gamma)p - p(q - \gamma) = i\hbar$$

и найденный результат будет справедлив для функций, допускающих разложение в ряд по положительным и отрицательным степеням разности $(q - \gamma)$, тем самым он будет справедлив и для всех аналитических функций.

Канонические преобразования

Каноническое преобразование – это такое преобразование, при котором каждый вектор $|\psi\rangle$ преобразуется согласно формуле $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$, а каждый линейный оператор – согласно формуле $A' = UAU^*$, где U – унитарный оператор. Так как $U^* = U^{-1}$, то при этом преобразовании остаются неизменными основные соотношения квантовой механики.

Например, из соотношения $A|\psi\rangle = |\varphi\rangle$ следует, что $UAU^*U|\psi\rangle = U|\varphi\rangle$ или что $A'|\psi'\rangle = \varphi'$.

Ещё примеры: из $B = A_1A_2$ следует, что $UBU^* = UA_1U^*UA_2U^*$ или что $B' = A'_1A'_2$, а из $\langle\varphi|\psi\rangle = \gamma$ вытекает, что $\langle\varphi|U^*U|\psi\rangle = \gamma$, то есть $\langle\varphi'|\psi'\rangle = \gamma$.

Канонические преобразования можно представить как вращения системы координат в гильбертовом пространстве. Так, если заданы две произвольные полные ортонормированные системы векторов $|\psi^{(j)}\rangle$ и $|\delta^{(k)}\rangle$, то всегда можно найти такое каноническое преобразование U , которое переводит исходную ($|\psi^{(j)}\rangle$) систему векторов в заданную систему ($|\delta^{(k)}\rangle$). Если при этом векторы $|\delta^{(k)}\rangle$ являются собственными векторами оператора A , то матрица A приобретает диагональный вид со своими собственными значениями по диагонали.

Приложение 2. Тензор энергии-импульса

Взаимодействие нелокализованных объектов. Передача энергии и импульса.

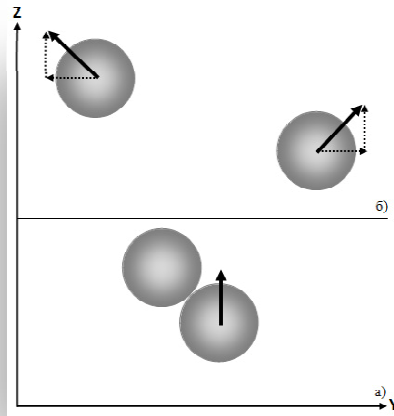


Рис 1. Обмен импульсами при столкновении
 а) положение шаров во время удара
 б) положение шаров в более поздний момент после удара

Передача импульса и энергии между классическими точечными частицами происходит в момент их столкновения. На самом деле, передача импульса связана с более сложным процессом взаимодействия частиц. Во взаимодействии точечных частиц по такой схеме возможна передача импульса только по направлению, совпадающему с направлением движения частицы. Однако для частиц имеющих форму шара возможна передача импульса уже не совпадающего с первоначальным направлением движения. Например, если импульс имеет только z -составляющую движения, а удар не центральный, то в результате удара появляются y -составляющие у обоих шаров (рис. 1).

Сам процесс передачи импульса и энергии от одного шара другому можно представить в виде потока импульса и энергии в кратковременном процессе соприкосновения шаров, который мы назвали столкновением. Здесь важно отметить, что поток передаваемого импульса может быть направлен не только в направлении самого импульса, как в случае точечных частиц, но и в

Квантовая механика (Принципы)

другом направлении, в приведённом примере – в перпендикулярном направлении. Ясно, что для описания подобных потоков импульсов необходимо использовать тензорные объекты. Такой способ описания передачи импульса оказывается чрезвычайно полезным при описании взаимодействия нелокализованных физических объектов.

Обозначим через $t_{\alpha\beta}$ поток передаваемой α -компоненты импульса через β -направление. Тогда всевозможные потоки импульсов всех координатных составляющих можно представить в виде тензора потока импульса:

$$t_{\alpha\beta} = \begin{vmatrix} t_{xx} & t_{xy} & t_{xz} \\ t_{yx} & t_{yy} & t_{yz} \\ t_{zx} & t_{zy} & t_{zz} \end{vmatrix} \quad (\text{п2.1})$$

На рис. 2. иллюстрируется схема передачи y -составляющей импульса от всех трёх координатных направлений.

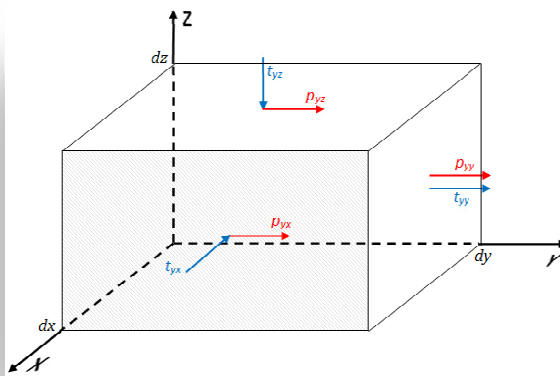


Рис 2. Потоки y -составляющей импульса через три координатных направления

Составляющая импульса p_{yz} передаётся через площадку с нормальным вектором параллельным оси Z ; поток импульса через эту площадку обозначен как t_{yz} . Механизм подобной передачи импульса можно представить как тангенциальное воздействие на верхнюю часть объёма с помощью трения.

Аналогичное воздействие возможно и со стороны поверхности перпендикулярной оси X . Здесь поток импульса t_{yx} сообщает телу величину импульса p_{yx} . Опять-таки, механически подобная передача реализуется с помощью механизма трения.

116.

Наконец, передача импульса p_{yy} по направлению самого импульса. Поток импульса t_{yy} сообщает телу величину импульса p_{yy} с помощью тянущего или толкающего (удара) воздействия в направлении передаваемого импульса.

Рассмотрим, как будет выглядеть закон сохранения импульса в подобном механизме его передачи. Общим определением потока импульса является соотношение :

$$dp_\alpha = t_{\alpha\beta} dS_\beta \quad (\text{п2.2})$$

Это соотношение можно рассматривать как поток вектора \vec{t}_α через ортогональную к нему проекцию площадки $d\vec{S}$.

Тогда величина передаваемой, например, y -компоненты импульса через заштрихованную площадку dS_x может быть записана в виде:

$$dp_y^{(1)} = t_{yx}(dx)dS_x \quad (\text{п2.3})$$

Величина передаваемого импульса через обе площадки изображенного объёма ортогональные оси X должна быть записана так:

$$dp_y = t_{yx}(dx)dS_x - t_{yx}(0)dS_x \quad (\text{п2.4})$$

Первый и второй члены в это выражение входят с разными знаками, поскольку вектора, нормальные к этим площадкам направлены в противоположные стороны. Учитывая, что $dS_x = dydz$ соотношение (п2.4) можно преобразовать и представить в виде:

$$dp_y = \frac{\partial t_{yx}}{\partial x} dx dy dz = \frac{\partial t_{yx}}{\partial x} dV$$

Однако в передаче импульса в y -направлении участвуют и остальные площадки, ортогональные осям Y и Z . С учётом этого, перейдя к индексной нотации координатных составляющих, перепишем последнее соотношение в виде:

$$dp_y = \frac{\partial t_{y\beta}}{\partial x_\beta} dV$$

Наконец, в общем случае передачи α -составляющей через все площадки можно записать:

$$dp_\alpha = \frac{\partial t_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} dV \quad (\text{п2.5})$$

В двух последних соотношениях подразумевается суммирование по индексу β .

Из соотношения (п2.5) можно видеть, что если
Квантовая механика (Принципы)

$$\frac{\partial t_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = 0 \quad (\text{п2.6})$$

то $dp_\alpha = 0$. Это означает, что при отсутствии потоков импульса через поверхность, ограничивающую объём dV , импульс среды, заключённой в этом объёме сохраняет своё значение. Сам же закон сохранения импульса приобретает дифференциальную форму п2.6) в виде равенства нулю дивергенции тензора плотности потока импульса.

Дифференциальную форму выражения закона сохранения для произвольного вектора или тензора можно сформулировать в общем виде: *сохранение векторной или тензорной величины можно представить, как равенство нулю дивергенции потока этого вектора или тензора.*

Замечательным является факт симметричности тензора потока импульса $t_{\alpha\beta} = t_{\beta\alpha}$, который следует, в свою очередь, из закона сохранения момента импульса. Покажем это.

Момент импульса материальной точки определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \vec{M} = [\vec{r} \vec{p}] &= \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} = \\ &= \vec{i}(yp_z - zp_y) + \vec{j}(zp_x - xp_z) + \vec{k}(xp_y - yp_x) \end{aligned}$$

Перейдя к индексной нотации ($\alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3$), компоненты правой части можно представить в виде

$$M_{\alpha\beta} = (x_\alpha p_\beta - x_\beta p_\alpha)$$

Тогда изменение момента импульса $dM_{\alpha\beta}$ можно записать в виде:

$$dM_{\alpha\beta} = x_\alpha dp_\beta - x_\beta dp_\alpha \quad (\text{п2.7})$$

Учитывая (п2.2), получаем

$$dM_{\alpha\beta} = x_\alpha t_{\beta\gamma} ds_\gamma - x_\beta t_{\alpha\gamma} ds_\gamma = (x_\alpha t_{\beta\gamma} - x_\beta t_{\alpha\gamma}) ds_\gamma \quad (\text{п2.8})$$

Мы выяснили, что закон сохранения вектора в дифференциальной форме должен быть выражен как равенство нулю дивергенции потока этого вектора. Тогда из равенства (п2.8) получаем:

$$\frac{\partial}{\partial x_\gamma} (x_\alpha t_{\beta\gamma} - x_\beta t_{\alpha\gamma}) = 0 \quad (\text{п2.9})$$

Выполнив операцию дифференцирования, с учётом (п2.6), замечая, что $\partial x_\alpha / \partial x_\gamma = \delta_{\alpha\gamma}$ и $\partial x_\beta / \partial x_\gamma = \delta_{\beta\gamma}$ и находим:

$$t_{\alpha\beta} = t_{\beta\alpha} \quad (\text{п2.10})$$

Для релятивистского обобщения тензора потока импульса (п2.1) необходимо добавить “нулевые” энергетические компоненты, то есть придать тензору вид:

$$T^{ik} = \begin{vmatrix} W & S_x & S_y & S_z \\ S_x & t_{xx} & t_{xy} & t_{xz} \\ S_y & t_{yx} & t_{yy} & t_{yz} \\ S_z & t_{zx} & t_{zy} & t_{zz} \end{vmatrix} \quad (\text{п2.11})$$

Например, добавив к компонентам второй строки (п2.1) $\|t_{yx}, t_{yy}, t_{yz}\|$ энергетическую составляющую, получим третью строку тензора (п2.11) $\|S_y, t_{yx}, t_{yy}, t_{yz}\|$. Верхняя строка (п2.11) появилась для того, чтобы удовлетворить требованию симметрии тензора T^{ik} . Полученный тензор называется тензором энергии-импульса.

Выясним физический смысл новых компонент тензора T^{ik} . Закон сохранения 4-импульса в дифференциальном виде принимает вид:

$$\frac{\partial T^{ik}}{\partial x^k} = 0 \quad (\text{п2.12})$$

В силу теоремы Гаусса-Остроградского в четырёхмерной псевдоевклидовой геометрии^[6]

$$\int \frac{\partial T^{ik}}{\partial x^k} d\Omega = \oint T^{ik} dS_k \quad (\text{п2.13})$$

Поэтому

$$\oint T^{ik} dS_k = 0 \quad (\text{п2.14})$$

Интегрирование в (п2.14) производится по замкнутой трёхмерной гиперповерхности. Изобразим эту гиперповерхность, как 4-пространство, заключённое между двумя параллельными гиперповерхностями $x^{(1)} = t_1$ и $x^{(2)} = t_2$ с бесконечно удалёнными

боковыми гранями. Значения T^{ik} на бесконечно удалённых боковых гранях обращаются в нуль, а сам интеграл принимает вид:

$$\int T^{i0}(t_1)dS_0 - \int T^{i0}(t_2)dS_0 = 0 \quad (\text{п2.15})$$

где интегрирование производится по всему трёхмерному пространственному объёму.

Последнее соотношение с учётом $dS_0 = dV$ тождественно следующему:

$$P^i = \int T^{i0}dV = \text{const} \quad (\text{п2.16})$$

В силу принципа релятивистской ковариантности пространственным компонентам 4-импульса P^i необходимо придать смысл пространственных компонент импульса, а временной компоненте - смысл энергии. Тогда вектор с составляющими T^{10} , T^{20} , T^{30} можно назвать *плотностью импульса*, а величину $W = T^{00}$ можно рассматривать как *плотность энергии*.

Для выяснения смысла компонент T^{0i} напишем уравнение сохранения (п2.12) для 0-компоненты, отделив в нём пространственную и временные производные:

$$\frac{\partial T^{00}}{\partial t} + \frac{\partial T^{0\alpha}}{\partial x^\alpha} = 0 \quad (\text{п2.17})$$

Проинтегрировав уравнение (п2.17) по некоторому объёму пространства V , получаем:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int T^{00}dV + \int \frac{\partial T^{0\alpha}}{\partial x^\alpha} dV = 0$$

или преобразуя второй интеграл по трёхмерной теореме Гаусса-Остроградского

$$\frac{\partial}{\partial t} \int T^{00}dV = - \oint T^{0\alpha}df_\alpha \quad (\text{п2.18})$$

где интеграл в правой части берётся по поверхности, охватывающей объём V . В левой части равенства стоит скорость изменения энергии, находящейся в объёме V , а справа поток энергии, протекающий через границу этого объёма. Тогда вектор \vec{S} с составляющими T^{01} , T^{02} , T^{03} есть плотность этого потока – количество энергии, протекающей в единицу времени через единицу поверхности. Таким образом, мы приходим к важному выводу о том, что требование релятивистской ковариантности, заключённое в тензорном характере величин T^{ik} , приводит к существованию связи между потоком энергии и импульса:

120.

плотность потока энергии равна плотности импульса. Это обстоятельство и выражено свойством симметрии тензора энергии-импульса.

Аналогичным образом можно показать, что компоненты $T^{a\beta} = t_{a\beta}$ в (п2.11) составляют тензор плотности потока импульса, что находится в полном согласии с исходными посылками релятивистского обобщения потока импульса.

Здесь мы приходим ещё к одному важному выводу. *При релятивистском обобщении формального метода описания передачи импульса с помощью потоков мы обнаружили новую возможность описания динамики материальных нелокализованных сущностей, обладающих плотностями энергии и импульса и могущих обмениваться ими с помощью реальных потоков.* И речь здесь идёт, конечно, о полях.

Приложение 3. Группа Лоренца

Преобразованием Лоренца называется вещественное, линейное преобразование координат пространства-времени Минковского, сохраняющее величину пространственно-временного интервала. Новые координаты x'^i точки в пространстве-времени получаются из старых координат x^k по формулам

$$x'^i = L^i_k x^k + a^i \quad (\text{п3.1})$$

Вещественный вектор a^i определяет трансляцию пространственно-временных осей. Преобразования (п3.1) при $a^i = 0$ ¹⁴⁾ называются *однородными преобразованиями Лоренца*¹⁵⁾

$$x'^i = L^i_k x^k \quad (\text{п3.2})$$

Поднимая или опуская индексы у матрицы L^i_k с помощью метрического тензора g_{ik} можно получить матрицы L^i_k, L^{ik}, L_{ik} . Задание одной из этих матриц определяет преобразование Лоренца. Условия вещественности и инвариантности величины интервала имеют вид

$$L^*_{ik} = L_{ik} \quad (\text{п3.3})$$

$$L_{ni} L^{nk} = L_{in} L^{kn} = \delta_i^k \quad (\text{п3.4})$$

Следовательно,

$$\det|L^i_k| = \pm 1, \quad (\text{п3.5})$$

а обратное преобразование можно записать в виде

$$x^i = x'^k L^i_k \quad (\text{п3.6})$$

Однородные преобразования при выполнении условия (п3.5) образуют полную группу Лоренца: группу вещественных линейных преобразований, сохраняющих скалярное произведение четырёхмерных векторов.

Если $L^{00} > 0$, то преобразование сохраняет знак временной компоненты времениподобных векторов. Такие преобразования

¹⁴⁾ Группа, образованная преобразованиями Лоренца и трансляциями, обычно называется *неоднородной группой Лоренца* или группой Пуанкаре.

¹⁵⁾ Преобразования, обладающие такими свойствами, можно представить как вращения в 4-мерном псевдоевклидовом пространстве-времени.

122.

называются ортохорными, они образуют *ортохронную группу Лоренца*.

Если дополнительно и $\det|L^i_k| = 1$, то преобразования сохраняют ориентацию осей координат в обычном пространстве. Эти преобразования образует *собственную группу Лоренца*, которую мы будем обозначать \mathcal{L}_0 .

Преобразования собственной группы Лоренца можно рассматривать как последовательность бесконечно малых преобразований. Найдём матрицу L_{ik} инфинитезимального (бесконечно малого) преобразования.

Преобразования координат пространства-времени при инфинитезимальном преобразовании Лоренца $x'^i = L^i_m x^m$ запишем с точностью до членов первого порядка малости в виде

$$L^i_m = {}^0L^i_m + \varepsilon \omega^i_m \quad (\text{п3.7})$$

Здесь ${}^0L^i_m$ -матрица преобразования в нулевом приближении, то есть тождественного преобразования, ε - бесконечно малая скалярная величина.

Представим преобразование компонент метрического тензора при преобразованиях координат (п3.7) в аналогичном виде

$$g'_{ik} = {}^0g_{ik} + \delta g_{ik} \quad (\text{п3.8})$$

Здесь ${}^0g_{ik}$ - исходный метрический тензор, вид которого в декартовой системе координат представляется, как известно, диагональной матрицей с сигнатурой (+, -, -, -), δg_{ik} - тензор бесконечно малых изменений компонент метрического тензора при преобразованиях (п3.7).

Из условия инвариантности нормы вектора X^i при преобразованиях Лоренца получаем равенство

$$X^i X'^k g'_{ik} = X^m X^n L^i_m L^k_n g'_{ik} = X^m X^n g_{mn}$$

из которого следует

$$g_{mn} = L^i_m L^k_n g'_{ik} \quad (\text{п3.9})$$

Подставив (п3.7) и (п3.8) в (п3.9), получим

$$\begin{aligned} g_{mn} &= ({}^0L_m^i + \varepsilon\omega_m^i)({}^0L_n^k + \varepsilon\omega_n^k)({}^0g_{ik} + \delta g_{ik}) = \\ &= {}^0L_m^i {}^0L_n^k {}^0g_{ik} + \varepsilon {}^0g_{ik} ({}^0L_m^i \omega_n^k + {}^0L_n^k \omega_m^i) + {}^0L_m^i {}^0L_n^k \delta g_{ik} \end{aligned} \quad (\text{п3.10})$$

Группируя в правой части (п3.10) члены нулевого порядка и приравнивая к левой, получим

$$g_{mn} = {}^0L_m^i {}^0L_n^k {}^0g_{ik} = {}^0L_m^i {}^0L_n^k g_{ik} \quad (\text{п3.11})$$

При получении последнего равенства учтено очевидное соотношение ${}^0g_{ik} = g_{ik}$.

Из (п3.11) следует цепочка тождественных равенств

$$g_{n}^m = {}^0L^{sm} {}^0L_n^k g_{sk} = {}^0L_k^m {}^0L_n^k \Rightarrow {}^0L_k^m = \delta_k^m \quad (\text{п3.12})$$

Из последнего равенства получаем

$${}^0L_{mk} = g_{mk} \quad (\text{п3.13})$$

Преобразуем второй член последнего равенства (п3.10), учитывая (п3.12)

$$\begin{aligned} &\varepsilon {}^0g_{ik} ({}^0L_m^i \omega_n^k + {}^0L_n^k \omega_m^i) + {}^0L_m^i {}^0L_n^k \delta g_{ik} = \\ &= \varepsilon {}^0g_{ik} (\delta_m^i \omega_n^k + \delta_n^k \omega_m^i) + \delta_m^i \delta_n^k \delta g_{ik} = \\ &= \varepsilon g_{mk} \omega_n^k + \varepsilon g_{in} \omega_m^i + \delta g_{mn} = \\ &= \varepsilon \omega_{mn} + \varepsilon \omega_{nm} + \delta g_{mn} = \varepsilon (\omega_{mn} + \omega_{nm}) + \delta g_{mn} \end{aligned}$$

С учётом этого равенства из (п3.10) получаем

$$g_{mn} = {}^0g_{mn} + \varepsilon (\omega_{mn} + \omega_{nm}) + \delta g_{mn}$$

или

$$\varepsilon (\omega_{mn} + \omega_{nm}) = -\delta g_{mn}$$

При преобразованиях в декартовой системе координат, очевидно $\delta g_{mn} = 0$

Тогда, окончательно имеем

$$\omega_{ik} = -\omega_{ki} \quad (\text{п3.14})$$

Полученное соотношение выражает свойство антисимметрии тензора ω_{ik}

Нетрудно убедиться в том, что

$$\omega_{ik} = \omega_{ik}^* \quad (\text{п3.15})$$

Таким образом, ω_{ik} - вещественный антисимметричный тензор.

124.

Для выяснения геометрического смысла компонент тензора ω_{ik} рассмотрим сначала случай трёхмерного пространства в декартовой системе координат.

Векторное произведение двух векторов $\vec{A}_{(\alpha)}$ и $\vec{B}_{(\beta)}$ в 3-векторном анализе выражается формулами

$$\begin{aligned} \vec{C} &= [\vec{A}_{(\alpha)} \vec{B}_{(\beta)}] = \vec{n} |\vec{A}_{(\alpha)}| |\vec{B}_{(\beta)}| \sin \varphi = \\ &= \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ A_{(\alpha)}^1 & A_{(\alpha)}^2 & A_{(\alpha)}^3 \\ B_{(\beta)}^1 & B_{(\beta)}^2 & B_{(\beta)}^3 \end{vmatrix} = \\ &= \vec{i}(A_{(\alpha)}^2 B_{(\beta)}^3 - A_{(\alpha)}^3 B_{(\beta)}^2) + \vec{j}(A_{(\alpha)}^3 B_{(\beta)}^1 - A_{(\alpha)}^1 B_{(\beta)}^3) + \\ &+ \vec{k}(A_{(\alpha)}^1 B_{(\beta)}^2 - A_{(\alpha)}^2 B_{(\beta)}^1) \end{aligned} \quad (\text{п3.16})$$

Здесь: φ – угол между векторами $\vec{A}_{(\alpha)}$ и $\vec{B}_{(\beta)}$, $A_{(\alpha)}^i$ и $B_{(\beta)}^j$ – компоненты этих векторов, \vec{n} – орт вектора \vec{C} , $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ – орты декартовой системы координат.

Из (п3.16) видим, что покомпонентное представление вектора \vec{C} , то есть результата векторного произведения векторов $\vec{A}_{(\alpha)}$ и $\vec{B}_{(\beta)}$, возможно в дух вариантов: в одноиндексном (k) - векторном и двухиндексном (i, j) - тензорном

$$C^k = A_{(\alpha)}^i B_{(\beta)}^j - A_{(\alpha)}^j B_{(\beta)}^i, \quad (\text{п3.17})$$

причём тройка (i, j, k) является одной из чётных перестановок чисел $(1, 2, 3)$. Тройки чисел соответствующие нечётным перестановкам будут соответствовать вектору с противоположным направлением. Индексы i и j индексируют компоненты векторов $\vec{A}_{(\alpha)}$ и $\vec{B}_{(\beta)}$, лежащих в плоскости, которую обозначим как (α, β) , а индекс k – компоненты вектора \vec{C} , ортогонального плоскости (α, β) .

Фактически, использование свойств векторного произведения (п3.16) и (п3.17) позволяет разбить евклидовое пространство на прямую сумму двух взаимно ортогональных подпространств: двухмерного – плоскости (α, β) , лежащей на двух векторах $\vec{A}_{(\alpha)}$ и $\vec{B}_{(\beta)}$ и одномерного, образованного вектором \vec{C} , ортогональным построенной плоскости, а формулы (п3.17)

позволяют связать компоненты векторов этих подпространств. Отсюда же видно, что при вращении плоскости (α, β) вокруг собственной оси (образованной вектором \vec{C}) тривиально выполняется свойство инвариантности одномерного подпространства, образованного тем же вектором \vec{C} ; при этом сохраняется как сам вектор \vec{C} , так и комбинация (п3.17).

Рассмотрим внешнюю форму Картана $[A^i, B^j]_{\alpha\beta}$ для компонент $A^i_{(\alpha)}$ и $B^j_{(\beta)}$ векторов $\vec{A}_{(\alpha)}$ и $\vec{B}_{(\beta)}$ (см.^[6], Приложение)

$$[A^i, B^j]_{\alpha\beta} \equiv (\delta_m^i \delta_n^j - \delta_m^j \delta_n^i) A_{(\alpha)}^m B_{(\beta)}^n, \quad (\text{п3.18})$$

где в качестве векторов $\vec{A}_{(\alpha)}$ и $\vec{B}_{(\beta)}$ будем рассматривать орты плоскостей декартовой системы координат. Так, если $\vec{A}_{(1)}$ - орт оси X^1 , а $\vec{B}_{(2)}$ - орт оси X^2 , то $\vec{A}_{(1)}$ в покомпонентной форме примет вид $\vec{A}_{(1)} = (1, 0, 0)$, а $\vec{B}_{(2)} = (0, 1, 0)$. Этим ортам будет соответствовать координатная плоскость (X^1, X^2) . Очевидно, в общем случае

$$A_{(\alpha)}^m = \delta_\alpha^m \text{ и } B_{(\beta)}^n = \delta_\beta^n, \quad (\text{п3.19})$$

Из (п3.18) с учётом (п3.19) получаем

$$[A^i, B^j]_{\alpha\beta} \equiv (\delta_m^i \delta_n^j - \delta_m^j \delta_n^i) \delta_\alpha^m B_\beta^n = \delta_\alpha^i \delta_\beta^j - \delta_\alpha^j \delta_\beta^i$$

Введём обозначение

$$Z_{(\alpha\beta)}^{ik} = [A^i, B^j]_{\alpha\beta} = \delta_\alpha^i \delta_\beta^j - \delta_\alpha^j \delta_\beta^i \quad (\text{п3.20})$$

Очевидно, что тензор $Z_{(\alpha\beta)}^{ik}$ антисимметричен по тензорным индексам i и j и имеет две отличных от нуля компоненты: $i = \alpha, j = \beta$ и $i = \beta, j = \alpha$, одна из которых равна $+1$, а другая -1 .

Опуская тензорные индексы в (п3.20) с помощью метрического тензора, окончательно получим

$$Z_{i,(\alpha\beta)} = g_{im} g_{kn} Z_{(\alpha\beta)}^{mn} = g_{i\alpha} g_{k\beta} - g_{i\beta} g_{k\alpha} \quad (\text{п3.21})$$

Сравнивая (п3.20) с (п3.17) с учётом (п3.19), видим, что (п3.21) фактически представляет собой в тензорном виде векторное произведение пар векторов, соответствующих ортам координатных плоскостей (α, β) . Так при $\alpha = 1, \beta = 2$ формула (п3.21) даёт векторное произведение орт осей X^1 и X^2 , равное орту оси X^3 , то

126.

есть внешняя форма Картана описывает ортогональное подпространство, дополнительное к плоскости (1,2) а комбинация $[x^i, x^j]_{12} = \delta_1^i \delta_2^j - \delta_2^j \delta_1^i$ остаётся инвариантной при вращении плоскости (1,2) вокруг собственной оси X^3

Повторяя приведённые рассуждения, начиная с интерпретации соотношения (п3.17), придём к обобщению (п3.21) для четырёхмерного псевдоевклидова пространства-времени; в этом случае индексы i, k, α, β будут принимать значения из множества $(0, 1, 2, 3)$. Единственным отличием в схеме для четырёхмерного пространства является то, что ортогональными дополнениями к двумерным координатным плоскостям будут уже двухмерные подпространства, но также инвариантные относительно вращений координатных плоскостей.

Существует шесть независимых преобразований, связанных с вращением координатных плоскостей. Вращения в плоскостях $X^1 X^2, X^2 X^3, X^3 X^1$ есть вращения в пространстве вокруг осей X^3, X^1, X^2 , соответственно. Вращения в плоскостях $X^1 X^0, X^2 X^0, X^3 X^0$ представляют собой частные преобразования Лоренца (переход к движущейся системе координат в направлениях X^1, X^2, X^3 , соответственно)

Любое инфинитезимальное преобразование Лоренца (п3.7) может быть разложено на сумму шести независимых бесконечно малых вращений плоскостей $X^1 X^2, X^2 X^3, X^3 X^1, X^1 X^0, X^2 X^0, X^3 X^0$. При этих вращениях остаются инвариантными ортогональные дополнения к вращаемым плоскостям, а значит и (п3.21). Само вращение характеризуется бесконечно малым углом поворота ε . Тогда (п.3.7) с учётом (п3.13) и (п3.21) принимает вид:

$$L_{ik} = g_{ik} + \varepsilon Z_{ik,(\alpha\beta)} \quad (\text{п3.22})$$

Здесь индексы (i, k) определяют элементы матрицы Лоренца, а (α, β) – плоскость вращения; параметр ε – бесконечно малый угол поворота, в

чём можно убедиться при рассмотрении известных формул преобразования при вращениях¹⁶⁾.

Кроме бесконечно малых преобразований можно определить преобразования различных отражений: пространственного отражения s ($x'^0 = x^0, x'^k = -x^k$) и отражения времени t ($x'^0 = -x^0, x'^k = x^k$). Ортохронная группа состоит из группы \mathcal{L}_0 , отражения s и преобразований из произведения $s\mathcal{L}_0$. Полная группа образованна преобразованиями из $\mathcal{L}_0, s\mathcal{L}_0, t\mathcal{L}_0$ и $st\mathcal{L}_0$. Свойства этих четырёх подмножеств полной группы приведены в табл. п3.1

Таблица п3.1

| | $\det L_k^i $ | L_0^0 | Группа |
|-------------------|---------------|---------|-------------|
| \mathcal{L}_0 | +1 | > 0 | собственная |
| $s\mathcal{L}_0$ | -1 | > 0 | ортохронная |
| $t\mathcal{L}_0$ | -1 | < 0 | полная |
| $st\mathcal{L}_0$ | +1 | < 0 | |

¹⁶⁾ Если новые координаты получены из старых вращением на конечный угол φ вокруг оси X^3 , то имеем: $X'^1 = X^1 \cos \varphi + X^2 \sin \varphi, X'^2 = X^2 \cos \varphi - X^1 \sin \varphi, X'^3 = X^3, X'^0 = X^0$. Если они получены из старых при частном преобразовании Лоренца, соответствующему движению вдоль оси X^1 со скоростью $v = \text{tg} \varphi$, то имеем: $X'^1 = X^1 \text{ch} \varphi - X^0 \text{sh} \varphi, X'^0 = X^0 \text{ch} \varphi - X^1 \text{sh} \varphi, X'^2 = X^2, X'^3 = X^3$.

Рассмотренные выше преобразования отвечают случаю, когда $\varphi = \varepsilon$ - бесконечно малой величине.

Приложение 4. Принципы обработки информации в одной модели наблюдения

Мысль изреченная есть ложь

/ Принцип дополнительности в изложении ФИ Гютчева.1830 г. /

Если иметь ввиду, например, задачу измерения массы какой либо элементарной частицы, то здесь необходимо сразу отметить: для измерения массы элементарной частицы нет прямого инструментария, аналогичного тому, который используется в классической физике в виде весов или динамометров. Здесь используются косвенные данные, например, по результатам сечений, углов рассеяния и другим (их много). Одним словом, на самом деле измеряются не непосредственно требуемые параметры, а то что доступно наблюдению и измерению. Посредником же между параметрами, требующими оценки или измерения, и доступными данными является некая теория, обеспечивающая саму процедуру измерения функциональными связями между измеряемыми и целевым параметрами.

Известно, что *в процесс измерения вмешиваются случайные факторы и полное исключение их влияния непреодолимо*. Поэтому математическим аппаратом, адекватно описывающим такие процедуры, является теория вероятностей и математической статистики, базовыми понятиями которых являются вероятности и функции распределения вероятностей. Тогда для оценки параметров задач, необходимо, во-первых, найти вид функций распределения показателей или величин, во-вторых, оценить параметры функций распределения, параметры модели измерения по тем первичным данным, которые реально доступны и достоверны.

Решение подобной проблемы, названной Моррисом “проклятием теоретика”, представляет чрезвычайно сложную задачу из-за возникающего не так уж редко противоречия между адекватностью модели и доступностью необходимой информации. Попытки аналитического решения задач, связанных с практической реализацией процедур измерения и решаемых в реальном времени сопутствующих задач, всегда сопровождаются для разработчика тревожной мыслью о недостаточности данных в существующем *Квантовая механика (Принципы)*

информационном потоке. Проклятием теоретика является его бестактный коллега, внезапно воскликнувший, что модель действительно хороша, но для нее невозможно собрать необходимых исходных данных. Здесь для теоретика предоставляются две возможности: либо он описывает адекватную, но неработоспособную модель, либо разрабатывает работоспособную модель, допуская существование “ножниц” между необходимой и доступной информацией.

И здесь мы наблюдаем возникновение ещё одного момента, сопутствующего процедурам измерений (наряду с неотвратимым вмешательством случайных факторов), вынуждающий нас ввести в теорию измерения существенный элемент неопределенности. Мера этой неопределенности будет отражать “ширину ножниц” между необходимой и доступной информацией.

В решении подобных задач необходимо выделить несколько взаимно дополнительных аспектов.

Первый аспект связан с использованием так называемого принципа инвариантности, отчетливо сформулированного Донскером^[1] на основе идей Колмогорова (1935), Эрдеша и Каца (1946,1947). Дальнейшее развитие метода связано с работами Дуба (1956), Прохорова (1953,1956), Скорохода (1956), Биллингсли^[2] и другими. Применение принципа инвариантности базируется на аппарате предельных теорем теории вероятностей. Феноменологической основой применения этого принципа является известный факт нежесткой зависимости распределений макропараметров от микрохарактеристик системы, что позволяет использовать для последних модельные распределения. В физике, например, известен факт: предельным макрораспределением для частиц, подчиняющихся статистикам Ферми и Дирака является общее распределение Максвелла.

Существует разные частные формулировки принципа инвариантности, связанные с конкретными исследованиями ряда авторов, а простейший вариант принципа дает формулировка центральной предельной теоремы теории вероятностей.

Хорошо известно проявление этого принципа при описании физических систем. По-видимому, именно формулировке принципа инвариантности на эвристическом уровне мы обязаны успешному

130.

описанию статистических систем, то есть систем со многими внутренними степенями свободы, с помощью термодинамических методов. В общем случае к подобным системам относятся такие, у которых относительно детерминированный характер наблюдаемых процессов сочетается с их стохастической природой. Принцип инвариантности широко и успешно используется также и при исследовании экономических систем. Формальная модель систем этого класса, которые называются макросистемами, описывает преобразование случайных межэлементных связей (*микроуровень*) в некоторый вполне регулярный процесс (*макроуровень*).

Таким образом, принцип инвариантности дает возможность устанавливать зависимости между характеристиками, описываемыми двумя типами параметров: свойства параметров (макро-) одного типа определяются через свойства многих параметров (микро-) другого типа.

Второй аспект связан с использованием концепции *энтропии* и вариационного *принципа максимума энтропии*, позволяющих получить вид распределения при различных формах ограничений. Параметры получающихся распределений представляют собой множители Лагранжа, учитывающие информацию о виде распределения.

Применение принципа максимума энтропии позволяет учесть максимально “добросовестную” информацию о виде функции распределения. Существо дела в следующем. Чаще всего свойства случайных величин выражаются в виде равенств некоторых комбинаций их значений. Такие ограничения несут определенную информацию относительно вида распределений случайных величин. В этом случае решение задачи определения вида распределения должно учитывать информацию, содержащуюся в этих ограничениях, и только эту информацию. Классические работы по теории информации, устанавливающие связь между понятиями энтропии и информации позволяют именно так трактовать принцип максимума энтропии

В современной физике принцип максимума энтропии является одним из основных методологических принципов, а понятие энтропии является универсальной характеристикой всех физических

Квантовая механика (Принципы)

процессов и служит фундаментальным объединяющим их началом. Полное воплощение принципы инвариантности и максимума энтропии находят в термодинамическом пределе статистических теорий, рассматриваемых с помощью ансамблей Гиббса. Эффективность применения в различных областях знаний выдвигает принцип максимума энтропии в ряд основополагающих принципов при исследовании сложных систем.

Применение *принципа максимального правдоподобия* является *третьим аспектом* решения задач обработки непосредственных результатов измерений и оценки параметров рассматриваемой модели управления. Существование связи энтропии с функцией правдоподобия, установленной по свидетельству Вильсона [3] Линдлеем, позволяет развить информационную (энтропийную) интерпретацию процедуры статистической оценки параметров. С помощью метода максимального правдоподобия оцениваются множители Лагранжа условного максимума энтропии непосредственно через первичные данные, причем критерий правдоподобия обеспечивает максимальный учет информации выборочной совокупности о параметрах решаемой задачи.

Взаимосвязь информации, энтропии и правдоподобия, объединение принципов инвариантности, максимума энтропии и правдоподобия дают возможность с единой информационной точки зрения описать процедуру преобразования информации от регистрации первичных данных до параметров рассматриваемой модели. Информационная трактовка этой процедуры позволяет решить задачу установления соответствия между доступной информацией и требуемыми в процессе решений параметрами системы даже при наличии “ножниц” между необходимой и доступной информацией. Неопределенность, присущая подобной процедуре преобразования информации весьма естественным образом учитывается введением энтропии, как одной из основных характеристик исследуемой системы. Процедуру преобразования исходной информации в численные значения измеряемых параметров или показателей, будем называть моделью *наблюдения*. Точность или адекватность модели наблюдения также формализуется с использованием понятия энтропии.

В общем виде модель наблюдения можно описать следующим образом. Известно^[4], что моменты однозначно определяют распределения случайных величин при выполнении некоторых условий. К основным характеристикам или моментам случайной величины следует отнести: область ее определения (нормировка), меру положения (среднее) и меру разброса (дисперсия). Более высокие моменты корректируют ожидаемые частоты или вероятности для значений, находящихся в интервале с серединой и шириной, определяемыми первым и вторым моментами. Для большинства расчетов и, в частности, для интервального оценивания достаточную точность обеспечивает знание первых трёх моментов или, в общем случае, какого-либо конечного числа. Учет информации о распределении, которая содержится в моментах, и о моментах через данные выборочной совокупности осуществляется с помощью принципов максимума энтропии и правдоподобия: принцип максимума энтропии при заданных моментах позволяет определить вид распределения, а метод максимального правдоподобия - оценить моменты через наблюдаемые данные, получаемые непосредственно при регистрации этих данных. Целесообразно использовать три момента - нормировку, среднее и дисперсию. Возможности применения моментов более высокого порядка при расчете многомерных задач ограничены временем расчета и памятью ПК. В этом случае, как известно [3, 5], самосогласованной функцией распределения является усеченное нормальное распределение. Принцип инвариантности находит здесь отражение в факте независимости найденного распределения от детальных характеристик данных выборочной совокупности.

Предлагаемая модель наблюдения позволяет устанавливать взаимосвязь параметров, описывающих систему, на уровне их средних значений и дисперсий: соотношения между средними значениями описывают причинные корреляции между параметрами; соотношения между средними и дисперсиями позволяют оценить результаты воздействия случайных и неучтенных факторов, то есть неопределенности значений параметров; соотношения между дисперсиями позволяют установить связь между неопределенностями значений параметров.

В статье [6] (см. также [7]) намечен несколько другой, более общий, подход к описанию результатов наблюдений и представления параметров, характеризующих систему. Основа описания - онтологизация понятия неопределенности, как одного из основных понятий теории. В этом случае детерминистское описание непригодно, а вероятностное описание исключает точку зрения, согласно которой характеристики системы существуют безотносительно к средствам и способам наблюдения. Ведь наблюдение или измерение всегда является некоторой процедурой статистического оценивания. Действительно, даже такие параметры как среднее и дисперсия получаются с помощью определенных алгоритмов, реализующих оценку этих параметров. Однако свойства оценок, полученных с помощью одного алгоритма, могут не совпадать со свойствами оценок тех же параметров, но полученных с помощью другого алгоритма; и более того, свойства оценок, полученных с помощью двух различных алгоритмов, могут быть и противоречивыми. Методологическим принципом, учитывающим это обстоятельство, является широко известный в квантовой механике *принцип дополнительности* Бора(1927). Последовательное применение принципа требует своего аппарата описания наблюдаемых величин. Разработка такого аппарата (оказывается, он существует) требует алгебраизации множества параметров, описывающих систему. Аксиоматизируемая динамическая алгебра позволяет вполне корректно решать вопросы представления наблюдаемых с учетом внутренне присущей неопределенности, эволюции наблюдаемых и их неопределенностей во взаимосвязи с другими наблюдаемыми и, наконец, самого процесса получения информации из среды. Успешное выполнение программы даст возможность описывать *недетерминированные, но причинно связанные процессы*. В настоящее время разработана предыдущая модель преобразования информации, связанная с применением принципов инвариантности, максимума энтропии и максимального правдоподобия.

Пользуясь представленной методологией, опишем в деталях процедуру измерения параметра, принимающего точечные значения, то есть процедуру нахождения его "истинного" значения.

Интервал *всех* возможных значений параметра, которые могут быть получены в процессе измерений, называется *генеральной*

134.

совокупностью. Именно генеральная совокупность содержит всю информацию об измеряемом параметре. Однако в процессе измерения или наблюдения за параметром могут быть получены только дискретное и *конечное* число результатов. Эта совокупность результатов будет называться *выборочной совокупностью*.

Общей задачей статистики является оценка параметров генеральной совокупности через параметры выборочной совокупности, то есть, в конечном счёте, по результатам экспериментов.

Пусть в результате серии измерений параметра X получены численные данные выборочной совокупности: $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$. Можно ли из этих значений принять какое-либо за истинное? Нет! Дело в том, что в процессе измерения возникают непреодолимые случайные факторы, которые всякий раз искажают истинное значение измеряемого параметра. Эти непреодолимые и случайные факторы можно учесть только введя функцию распределения вероятностей для значений генеральной совокупности. *Через использование функции распределения вероятностей для генеральной совокупности мы заведомо вводим учёт неопределённости, связанной с влиянием неконтролируемых факторов на результаты измерений*. Обозначим плотность распределения вероятностей (ПРВ) случайной величины X через $f(x)$. Таким образом, измеряемый параметр X должен представляться парой $(x, f(x))$

Известно, что при выполнении определённых условий функция распределения полностью определяется своими моментами. Ситуация схожа с той, которая возникает при представлении аналитической функции с помощью ряда Тейлора, где функция полностью определяется заданием всех производных в точке, которых - бесконечное счётное множество. Однако для большинства расчётных задач при хорошей сходимости ряда достаточным является учёт всего нескольких членов ряда.

Аналогично и в статистических задачах оценивания значений параметров. Здесь, вообще говоря, при описании измеряемого параметра с помощью свойств случайной величиной (СВ) достаточно знания её первых нескольких моментов. Для оценки же величины значения измеряемого параметра и разброса его значений (точности

определения) в подавляющем большинстве задач достаточным оказывается знание первых трёх моментов: нормировки, среднего и дисперсии, которые определяются через ПРВ по формулам:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx \quad (\text{нормировка} - \text{нулевой момент СВ}) \quad (1)$$

$$\mu = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)dx \quad (\text{среднее} - \text{первый момент СВ}) \quad (2)$$

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \mu)^2 f(x)dx \quad (\text{дисперсия} - \text{второй момент СВ}) \quad (3)$$

Случайные факторы настолько случайны, что для них даже распределения вероятностей неизвестны. Однако принцип инвариантности говорит о том, что для них можно выбрать и модельные распределения, поскольку "сумма" этих модельных распределений асимптотически всё равно будет подчиняться нормальному закону распределения. А решение вариационной задачи максимума энтропии при известных значениях нормировки, среднего и дисперсии даёт также непосредственно нормальное распределение или его усечённый вид.

Об этом же говорит и центральная предельная теорема (ЦПТ) теории вероятностей, как пример проявления "работы" принципа инвариантности: пусть случайная величина X имеет среднее значение μ и дисперсию σ^2 . Если σ^2 конечно, то при стремлении объёма выборки n к бесконечности распределение выборочного среднего

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{i=n} x_i \quad (4)$$

будет стремиться к нормальному со средним μ и дисперсией σ^2/n . Заметим, что здесь ничего не предполагается относительно конкретики функции распределения $f(x)$ случайной величины X .

Формула (4) представляет собой пример важного соотношения, устанавливающего связь между параметром генеральной совокупности μ и его оценкой $\hat{\mu} = \bar{x}$, вычисленной по данным выборочной совокупности, то есть по результатам реальных измерений.

Существуют разные методы оценки параметров генеральной совокупности по данным выборочной совокупности. Разные методы приводят в общем-то к близким численным результатам при больших объёмах выборки, однако свойства полученных оценок могут и отличаться (несмещённость, эффективность, состоятельность). Одним из распространённых методов является метод, использующий принцип максимального правдоподобия. Для оценок среднего и дисперсии генеральной совокупности метод максимального правдоподобия даёт следующие выражения:

$$\hat{\mu} = \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{i=n} x_i \quad (5)$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{i=n} (x_i - \hat{\mu})^2 \quad (6)$$

Эти оценки обладают всеми перечисленными свойствами. В этом и состоит достоинство метода оценок параметров генеральной совокупности с использованием принципа максимального правдоподобия.

Зная $\hat{\mu}$ оценки и $\hat{\sigma}^2$ для параметров μ и σ^2 ПРВ $f(x)$ можно задаться вопросом: какова вероятность $Pr\{\gamma \in (\alpha, \beta)\}$ того факта, что при очередном измерении X , что будет получено значение γ , лежащее в интервале (α, β) ? Ответ очевиден:

$$Pr\{\gamma \in (\alpha, \beta)\} = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx \quad (7)$$

Интервал (α, β) называется в статистике *доверительным интервалом*, а величина $\varepsilon = Pr\{\gamma \in (\alpha, \beta)\}$ - вероятностью или *надёжностью* доверительного интервала.

Таким образом об истинном значении параметра X в результате проведения серии измерений можно лишь сказать, что его значение находится в интервале (α, β) с надёжностью ε . С надёжностью ε результат очередного измерения попадёт именно в этот интервал. Причём при использовании только двух характеристик μ и σ^2 полученный результат нашего измерения ничего не говорит о том, например, в левой или правой части доверительного интервала больше всего следует ожидать результат очередного измерения? Это

является следствием того факта, что при определении параметров ПРВ мы использовали лишь параметры положения величины (среднее) и разброса (дисперсии). Рассмотрение же моментов более высокого порядка в разложении ПРВ и оценка их по данным выборочной совокупности даст возможность учитывать и несимметрию расположения результатов измерения в доверительном интервале, а также более тонкие эффекты измерения.

Обобщая, можно сказать, что результат измерения СВ X необходимо оформлять следующим образом:

$$\hat{\mu} - \xi \cdot \hat{\sigma} \leq x \leq \hat{\mu} + \xi \cdot \hat{\sigma}; \quad \varepsilon = Pr\{x \in (\hat{\mu} - \xi \cdot \hat{\sigma}, \hat{\mu} + \xi \cdot \hat{\sigma})\} \quad (8)$$

Здесь ξ ("кси")- произвольное число, задающее отклонение от среднего $\hat{\mu}$ в единицах среднеквадратичного отклонения $\hat{\sigma}$; первое двойное неравенство показывает симметричный интервал шириной $2 \cdot (\xi \cdot \hat{\sigma})$ относительно среднего $\hat{\mu}$, в котором зафиксировано измеряемое значение, а второе выражение определяет надёжность ε или степень достоверности полученного результата, которое можно выразить более компактно:

$$\varepsilon = Pr\{|x - \hat{\mu}| < \xi \cdot \hat{\sigma}\} = 2\Phi(\xi). \quad (9)$$

Здесь

$$\Phi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\xi} e^{-\frac{t^2}{2}} dt$$

известная функция Лапласа, протабулированная, например, в [8]. В табл. 1 приведены значения ε при разных полуширинах доверительного интервала ξ в единицах σ . Так, например, при $\xi = 3$ (третья строка в табл. 1) получаем: $\varepsilon = Pr\{|x - \mu| < 3 \cdot \sigma\} = 2\Phi(3) = 0.9973$, то есть вероятность того, что отклонение по абсолютной величине будет меньше утроенного среднеквадратичного отклонения равна 0.9973.

С помощью параметра ξ можно задавать требуемую надёжность вывода по результатам измерения и определить его значение заранее. Параметр σ задаёт точность прибора или метода измерения. Если первый параметр можно задать исходя из целесообразности применения результата измерения, то значение

Таблица 1

| № n/n | ξ | ε |
|------------|-------|---------------|
| 1. | 1 | 0.6826 |
| 2. | 2 | 0.9544 |
| 3. | 3 | 0.9973 |
| 4. | 4 | 0.999936 |
| 5. | 5 | 0.999994 |

второго параметра задаётся жёстко и определяется конструктивными свойствами прибора и методами оценивания.

Правило трёх сигм [8]. Вероятность того, что абсолютная величина отклонения превысит утроенное среднеквадратичное отклонение, очень мала, а именно равна $1 - 0.9973 = 0.0027$. Это означает, что лишь в 0.27% случаев так может произойти. Таким образом, исходя из принципа невозможности маловероятных событий, можно считать практически невозможными. В этом и состоит сущность правила трёх сигм: *если случайная величина распределена нормально, то абсолютная величина её отклонения от среднего не превосходит утроенного среднеквадратичного отклонения.*

Использование отклонения ξ от среднего $\hat{\mu}$ в единицах $\hat{\sigma}$ - есть работа со СВ E ("кси"), определяемой соотношением:

$$X = \mu + E \cdot \sigma, \quad (11)$$

процедура же перехода $X \rightarrow E$ называется процедурой нормализации СВ X . В данном случае эта процедура оказывается предельно простой, выражаемой равенством (11).

Рассмотрим ещё один аспект применения правила трёх сигм, что может привести к ряду "правил n сигм". Поскольку вместо истинных значений μ и σ мы использовали их оценочные значения, погрешности самих значений $\hat{\mu}$ и $\hat{\sigma}$ требуют какой-то своей содержательной проверки. Самым простым способом здесь является проверка на самосогласованность результатов измерений и вывода в виде интервала (8).

После завершения серии измерений и вычисления параметров интервала (8) необходимо вычислить относительную частоту попадания в этот интервал выборочных значений. Если относительная частота попадания значений выборки согласуется с в заданной надёжностью ε , то результат оценки параметра X можно считать положительным. В противном случае мы вынуждены будем расширить доверительный интервал ещё на одну $\hat{\sigma}$ и снова повторить тест по относительным частотам. При этом доверительный интервал становится шире, но надёжность вывода увеличивается в соответствии с данными табл. 1. Процедура расширения

доверительного интервала повторяется до тех пор, пока не будет установлена самосогласованность результатов.

Таким образом, если на каком-то шаге нам удаётся достигнуть самосогласованности результатов измерения и вычисления, то имеются основания предполагать, что изучаемая нормализованная величина в заявленном приближении распределена нормально, а в процедуре нормализации учтены все функциональные зависимости влияющие на поведение исходного параметра. В противном случае мы должны будем констатировать, что в данном приближении измеряемый параметр не подчиняется нормальному закону распределения, а в процедуре нормализации не учтены некоторые существенные факторы влияния.

Библиография

- [1] Donsker M. *An invariance principle for certain probability limit theorem. Met.Amer. Math. Soc.* 6, 1951
- [2] Биллингсли П. *Сходимость вероятностных мер.* М., 1977
- [3] Вильсон Дж. *Энтропийные методы моделирования сложных систем.* М., Наука, 1978
- [4] Tasacs L. *A moment problem, J. Austr. Math. Soc., 1965, 5, #4, pp. 487-490*
- [5] Феллер В. *Введение в теорию вероятностей и ее приложения (в 2-х томах).* М., Мир, 1984
- [6] Касимов В.А. *Некоторые методологические аспекты описания экономических систем.* Новосибирск ПТБ ВНИИПЭМ, 1983
- [7] Касимов В.А. *А так ли необходима многомировая интерпретация квантовой механики?* Everett.pdf
- [8] Гмурман В.Е. *Теория вероятностей и математическая статистика.* М., Высшая школа, 1972

Литература

- [1]. И. фон Нейман. *Математические основы квантовой механики*. Наука, М., 1964.
- [2]. П. Дирак. *Принципы квантовой динамики*. Наука, М., 1979.
- [3]. С. Шввебер. *Введение в релятивистскую квантовую теорию поля*. ИИЛ, М., 1963.
- [4]. Ф. Кемпфер. *Основные положения квантовой механики*. Мир, М., 1967.
- [5]. ЛД Ландау, ЕМ Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*. Наука, М., 1974.
- [6]. ВА Касимов. *Специальная теория относительности (без второго постулата)*. Новосибирск, 2010, в кн. ТО-01-02-14.pdf .
- [7]. ВА Касимов. *Общая теория относительности (принципы)*. Новосибирск, 2010, в кн. ТО-01-02-14.pdf .
- [8]. ВА Касимов. *Квантовая механика (принципы)*. Новосибирск, 2011. КМ-08-11-11.pdf.
- [9]. ВА Касимов. *Пространство, время, движение*. Новосибирск, 2011. Space-Time-20-03-12-21.pdf.
- [10]. ВА Касимов. *Некоторые топологические парадоксы СТО*. Новосибирск, 2014. Polarization.pdf.
- [11]. А. Аспект. *Bell's theorem: The naive view of an experimentalist*†. Institut d'Optique Theorique et Appliquee Batiment 503-Centre universitaire d'Orsay, 91403 ORSAY Cedex – France alain.aspect@iota.u-psud.fr.
- [12]. С. Коhen-Танноуджи, В. Диу and F. Лалоë. *Quantum Mechanics Volume I (Wiley, NY, 1977)* p. 213ff.
- [13]. Д. Бауместер, А. Эжерт, А. Цайлингер. *Физика квантовой информации*. М., Постмаркет, 2002.
- [14]. R. Jensen, *Is faster-than-light communication possible using entangled photons and a double slit?* (2006, casimirinstitute.net/coherence/Jensen.pdf).
- Raymond W. Jensen. *On using Greenberger-Horne-Zeilinger three-particle states for superluminal communication*. <http://vixra.org/pdf/1007.0044v1.pdf>.
- [15]. GianCarlo Ghirardi, Raffaele Romano. *On a proposal of superluminal communication*. [arXiv:1205.1416v1 \[quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/1205.1416v1) 7 May 2012.
- [16]. Е. С. Андрианов А. П. Виноградов А. А. Пухов. *Лекции по квантовой оптике*. Москва. МФТИ. 2018 (лекция 2)

Для связи:

quadrica-m@mail.ru

<http://orcid.org/0000-0002-1435-9220>

Авторский семинар

<http://my.mail.ru/community/physiks.principis/?ref=cat>

<http://quadrica.ucoz.net/>

<https://independent.academia.edu/KasimovVladimir>

<https://vk.com/public128913510>

<https://www.facebook.com/quadrica.m>

<https://www.facebook.com/KasimovW/>

142.

V.A.Kasimov. Quantum mechanics (Principles)

ISBN 978-5-94301-495-6

© Касимов В.А., 2011

The aim of this work is to present the basic principles of non-relativistic quantum mechanics, the principles that make up its indestructible structure, to place emphasis, of course, of the author, and with intonations relating to the space-time relations in physics.

144

