

Квантова механіка

Леонард Саскінд і Арт Фрідман

Тут представлений (дещо вільний) переклад українською популярної книги

Quantum mechanics
із серії
The theoretical minimum
з підзаголовком
What you need to know to start doing physics
by
Leonard Susskind & Art Friedman

Все, що тут цікавого належить оригінальній книзі, недоліки та промахи є результатом "вільності" перекладу.

Особливо зазначу, що всі ілюстрації скопійовані з електронного варіанту оригінальної книжки.

Переклад з англійської М. В. Москальця

Зміст

Передмова авторів	8
Від перекладача	12
Пролог	14
Вступ	16
1. Система та експеримент	18
1.1. Квантова та класична механіка	18
1.2. Спин та кубит	19
1.3. Експеримент	19
1.4. Експеримент завжди обурює систему	25
1.5. Затвердження	26
1.6. Перевірка класичних тверджень	28
1.7. Перевірка квантових тверджень	30
1.8. Математичний відступ: комплексні числа	32
1.9. Математичний відступ: векторний простір	35
1.9.1. Аксиоми	35
1.9.2. Функції та вектори-стовпці	37
1.9.3. Бра- та кет- вектора	38
1.9.4. Скалярний твір	39
1.9.5. Ортонормований базис	41
2. Квантовий стан	43
2.1. Стани та вектори	43
2.2. Подання спинових станів	44
2.3. Вздовж осі x	47
2.4. Вздовж осі y	49
2.5. Підрахунок параметрів	52
2.6. Подання спинових станів вектор-стовпцями	53

2.7. Збираючи все разом	54
3. Принципи квантової механіки	56
3.1. Математичний відступ: лінійні оператори	56
3.1.1. Машини та матриці	56
3.1.2. Власні значення та власні вектори	60
3.1.3. Ермітове сполучення	63
3.1.4. Ермітові оператори	65
3.1.5. Ермітові оператори та ортонормовані базиси	67
3.1.6. Процедура ортогоналізації Граму - Шмідта	70
3.2. Принципи	71
3.3. Приклад: спінові оператори	75
3.4. Побудова спинових операторів	76
3.5. Поширена помилка	81
3.6. Перегляд операторів для 3-векторів	83
3.7. Підбиваємо підсумки	84
3.8. Принцип спінової поляризації	90
4. Еволюція системи в часі	92
4.1. Класична фізика	92
4.2. Унітарність	93
4.3. Детермінізм у квантовій механіці	94
4.4. Оператор еволюції $U(t)$	95
4.5. Гамільтоніан	97
4.6. Що сталося з постійною Планка?	100
4.7. Очікувані значення	102
4.8. Ігнорування фазового множника	104
4.9. Зв'язок із класичною механікою	106
4.10. Збереження енергії	110
4.11. Спін у магнітному полі	111
4.12. Рішення рівняння Шредінгера	114
4.13. Рецепт приготування шредінгерового кету	118
4.14. Колапс	121

5. Принцип невизначеності Гайзенберга	123
5.1. Математичний відступ: Повний набір змінних, що комутують	123
5.1.1. Стани, які залежать від більш ніж однієї фізичної величини	123
5.1.2. Хвильові функції	126
5.1.3. Щодо термінології	128
5.2. Вимірювання	129
5.3. Принцип невизначеності	131
5.4. Сенс невизначеності	132
5.5. Нерівність Коші - Шварца	133
5.6. Нерівність трикутника та нерівність Коші - Шварца	134
5.7. Загальний принцип невизначеності	138
6. Об'єднані системи: Заплутаність	140
6.1. Математичний відступ: Тензорні твори	140
6.1.1. Знайомтеся: сестра Оленка та братик Іванко	140
6.1.2. Подання комбінованої системи	141
6.2. Класичні кореляції	145
6.3. Об'єднуючи квантові системи	149
6.4. Два спіна	150
6.5. Перомножені стани	151
6.6. Підрахунок параметрів для прямого добутку станів	153
6.7. Заплутані стани	154
6.8. Спостережені для Оленочки та для Іванушки	155
6.9. Складові спостережувані	162
7. Ще про заплутаність	168
7.1. Математичний відступ: Компоненти тензорного твору	168
7.1.1. Побудова матриці тензорного твору з перших принципів	169
7.1.2. Побудова матриці тензорного твору з компонентів матриць співмножників	171
7.2. Математичний відступ: Зовнішній твір	176
7.3. Матриця щільності: Новий інструмент	179
7.4. Заплутаність та матриця щільності	181
7.5. Заплутаність двох спинів	184

7.6.	Окремий приклад: Обчислення матриці щільності Оленки	191
7.7.	Критерії заплутаності	193
7.7.1.	Демонстрація заплутаності за допомогою кореляцій	194
7.7.2.	Демонстрація заплутаності за допомогою матриці щільності	195
7.8.	Процес вимірювання	198
7.9.	Заплутаність та локальність	203
7.10.	Заплутаність: Підбиття підсумків	209
8.	Частинки та хвилі	215
8.1.	Математичний відступ: Робота з функціями безперервних (не дискретних) змінних	215
8.1.1.	Хвильова функція: Короткий огляд	215
8.1.2.	Функції як вектори	218
8.1.3.	Інтегрування частинами	222
8.1.4.	Лінійні оператори	225
8.2.	Стан частинки	228
8.2.1.	Власні значення та власні вектори координати	230
8.2.2.	Імпульс та його власні вектори	232
8.3.	Перетворення Фур'є та імпульсне уявлення	237
8.3.1.	Розкладання одиниці	238
8.4.	Комутатори та дужки Пуассона	241
8.5.	Принцип невизначеності Гайзенберга	244
9.	Динаміка частинки	248
9.1.	Простий приклад	248
9.2.	Нерелятивістські вільні частки	253
9.3.	Рівняння Шредінгера, що не залежить від часу	257
9.4.	Швидкість та імпульс	259
9.5.	Квантування	261
9.6.	Сили	263
9.7.	Прямолінійний рух та класична межа	266
9.8.	Інтеграл з траєкторій	272

10.Гармонійний осцилятор	280
10.1. Класичний опис	282
10.2. Квантово-механічний опис	284
10.3. Рівняння Шредінгера	288
10.4. Рівні енергії	289
10.5. Основний стан	290
10.6. Оператори народження та знищення	293
10.7. Назад до хвильових функцій	302
10.8. Важливість квантування	306
Додаток	311

Передмова авторів

Альберт Ейнштейн, який був у багатьох відношеннях батьком квантової механіки, мав із нею горезвісні стосунки кохання-ненависті. Його дебати з Нільсом Бором - Бор повністю приймав квантову механіку, а Ейнштейн ставився до неї глибоко скептично - широко відомі в історії науки. Більшості фізиків визнали, що Бор виграв, а Ейнштейн програв. Як мені здається, і цю думку, я думаю, поділяють все більше фізиків, такий висновок не справедливий стосовно поглядів Ейнштейна.

І Бор, і Ейнштейн були складними людьми. Ейнштейн дуже намагався показати, що квантова механіка була суперечливою; Бор, проте, завжди міг протистояти його аргументації. Але в своїй останній атаці Ейнштейн вказав на щось настільки глибоке, що так суперечить здоровому глузду, настільки тривожне і, все ж таки, так збуджуюче, що на початку двадцять першого століття воно повернулося, щоб зачарувати фізиків-теоретиків. Єдина відповідь Бора на останнє велике відкриття Ейнштейна – відкриття запутаності (entanglement) – полягало в тому, що Бор просто ігнорував запутаність.

Явище запутаності є істотним фактом квантової механіки, тим, що робить квантову механіку настільки відмінною від класичної фізики. Це ставить під сумнів все наше уявлення про те, що реально у фізичному світі. Наше звичайне інтуїтивне уявлення про фізичні системи полягає в тому, що якщо ми знаємо все про систему, тобто все, що може бути в принципі відомо, ми знаємо все і про її частини. Якщо ми маємо повне уявлення про стан автомобіля, то ми знаємо все про його колеса, двигун, його трансмісію, аж до гвинтів, які тримають оббивку. Було б безглуздо для механіка сказати: “Я знаю все про вашу машину, але, на жаль, я не можу сказати вам що-небудь про якусь із її частин.”

Але це саме те, що Ейнштейн пояснював Бору - у квантовій механіці, можна знати все про систему і нічого про її окремі частини - але Бор не оцінив цей факт. Я додав би, що покоління квантових підручників безтурботно проігнорували цей факт.

Всім відомо, що квантова механіка дивна, але я підозрюю, мало хто

може точно сказати чому саме. Ця книга є технічний курс лекцій з квантової механіки, але вона відрізняється від більшості курсів або більшості підручників. Основний акцент тут робиться на логічних принципах і мета полягає не в тому, щоб приховати повну дивність квантової логіки, а щоб прояснити її.

Я хотів би нагадати вам, що ця книга є однією із серії книг, які передають зміст моїх інтернет-курсів під назвою Теоретичний Мінімум. Мій співавтор книги Арт Фрідман був студентом на цих курсах. Книга виграла від того, що Арт був учнем і тому був дуже чутливим до питань, які можуть ввести в оману новачка. Під час написання нам було дуже весело і ми спробували передати цю атмосферу за допомогою гумористичних діалогів між професором і скрипалем. Якщо цей гумор до вас не дійде – просто ігноруйте його.

Леонард Саскінд

Коли я отримав ступінь магістра в галузі комп'ютерних наук у Стенфордському університеті, я не міг припустити, що повернуся через кілька років, щоб відвідувати лекції Леонарда з фізики. Моя коротка "кар'єра" у фізиці закінчилася багато років тому із завершенням ступеня бакалавра. Але мій інтерес до цієї теми залишається дуже живим.

Виявляється, у мене велика компанія - світ здається заповненим людьми, які по-справжньому глибоко зацікавлені у фізиці, але чий життя забрали їх у різних напрямках. Ця книга є для всіх нас.

Квантова механіка може бути оцінена, певною мірою, вже на чисто якісному рівні. Але математика - те, що дозволяє по-справжньому оцінити красу квантової механіки. Ми спробували зробити доступним цю дивовижну теорію для математично грамотних фізиків. Я думаю, ми зробили досить хорошу роботу, і я сподіваюся, що ви погодитеся з цим.

Ніхто не може завершувати проект, подібний до цього, без того, щоб їм хтось та не допомагав. Люди з Brockman, Inc. змогли зробити так, щоб справа схожа на кінець світу здалася цілком легкою, а видавнича група в Perseus Books була на найвищому рівні. Моя щира подяка Т.Дж. Kelleher, Rachel King, та Тіссе Takagi. Було просто щастя працювати з талановитим коректором John Searcy.

Я вдячний (іншим) студентам з групи безперервно-продовжуючих навчання, яким Леонард читав свій курс, за вдумливі, провокаційні питання і за велику кількість стимулюючих обговорень-після-лекції. Rob Colwell, Todd Craig, Monty Frost та John Nash висловили конструктивні зауваження щодо рукопису. Jeremy Branscome і Russ Bryan прочитали весь рукопис у деталях і вказали на цілий ряд недоліків.

Я вдячний моїй сім'ї та друзям за їх підтримку та ентузіазм. Я особливо дякую моїй дочці, Hannah, за те, що вона взяла на себе турботу про супермаркет.

Крім свого кохання, захоплення, розуміння та почуття гумору, моя дивовижна дружина, Margaret Sloan, виконала близько третини діаграм та обидві ілюстрації для квартири Гільберта. Дякую, Maggie.

На початку цього проекту Леонард, відчувши, що саме було моєю мотивацією, зауважив, що один із найкращих способів дізнатися фізику - це написати про неї. Це, мабуть, вірно, але я гадки не мав, наскільки це вірно,

і я вдячний, що у мене був шанс дізнатися про це. Дуже вдячний, Леонарде.

Арт Фрідман

Від перекладача

Квантова механіка не зводиться до вирішення диференціального рівняння другого порядку. Класична механіка, за великим рахунком, займається тим самим. Квантова механіка - це погляд на світ, відмінний від того, яким ми дивимося на навколишні предмети.

До предмета цієї книги потрібно ставитися не просто як до математичного апарату: квантова механіка не зводиться до розв'язання диференціальних рівнянь другого порядку. Класична механіка, за великим рахунком, займається тим самим. Квантова механіка та похідні від неї науки (квантова теорія поля тощо) є новий підхід до опису світу, принципово не схожий на класичний — заснований на спостереженнях неозброєним оком.

За словами відомого американського футуролога і публіциста Елвіна Тоффлера, ми живемо в епоху суперіндустріального суспільства, що зароджується - суспільства, в якому на зміну пріоритету додаткової вартості прийде пріоритет загальнолюдських цінностей. Можливість такого переходу готується розвитком технологій, коли автоматизується не саме виробництво продуктів, необхідних людині, але автоматизується весь комплекс, починаючи від виробництва засобів виробництва (розуміється в найширшому сенсі) і закінчуючи, власне, виробництвом кінцевих продуктів. Такий високий рівень технології, безсумнівно, базується на використанні досягнень науки як однієї зі складових частин загальнолюдської культури.

Наука не стільки є фундаментом розвитку технологій, але, що важливіше, змінює наш погляд на навколишній світ, допомагаючи цим зрозуміти наше місце у світі і нашу роль.

За останнє століття квантова механіка виросла з фізичної теорії, яка дозволила розібратися в невідомому поясненні величезному наборі фактів, що відносяться до оптичних спектрів атомів і молекул, в теорію, яка дозволяє відповідати на питання про походження нашого всесвіту і про те, що ми можемо і чого не можемо дізнатися про навколишній світ. Результати, одержувані на такій величезній "фабриці елементарних частинок як ЦЕРН, чудово і з вражаючою точністю описуються Стандартною Моделлю елементарних частинок, яка, як на фундамент, спирається на квантову

механіку релятивістську. Ні в кого не залишилося сумнівів у правильності квантової механіки.

Однак навіть не це найдивовижніше у квантовій механіці. На відміну від багатьох правильних, корисних та широко використовуваних фізичних теорій, квантова механіка є чимось більшим. Сьогодні квантова механіка вийшла за рамки власне фізичної теорії та проникає у всі сфери нашого життя. Знання основ цієї теорії необхідне кожній людині, як знання абетки та арифметики. Питання не стоїть так, що вивчають квантову механіку у тому, щоб розвивати її. Питання стоїть так, що вивчають квантову механіку для того, щоб бути в змозі освоїти ті предмети та пристрої, принцип дії яких ґрунтується на квантових законах, які у найближчому майбутньому увійдуть у наше життя, як увійшли телевізор, стільниковий телефон, комп'ютер, банківська картка та багато іншого. Навряд чи без знання арифметики ми були б в змозі зробити хоча б елементарну покупку в супермаркеті або без знання листа надрукувати на комп'ютері запит на пошук інформації, що цікавить нас (голосове введення-висновок навряд чи замінить письмову грамотність, як і поява друкарської машинки, а потім і клавіатури комп'ютера, що не замінили необхідності писати). Однак, при цьому ми можемо не мати жодного уявлення про те, як, власне, функціонує система, що здійснює платіж з використанням нашої банківської картки або як функціонує сам комп'ютер. Ці знання доступні фахівцям, а ми, у свою чергу, можемо бути фахівцями зовсім в іншій галузі.

Те саме справедливо і щодо квантової механіки. Детальне та докладне вивчення квантової механіки необхідно фізику, який розвиватиме цю теорію або використовуватиме її в комплексі з іншими теоріями. Однак, кожній грамотній людині необхідно буде знати основи квантової механіки, знати і розуміти, що світ влаштований не так, як ми його бачимо - і використовувати це знання для виживання в цьому світі і, можливо, для управління цим світом, що за словами того ж Елвіна Тоффлера є цілком осмисленою, хоч і далеко не тривіальною, але безсумнівно неминучою задачею, яка вже постає перед людством.

М. В. Москалець

Пролог

Don't let our lighthearted humor fool you into thinking that we're writing for airheads. We're not. Our goal is to make a difficult subject "as simple as possible, but no simpler," and we hope to have a little fun along the way. See you at Hilbert's Place.

A Professor and a Fiddler Walk into a Bar

Lenny and Art, two greenhorns from California who somehow got separated from their tour bus. Wish them luck. They will need it.

Art looks over his beer and says, "Lenny, let's play a round of the Einstein–Bohr game."

"OK, but I'm tired of losing. This time, you be Artstein and I'll be L-Bore. You start."

"Fair enough. Here's my first shot: God doesn't play dice. Ha-ha, L-Bore, that's one point for me."

"Not so fast, Artstein, not so fast. You, my friend, were the first one to point out that quantum theory is inherently probabilistic. Heh heh heh, that's a two-pointer!"

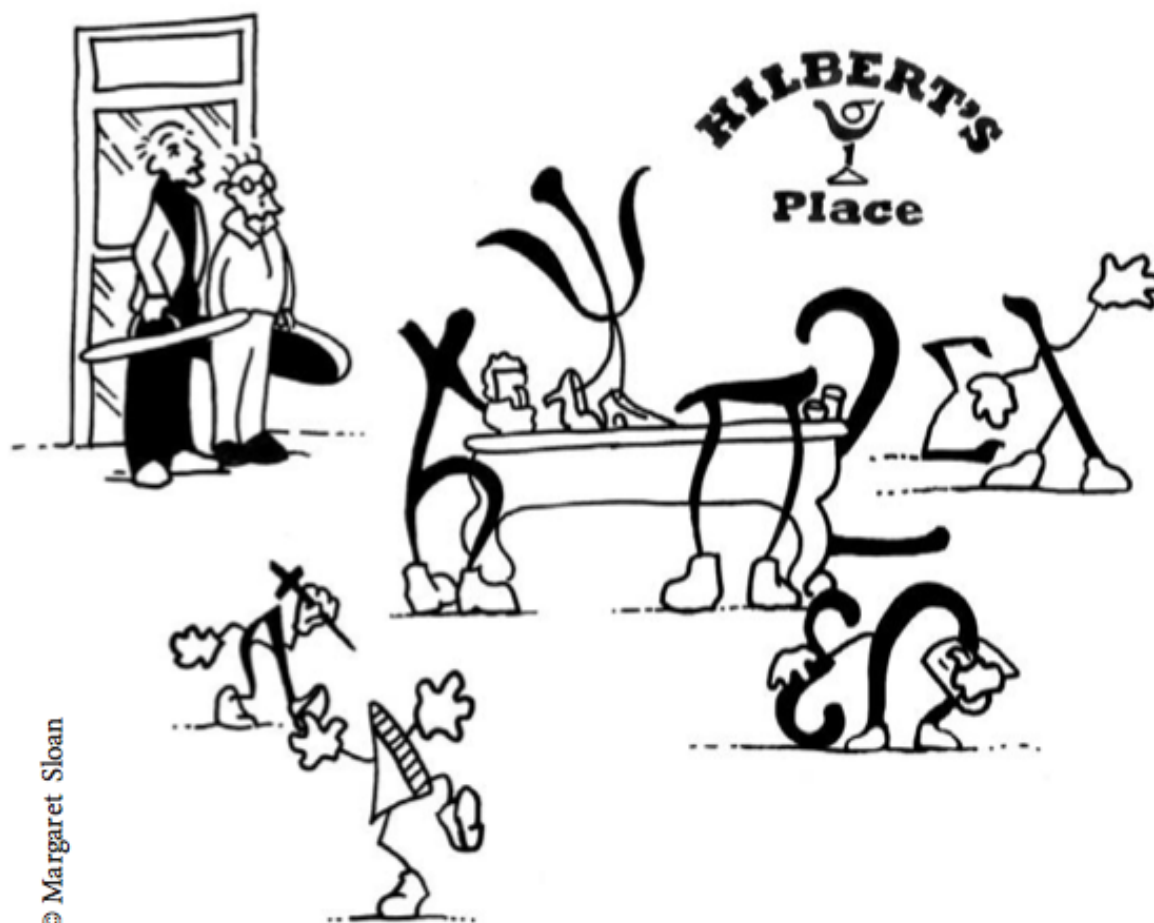
"Well, I take it back."

"You can't."

"I can."

"You can't."

Few people realize that Einstein, in his 1917 paper, "On the Quantum Theory of Radiation," argues that the emission of gamma rays is governed by a statistical law.



Мал. 0.1. Бар “Hilbert’s place”.

Вступ

Класична механіка інтуїтивно зрозуміла; речі рухаються передбачуваним чином. Досвідчений професійний гравець може кинути швидкий погляд на м'яч, що летить, і за його місцем розташування і швидкості руху, дізнатися куди бігти, щоб бути там якраз вчасно, щоб зловити м'яч. Звичайно, раптом несподіваний порив вітру може обдурити його, але це тільки тому, що він не взяв до уваги всіх змінних величин. Існує очевидна причина, чому класична механіка інтуїтивно зрозуміла: люди (і тварини до них) використовували її багато разів кожен день для виживання. Але ніхто ніколи не використовував квантову механіку до двадцятого століття. Квантова механіка описує речі настільки малі, що вони повністю за межами діапазону людських почуттів. Так що само собою зрозуміло, що ми не розвинули інтуїцію для квантового світу. Єдиний спосіб, яким ми можемо осягнути квантовий світ, полягає у заміні нашої інтуїції абстрактною математикою. На щастя, з якоїсь дивної причини, ми маємо здатність до такого роду замінів.

Як правило, ми дізнаємося класичну механіку задовго до того, як приступити до спроб вивчати квантову механіку. Але квантова фізика є набагато фундаментальнішою порівняно з класичною фізикою. Наскільки нам відомо, квантова механіка дає точний опис кожної фізичної системи, але деякі предмети досить масивні та квантова механіка може бути надійно апроксимована класичною механікою. Це все, що класична механіка є: наближення. З логічного погляду ми спочатку повинні вивчити квантову механіку, але дуже мало вчителів фізики рекомендували б це. Навіть цей курс лекцій – із серії Теоретичний Мінімум – розпочався з класичної механіки. Тим не менш, у цих квантових лекціях, класична механіка не гратиме практично ніякої ролі, крім самого кінця, тобто набагато пізніше того, як основні принципи квантової механіки будуть пояснені. Я думаю, що це справді правильний спосіб викладу і не лише логічно, а й педагогічно. Слідуючи таким шляхом, ми не потрапляємо в пастку, думаючи, що квантова механіка це в основному просто класична механіка з парою нових хитрощів на додачу. До речі, квантова механіка є технічно набагато

простішою, ніж класична механіка.

Найпростіша класична система – основна логічна одиниця для інформатики – це дворівнева система. Іноді вона називається *біт*. Вона може являти собою будь-яку систему, яка має тільки два стани: монета, яка може повернутися орлом або решкою, перемикач, який увімкнений або вимкнений, або крихітний магніт, який вказує на північ або на південь. Як і слід очікувати, особливо якщо ви вивчали першу лекцію тома I, теорія класичних дворівневих систем надзвичайно проста - нудна, насправді. У цьому томі ми збираємося почати з квантової версії дворівневої системи, яка називається *кубит* (квантовий біт), яка є набагато цікавішою. Щоб зрозуміти це, нам знадобиться абсолютно новий спосіб мислення - нові засади логіки.

1. Система та експеримент

Lenny and Art wander into Hilbert's Place.

Art: What is this, the Twilight Zone? Or some kind of fun house? I can't get my bearings.

Lenny: Take a breath. You'll get used to it.

Art: Which way is up?

1.1. Квантова та класична механіка

Квантова механіка важка для розуміння не тому, що вона використовує складну математику, але тому, що вона має справу з такими малими об'єктами, які не піддаються сприйняттю наших органів чуття. Нам нічого не залишається як тільки розглядати об'єкти мікросвіту як абстракції.

Абстракції використовуються і в класичній механіці (матеріальна точка, абсолютно тверде тіло, інерційна система відліку, положення, імпульс, поле, хвилі та багато іншого).

Але все-таки квантова механіка відрізняється від класичної механіки з двох причин:

- Абстракції є фундаментально різними. Наприклад, ідея квантового стану концептуально відмінна від аналогічного поняття класичної фізики. Стани представлені різними математичними об'єктами та мають різну логічну структуру.
- Різноманітно також взаємовідносини між станом системи та виміром. Якщо в класичній фізиці експеримент дозволяє повністю визначити стан системи, то в квантовій фізиці взаємовідношення експерименту та системи, що вивчається, є більш заплутаним і менш зрозумілим.

1.2. Спин та кубит

У квантовій механіці частинки характеризуються як їх становищем стосовно іншим частинкам, тобто координатою, а й внутрішніми характеристиками, як-от, наприклад, спин. У електрона спин має всього два напрями "вгору" і "вниз" (стосовно якоїсь обраної осі). Спин є найпростішою, але цілком повноправною, квантовою системою. Ця система має лише два стани, тому на її прикладі відносно легко проілюструвати відмінність квантової системи від класичної. Електрон, який переносить спин через простір, сам по собі теж є найпростішою, але самої квантовою системою.

Спин, будучи дворівневою системою, є прикладом кубіту (квантового біта), який у квантовому світі грає таку роль як логічний біт грає у світі класичної інформації (наприклад, в комп'ютері). Розібравшись у тому, як поводить ся спин, ми трошки підготуємо себе до того, щоб зрозуміти як поводить ся інформація в квантовому світі і чому квантовий комп'ютер є настільки багатообіцяючим.

1.3. Експеримент

У класичній фізиці прикладом дворівневої системи є, наприклад, монета, яка має дві сторони, "орел" (O) і "решка" (P). Більш формально можна ввести ступінь свободи σ і порівняти станом "решка"

$$\sigma = +1,$$

и состоянию "орел"

$$\sigma = -1. \tag{1.1}$$

Ці два стани повністю визначають простір можливих станів системи або просто "простір станів" (ПС).

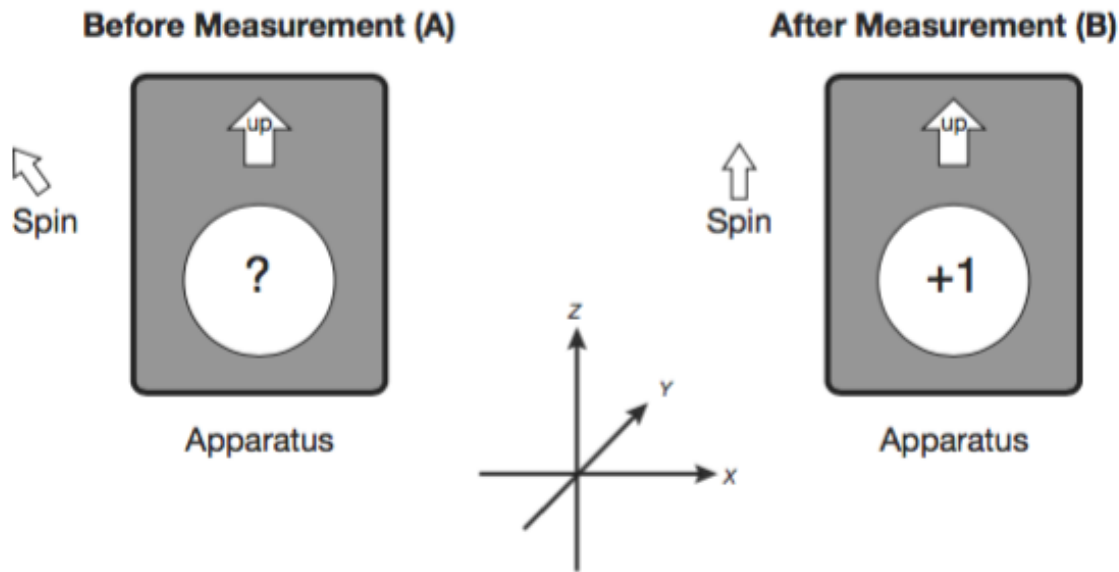
У класичній фізиці система може бути або в одному стані або в іншому - монета впаде або орлом вгору, або рішкою (випадок "впасти на ребро" ми не розглядаємо). І скільки б ми не дивилися на монету вона так і залишиться лежати, тобто система буде або в стані $\sigma = -1$ або в стані $\sigma = +1$.

Квантова система щодо цього є принципово інший. Якщо говорити коротко (хоч і не зовсім суворо): Стан системи може змінитися, коли ми подивимося на неї. Подивитися (побачити) означає, наприклад, що фотон відбився від "квантової монетки спина - і потрапив до нас у око. Але, коли фотон відбивався від спина, він міг "штовхнути" спин так, що той змінить свій напрямок, тобто перейде в інший стан. Це все тому, що енергія, необхідна для повороту спина порівнянна з енергією фотона: Якби ми перевіряли на якому боці лежить монета, ударяючи по ній дерев'яним молотком і перевіряючи який відбиток залишився на молотку, то важко гарантувати, що після такого спостереження монета залишилася лежати на тій же стороні, яка віддрукувалася на нашому "наглядному інструменті". Звичайно, у класичному світі у нас достатньо можливостей проводити спостереження і менш руйнівним способом. У квантовому світі – теж. Але, у квантовому світі набагато менше можливостей не обурювати вимірювану систему. Тому аналіз процесу виміру є важливим для квантової фізики.

Для того, щоб зрозуміти, що відбувається зі спином, введемо в розгляд також пристрій (\mathcal{A}), який вимірює напрямок спина. Нехай це буде якийсь "чорний ящик" з віконцем, в якому показується результат вимірювання. У ньому також є стрілка, що вказує в якому напрямі пристрій орієнтований. Іншими словами, ця стрілка вказує позитивний напрямок осі, вздовж якої ми будемо вимірювати напрямок спина. Якщо спин спрямований вздовж позитивного напрямку осі, то у вікні з'явиться $+1$, а якщо пристрій \mathcal{A} виявить, що спин спрямований у протилежний бік, то у вікні з'явиться -1 .

Ми не знаємо у якому стані знаходиться спин. Ми проводимо вимірювання і пристрій показує або $+1$ або 1 ". Припустимо, що після першого виміру \mathcal{A} показав $+1$. Тоді кожне наступне вимір також супроводжуватиметься появою числа $+1$ у віконці, Рис. 1.1.

Можна сказати, що вимірювальний пристрій під час першого вимірювання "приготував" систему в стані з $\sigma = +1$, а наступні вимірювання



Мал. 1.1. (А) Спін та вимірювальний пристрій перед вимірюванням. (В) Спін та вимірювальний пристрій після того, як один вимір було проведено та показало $\sigma_z = +1$. Тепер спін приготовлений у $\sigma_z = +1$ стані. Якщо спін не обурювати і зберегти орієнтації вимірювального пристрою, всі наступні вимірювання дадуть однаковий результат, а саме $\sigma_z = +1$. Показано також осі системи координат, яку ми використовуємо.

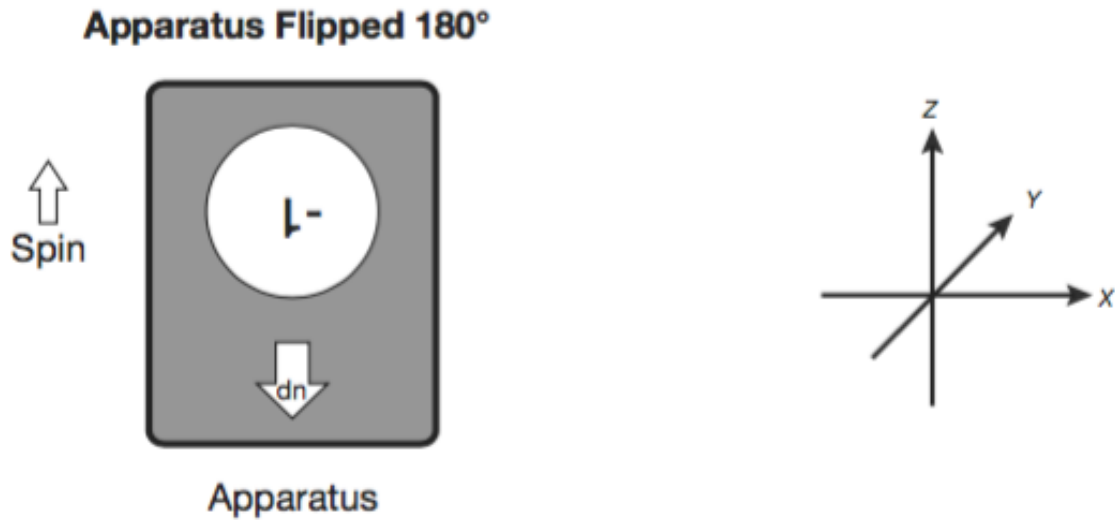
підтвердили, що, дійсно, система знаходиться в стані з $\sigma = +1$.

Теж справедливо і для $\sigma = -1$ в обох класичних і квантових випадках.

Якщо після першого виміру ми повернемо вісь пристрою на 180° , то наступний вимір покаже протилежне значення σ , Рис. 1.2.

Такий результат може бути пояснений, якщо припустити, що спін є якогось векторної величиною, яка не залежить від напрямку осі у вимірювальному пристрої. Це цілком розумне припущення, що відповідає логіці класичної фізики.

Якщо так, то природно характеризувати спін за допомогою проєкцій не на одну, а на три просторові осі, оскільки наш простір тривимірний. Позначимо компоненти спіна σ_x , σ_y та σ_z . У розглянутих випадках пристрій вимірювало проєкцію спіна вздовж однієї осі, скажімо, осі z , вздовж її позитивного або негативного напрямку, залежно від орієнтації внутрішньої осі приладу.



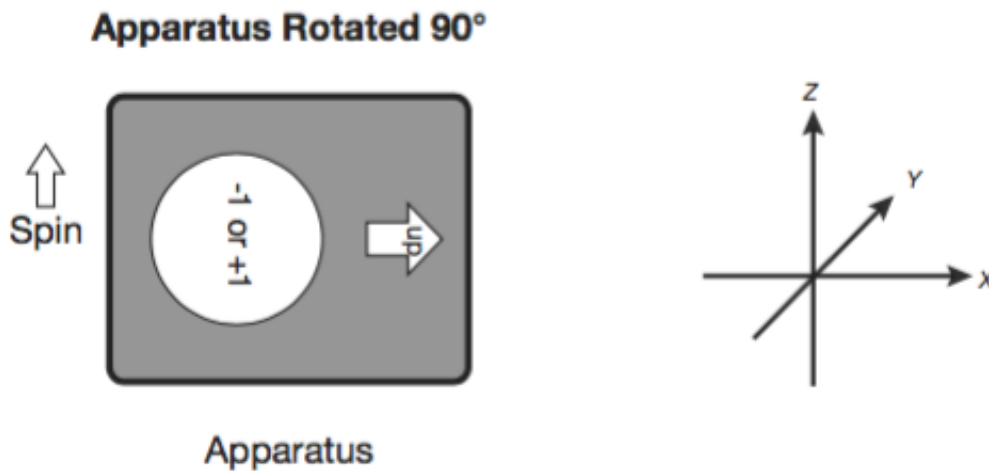
Мал. 1.2. Напрямок осі вимірювального приладу змінено протилежне. Спин залишається незадоволеним. При цьому новий вимір показує $\sigma_z = -1$.

Відмінність проявиться, якщо після першого виміру ми повернемо вісь вимірювального пристрою на 90° , так, щоб воно вимірювало проекцію спина на перпендикулярну вісь первісної осі пристрою, скажімо на вісь x . Іншими словами, першим виміром ми приготували спин у стані, скажімо, $\sigma_z = +1$, а потім вимірюватимемо його проекцію на вісь x . З погляду класичної фізики результат має дорівнювати нулю, оскільки проекція вектора на перпендикулярну вісь є нуль. Але результат виміру спина дуже повчальний:

1. Вимірювання дасть $\sigma_x = +1$ або $\sigma_x = -1$, (але не нуль!), що надзвичайно відрізняється від класичного очікування, Рис. 1.3.
2. Вимірювання на сукупності ідентично підготовлених систем дасть кожне з цих значень з рівною ймовірністю. Тому "в середньому" ми отримаємо нуль, що цілком узгоджується з класичним очікуванням.

Висновок такий: якщо спин \vec{s} є вектор, то дуже незвичайний.

Після першого виміру, який приготував спин у стані $\sigma_z = +1$, можна повернути А, так, щоб він вимірював проекцію спина на довільно спрямовану осі, скажімо, спрямовану під кутом θ до осі z , Рис. 1.4. Поодинокий

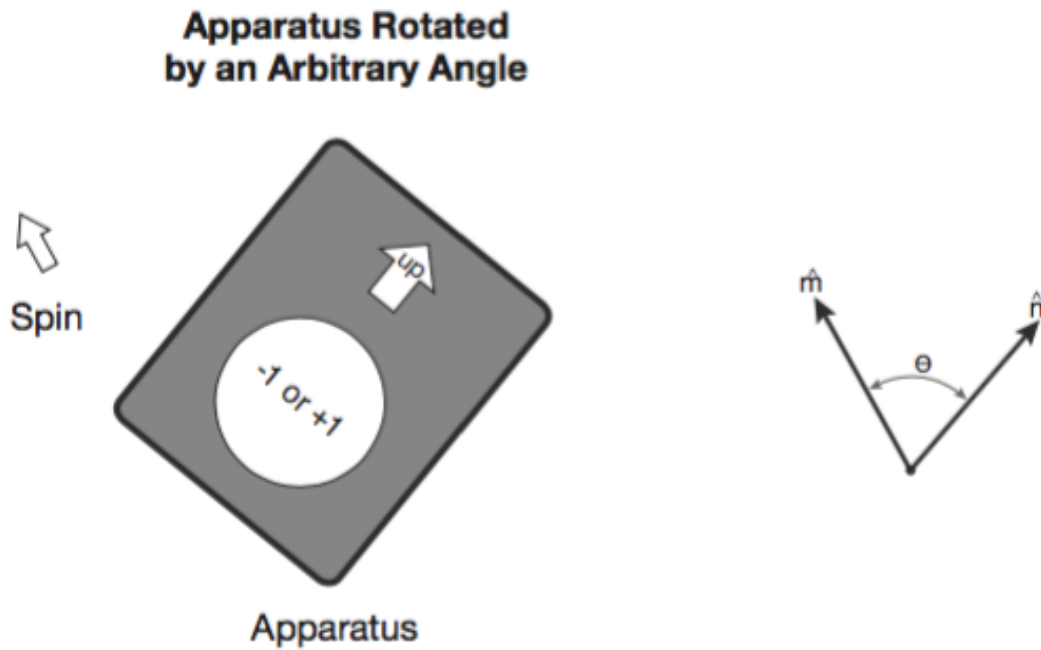


Мал. 1.3. Вісь вимірювального приладу повернута на 90° . Новий вимір дає $\sigma_z = -1$ з 50% імовірністю. Звернемо увагу, що вісь z , яку вимірюється проекція спіна електрона, за визначенням збігається з віссю вимірювального приладу. Система координат, наведена малюнку, показує найменування осей, що було при ініціалізації стану спіна (тобто доти, як вісь приладу було повернуто).

вектор уздовж такої осі позначимо як \vec{n} . З погляду класичної фізики, результатом вимірювання має стати проекція вектора на нову вісь, тобто $\sigma_n = \vec{\sigma} \cdot \vec{n} = \cos \theta$. А насправді, А покаже або $\sigma_n = +1$ або $\sigma_n = -1$ з деякими (не обов'язково рівними) ймовірностями, так що середнє значення буде $\cos(\theta)$ згідно з класичною фізикою.

У випадку, коли спочатку А орієнтований вздовж вектора \vec{m} і результат виміру дає $\sigma_m = +1$, та був А переорієнтований вздовж напрямки \vec{n} , то результат повторного виміру дасть $\sigma_n = +1$ або $\sigma_n = -1$ з такими ймовірностями, що середнє значення збігається з класичним очікуванням для проекції одиничного вектора \vec{m} на вісь \vec{n} . Таке середнє ми позначимо кутовими дужками,

$$\langle \sigma \rangle = \vec{m} \cdot \vec{n} = \cos \theta.$$



Мал. 1.4. Вісь вимірювального приладу повернена на довільний кут у площині xz . Середнє значення (отримане при вимірі ансамблю однаково підготовлених спинів) дає $\hat{n} \cdot \hat{n}$.

Выводы:

1. Квантово-механічні системи за своєю природою є імовірнісними (не детерміністськими) системами - результати вимірювання можуть стати статистично випадковими.
2. Однак усереднені результати багатьох вимірювань, вироблених на однаково підготовлених системах, узгоджуються з передбаченнями, зробленими на основі класичної фізики, або, коротко кажучи, узгоджуються з класичною фізикою.

1.4. Експеримент завжди обурює систему

Кожен експеримент включає зовнішню систему - вимірювальний пристрій -, яке має взаємодіяти з вимірюваною системою для того, щоб записати результат вимірювання. У цьому сенсі кожен експеримент є інвазивним (тобто таким, який тим чи іншим способом проникає в досліджувану систему і може повністю або частково зруйнувати її). Це правильно як і класичної і у квантової фізиці, але у квантової фізиці цей факт має важливого значення. Чому це так? З погляду класичної фізики ідеальний вимірювальний прилад має зникаюче малий вплив на систему, яку він вимірює. Тому, в класичній фізиці завжди можна звести нанівець вплив вимірювального приладу на вимірювану систему і, скільки б разів послідовно не повторювалося б вимірювання, результат буде той самий (якщо вимірювальний прилад є ідеальним). Наприклад, напрямок стрілки (компаса або амперметра або іншого приладу) може бути визначено шляхом відображення світла від стрілки і його фокусування, щоб сформувати зображення. Хоча це правда, що світло повинно мати досить малу довжину хвилі, щоб сформувати зображення, немає нічого в класичній фізиці, що запобігає тому, щоб сформувати зображення при скільки завгодно слабкому світлі і тим самим звести нанівець всякий вплив світла на стрілку. Іншими словами, світло, необхідне для вимірювання напрямку (макроскопічної) стрілки, може мати скільки завгодно малу енергію (порівняно з енергією, необхідною для додаткового відхилення стрілки).

У квантовій механіці ситуація в корені відрізняється. Будь-яка взаємодія, яка є досить сильною, щоб виміряти деякі аспекти системи обов'язково буде достатньо сильною для того, щоб змінити якийсь інший аспект тієї ж системи. Таким чином, ви не можете нічого дізнатися про квантову систему, не змінюючи щось інше в ній.

Це має бути очевидним у прикладах за участю пристрою (\mathcal{A}) та спина σ , які ми вже розглядали. Припустимо, що ми починаємо зі стану $\sigma_z = +1$ вздовж осі z . Якщо ми проводимо повторний вимір σ знову з віссю A орієнтованою вздовж z , ми підтвердимо попереднє значення. Ми можемо зробити це знову і знову без зміни результату. Але розглянемо іншу можливість: Між послідовними вимірами вздовж осі z , ми змінимо напрямок осі A на 90 градусів, зробимо проміжний вимір, і повернемо напрямок осі A в своє по-

чаткове положення. Чи підтвердить наступний вимір уздовж осі z результат початкового виміру? Відповідь – ні. Проміжний вимір проекції спина на вісь x суттєво змінить стан системи. Тому результат наступного виміру проекції спина на вісь z буде однаково давати або $\sigma_z = +1$ або $\sigma_z = -1$. Немає жодного способу зробити проміжний вимір проекції спина σ_x без того, щоб повністю зруйнувати спочатку приготовлений стан з певним значенням σ_z . Можна сказати, що вимір однієї з компонентів спина знищує інформацію про інший компонент. Насправді просто неможливо одночасно знати компоненти спина вздовж двох різних осей (так, щоб результати вимірювань у довільному порядку були б достовірно передбачуваними). Існує щось, що принципово відрізняє стан квантової системи від стану класичної системи.

1.5. Затвердження

Простір станів класичної системи є математичним набором (або просто безліч). Якщо, наприклад, системою є звичайна монета, то її простір станів є набором з двох елементів, O (орел) і P (решка). Використовуючи позначення теорії множин, ми писатимемо $\{O, P\}$. Якщо система є шестигранним кубиком, простір станів має шість елементів, що позначаються як $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Логіка теорії множин називається булевою логікою. Булева логіка є лише формалізована версія знайомої класичної логіки висловлювань.

Фундаментальна ідея булевої логіки є поняття істинності значення. Висловлювання може бути істинним або хибним. Нічого з-поміж них не допускається. Аналогом висловлювання в теорії множин є підмножина. Грубо кажучи, твердження є правильним для всіх елементів у відповідній підгрупі і хибно для всіх елементів не в цій підгрупі. Наприклад, нехай безліч є всі можливі стани кубика. Розглянемо наступне висловлювання:

А: Кубик лежить гранню з непарною кількістю точок вгору.

Відповідне підмножина містить такі елементи $\{1, 3, 5\}$.

Інше висловлювання:

П: Кубик показує число менше 4.

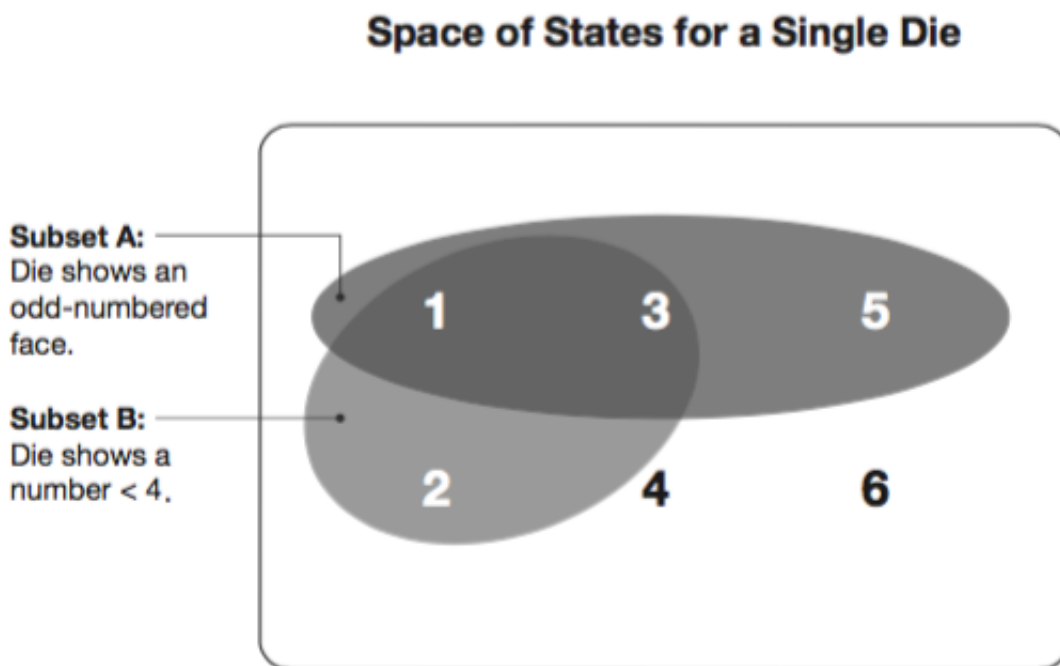
Відповідне підмножина містить такі елементи $\{1, 2, 3\}$.

Кожне із цих тверджень має відповідне негативне твердження (заперечення). Наприклад,

не А: Кубик не лежить гранню з непарним числом точок вгору.

Відповідне підмножина включає такі елементи 2, 4, 6.

Існують операції для об'єднання пропозицій у складніших пропозицій, найбільш важливими з яких є **або**, **і**, і **немає**. Ми щойно бачили приклад застосування **не**, яке застосовується до одного підмножини або пропозиції. **І** застосовується до пари висловлювань. Результатом є вислів істинний тоді, коли обидва висловлювання істинні. Що стосується двох підмножин, **і** дає елементи, загальні для обох, тобто **і** визначає перетин двох підмножин. У прикладі з висловлюваннями про кубик, перетином підмножин **A** і **B** є підмножина елементів, які є одночасно парні і менше 4, дивись малюнок 1.5, де використана діаграма Ейлера-Венна, щоб показати, як це працює.



Мал. 1.5. Приклад класичної моделі простору станів. Підмножина **A** відповідає вислову “випала грань кістки з непарним номером.” Підмножина **B**: “випала грань кістки з номером < 4.” Темне затінення показує перетин **A** і **B**, який є висловлювання (**A і B**). Білі цифри є елементами об'єднання **A** з **B**, що висловлюються (**A або B**).

Операція **або** схожа на операцію **та**, але має одну додаткову тонкість. У повсякденному мовленні, слово **чи**, зазвичай, використовується у сенсі винятку – вірно **чи** одне **чи** інше, але з обидва (що виключає **чи**). Тим не менш, Булева логіка використовує іншу версію **або**, а саме, висловлювання “**A або B**” правильне не тільки коли вірне одне з висловлювань, але і коли вірні обидва ці висловлювання (що об’єднує \vee або). Таким чином, згідно з об’єднуючим **або** наступна пропозиція

Альберт Ейнштейн відкрив відносність Ісаак Ньютон був англієць
є справжнім. Також істинним є таке висловлювання,
Альберт Ейнштейн відкрив відносність **або** Ісаак Ньютон був російський

Об’єднує **або** хибно тільки в тому випадку, коли обидва висловлювання хибні. Наприклад, наступне висловлювання - хибно:

Альберт Ейнштейн відкрив Америку Ісаак Ньютон був російський

Об’єднує **або** має теоретико-множинне тлумачення, як об’єднання двох множин: воно позначає підмножина, що містить що-небудь в одному або обох зі складових підмножин. У випадку з кубиком, (**A або B**) позначає підмножина $\{1, 2, 3, 5\}$.

1.6. Перевірка класичних тверджень

Повернемося до простої квантової системи, що складається з одного спину, а також різних висловлювань, істинності яких ми могли б перевірити за допомогою **A**. Розглянемо такі два висловлювання:

A: z компонента спина дорівнює $+1$.

B: x компонента спина дорівнює $+1$.

Кожне з цих висловлювань має сенс і може бути перевірена шляхом орієнтування осі вздовж відповідної координатної осі z або x . Заперечення кожного з цих висловлювань також є припустимим висловлюванням. Наприклад, запереченням першого висловлювання є таке висловлювання:

не A: z компонента спина дорівнює -1 .

Розглянемо тепер комбіновані висловлювання,

(А **або** В): z компонента спина дорівнює $+1$ **або** x компонента спина дорівнює $+1$.

(А **та** В): z компонента спина дорівнює $+1$ **і** x компонента спина дорівнює $+1$.

Розглянемо, як ми б перевірили висловлювання (А **або** В). Якби спини поводитися класично (а, звичайно, вони цього не роблять), послідовність наших дій була б такою:

- Обережно виміряти σ_z і записати значення. Якщо це значення $+1$, ми закінчили: висловлювання (А **або** В) істинно. Якщо σ_z дорівнює -1 , перейти до наступного кроку.
- Обережно виміряти σ_x і записати значення. Якщо це значення $+1$, то висловлювання (А **або** В) істинно. Якщо σ_x дорівнює -1 , то оскільки жодне з значень не дорівнює $+1$, то комбіноване висловлювання є хибним.

Існує альтернативна процедура, яка полягає у перестановці порядку проходження двох вимірювань. Щоб підкреслити це, ми називатимемо нову процедуру (В **або** А):

- Обережно виміряти σ_x і записати значення. Якщо це значення $+1$, ми закінчили: висловлювання (В **або** А) істинне. Якщо σ_x дорівнює -1 , перейти до наступного кроку.
- Обережно виміряти σ_z і записати значення. Якщо це значення $+1$, то висловлювання (В **або** А) істинно. Якщо σ_x дорівнює -1 , то оскільки жодне з значень не дорівнює $+1$, то комбіноване висловлювання є хибним.

У класичній фізиці перестановка порядку вимірів впливає остаточну відповідь. Причина цього полягає в тому, що вимірювання можуть бути як завгодно слабкими, так що вони не впливають на результати наступних вимірювань. Тому висловлювання (А **або** В), має те ж значення, що і вислів (В **або** А).

1.7. Перевірка квантових тверджень

Тепер ми переходимо до квантового світу, тому що ми описували раніше. Уявімо ситуацію, в якій хтось (або щось) невідомий нам таємно підготував спин у стані з $\sigma_z = +1$. Наше завдання полягає в тому, щоб використовувати пристрій \mathcal{A} для визначення, чи є справжнім або хибним судження (А **або** В). Ми будемо використовувати процедури, описані вище. Почнемо з виміру σ_z . Оскільки стан з певною проекцією на вісь z було підготовлено, ми при вимірі виявимо $\sigma_z = +1$. Необхідність у наступних вимірах відпадає, оскільки ми встановлюємо, що (А **або** В) істинно. Тим не менш, ми могли б перевірити σ_x , щоб побачити, що саме вийде. Відповідь на це питання є непередбачуваною. Ми з рівною ймовірністю виявимо, що $\sigma_x = +1$ або, що $\sigma_x = -1$. Але жоден із цих результатів впливає на істинність судження (А **або** В).

Але тепер давайте здійснимо вимірювання у зворотному порядку, тобто спочатку виміряємо σ_x , а потім виміряємо σ_z . Як і раніше, ми називатимемо зворотну процедуру (В **або** А). Оскільки спин був зорієнтований вздовж позитивного напрямку осі z , то вимір σ_x з рівною ймовірністю дасть або $\sigma_x = +1$ або $\sigma_x = -1$, тобто результат такого виміру є випадковим. Якщо з'ясується, що $\sigma_x = +1$, ми закінчили: (В **або** А) вірно. Але припустимо, що ми знаходимо протилежний результат $\sigma_x = -1$, тобто ми виявимо, що спин орієнтований вздовж напрямку $-x$. Зупинимось тут на короткий час, щоб переконатися, що ми розуміємо, що сталося. В результаті нашого виміру, спин більше не знаходиться в його первісному стані з $\sigma_z = +1$. Він у новому стані, яке або $\sigma_x = +1$ або $\sigma_x = -1$ (залежно від результату виміру). Необхідно добре усвідомити цей момент, оскільки він є дуже важливим для розуміння того, як поведуться квантові об'єкти.

Тепер ми готові протестувати другу половину речення (В **або** А). Повернемо вісь пристрою \mathcal{A} вздовж осі z і виміряємо σ_z . Згідно з квантовою механікою, результат буде випадковим, тобто ми отримуємо або $\sigma_z = +1$ або $\sigma_z = -1$ з рівною ймовірністю. Це означає, що є 25 відсотків ймовірності, що експеримент покаже $\sigma_z = -1$ та $\sigma_x = -1$. Інакше кажучи, з ймовірністю $1/4$, ми бачимо, що (В **або** А) хибно. І це відбувається, незважаючи на те, що спочатку невідомий нам хтось (або щось) достовірно встановив (і переконався), що $\sigma_z = +1$.

Очевидно, что в этом примере объединяющее **или** не симметрично относительно перестановки высказываний. Истинность высказывания (А **или** В) может зависеть от порядка, в котором мы проверяем эти высказывания. Это важно; это означает не только, что законы квантовой физики отличаются от их классических аналогов, но что сами основы логики являются другими в квантовой физике.

А як щодо (А **та** В)? Припустимо, що наш перший вимір показав $\sigma_z = +1$, а другий вимір показав $\sigma_x = +1$. У такому разі ми були б схильні говорити, що (А **та** В) істинно. Але в науці, особливо у фізиці, істинність судження передбачає, що така думка може бути перевірена шляхом подальшого спостереження. У класичній фізиці, який не обурює характер виміру веде в тому, що результат подальших експериментів не змінюється і підтверджує результат раннього експерименту. Наприклад, монета, що лежить "орлом" вгору, не перевернеться просто від того факту, що ми на неї подивилися. На противагу цьому, в квантовій механіці наступний вимір, наприклад, вимір σ_x , повністю руйнує стан, в якому знаходилася система, наприклад, після виміру σ_z , і тим самим унеможливує підтвердження результату попереднього вимірювання. Саме тому в квантовій механіці висловлювання (А **та** В) в принципі не може бути підтверджено: друга частина експерименту перешкоджає можливості підтвердження результату першої частини.

Якщо ви вже знаєте трохи про квантову механіку, то ви, напевно, здогадалися, що ми тут обговорюємо принцип невизначеності. Принцип невизначеності поширюється як на координату і імпульс (чи швидкість); він має відношення до багатьох пар вимірюваних величин, а саме величин, які не можуть бути виміряні одночасно з достовірністю. У разі спина, це стосується двох різних проєкцій, на вісь z та на вісь x . Аналогічно, у разі координати та імпульсу, ми могли б розглянути два наступні висловлювання:

Деяка частка знаходиться в точці з координатою (або коротко, частка має координату x).

Те саме частка має імпульс p .

З цих висловлювань можна утворити два складові висловлювання:

Частина має координату x **та** частка має імпульс p .

Частина має координату x **або** частка має імпульс p .

Незважаючи на свою незграбність, обидві ці конструкції формально є висловлюваннями. Тим не менш, у квантовій фізиці, перше з цих положень абсолютно безглуздо (а не просто хибно), а друге означає щось зовсім відмінне від того, що ми могли б подумати. Це все зводиться до глибокої логічної різниці між класичним та квантовим уявленням про стан системи. Пояснення квантової концепції стану вимагатиме деяких абстрактних математичних відомостей, так що давайте зупинимося на короткій інтерлюдії, а саме, на комплексних числах та векторних просторах. Потреба комплексних величин виникне пізніше, коли ми перейдемо до розгляду математичного уявлення спинових станів.

1.8. Математичний відступ: комплексні числа

Ви, мабуть, вже так чи інакше стикалися із комплексними числами. Тим не менш, я наведу кілька рядків, які нагадають вам про головне, див. малюнок 1.6.

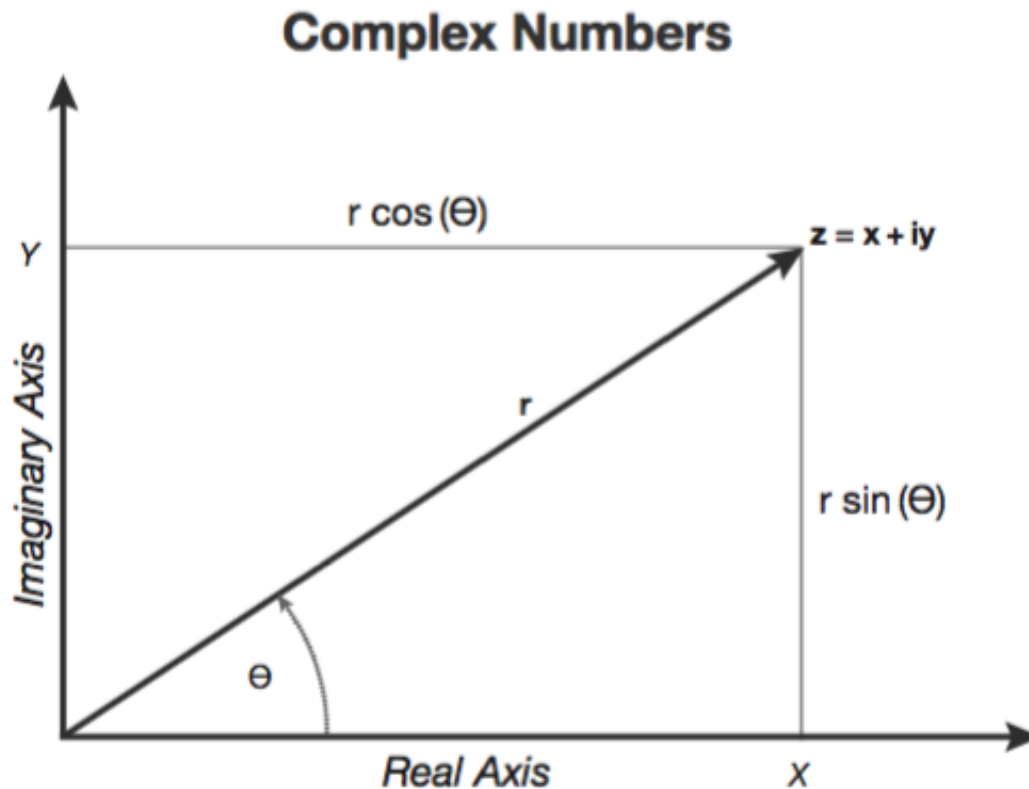
Комплексне число z є сумою дійсного числа та уявного числа. Ми можемо записати його як

$$z = x + iy.$$

де x і y є дійсними числами та $i^2 = -1$. Комплексні числа можна складати, віднімати, множити та ділити один на одного за стандартними правилами арифметики. Їх можна подати у вигляді точок на комплексній площині з координатами x , y . Вони також можуть бути представлені у полярних координатах:

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

Додавання комплексних чисел зручно здійснювати, коли числа задані свої-



Мал. 1.6. Два стандартні способи представлення комплексних чисел. У декартовому поданні x і y є горизонтальною (дійсна) і вертикальною (уявна) компонентами. У полярному поданні r є радіусом, а θ є кутом, утвореним з віссю x . У будь-якому разі необхідно два дійсні числа для представлення одного комплексного числа.

ми компонентами: просто складіть компоненти. Так само числа легко множити, коли вони задані в полярній формі: Просто помножте радіуси і додайте кути:

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

Кожне комплексне число z має комплексно пов'язане число z^* , яке виходить шляхом простої зміни знаку уявної частини. Якщо

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

то

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

Множення комплексного числа на сполучене завжди дає дійсне позитивне число,

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

Звичайно, вірно те, що комплексно пов'язана кількість сама по собі є комплексним числом. Однак зручно розглядати z і z^* , що належать окремим "дуальним" системам числення. Дуальний тут означає, що для кожного z існує єдиний z^* і навпаки.

Існує особливий клас комплексних чисел, які я називатиму "фазовим-фактором". Це просто комплексне число із $r = 1$. Якщо z є "фазовим-фактором" то справедливі наступні співвідношення:

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

1.9. Математичний відступ: векторний простір

1.9.1. Аксиоми

Для класичної системи, простір станів є безліч (тобто набір можливих станів), і логіка класичної фізики булева. Це здається очевидним, і важко уявити будь-яку іншу можливість. Тим не менш, реальний світ поводить ся зовсім інакше, принаймні щоразу, коли виявляються квантові ефекти. Простір станів квантової системи не є математичним безліччю, воно є векторним простором. Відносини між елементами векторного простору відрізняються від відносин між елементами множини та логіка суджень теж відрізняється.

Перед тим, як ми перейдемо до векторних просторів, необхідно уточнити, що таке вектор. Як ви знаєте, цей термін використовується для позначення об'єкта у звичайному просторі, який має як величину, так і напрямок. Такі вектори мають три складові, що відповідають трьом вимірам простору. Далі ми називатимемо такий об'єкт 3-вектор.

Математичне векторне простір є абстрактною конструкцією, яка має щось спільне або не має нічого спільного із звичайним простором. Математичне векторне простір може мати будь-яке число вимірювань від 1 до ∞ і може мати компоненти, які є цілими числами, дійсними числами, або навіть більш спільними речами.

Векторні простори, які ми використовуємо для визначення квантово-механічних станів, називаються *Гільбертові простори*. Ми не будемо давати суворого математичного визначення тут. Однак, ви можете додати цей термін до свого словника. Коли ви зіткнетесь з терміном Гільбертово простір у квантовій механіці, то можете бути впевнені, що це безумовно відноситься до простору станів. Гільбертовий простір може мати або кінцеве чи нескінченне число вимірювань.

У квантовій механіці векторний простір складається з елементів $|A\rangle$, які називаються *кет-векторами* або просто *кети*. Нижче наведені аксіоми, які ми використовуватимемо, щоб визначити векторний простір станів квантової системи (z і w є комплексними числами):

1. Сума будь-яких двох кет-векторів також буде кет-вектор:

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

2. Додавання векторів є комутативним:

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

3. Додавання векторів асоціативно:

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

4. Існує єдиний вектор 0 , такий, що результатом складання його з будь-яким кет-вектор є той самий вектор:

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

5. Для кожного вектора існує зворотний вектор, такий що

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

6. Будь-який кет-вектор $|A\rangle$ можна помножити на будь-яке комплексне число z . В результаті вийде новий кет. Крім того, множення на скаляр є лінійним:

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

7. Справедлива властивість дистрибутивності:

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

Аксіоми 6 та 7, взяті разом, часто називають *аксіомами лінійності*.

Звичайні 3-вектори задовольняли б цим аксіомам за винятком однієї речі: Аксіома 6 дозволяє вектору бути помножені на будь-яке комплексне

число. Звичайні 3-вектори можуть бути помножені на дійсне число (позитивне, негативне або нульове). Але множення на комплексне число не визначено для трьох векторів. Можна розглядати 3 вектори як утворюють *речовий векторний простір*, а кети як утворюють *комплексний векторний простір*. Наше визначення кет-векторів є досить абстрактним. Але, як побачимо далі, існують також різні конкретні способи уявлення кет-векторів.

1.9.2. Функції та вектори-стовпці

Розгляньмо конкретні приклади комплексних векторних просторів. Перш за все, розглянемо безліч безперервних комплексних функцій змінної x . Назвемо функцію $A(x)$. Можна складати будь-які такі функції і помножити їх на комплексні числа. Можна перевірити, що вони задовольняють усім семи аксіом. Цей приклад робить очевидним, що йдеться про щось набагато спільніше, ніж просто тривимірна стрілка.

Двовимірні вектори-стовпці є ще одним прикладом комплексного векторного простору. Такі вектори є парою комплексних чисел, α_1 і α_2 розташованих “у стовпчик”:

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

Ми скажемо, що такий стовпчик визначає кет-вектор $|A\rangle$. Комплексні числа α є компонентами $|A\rangle$. Два такі стовпці можна скласти шляхом складання їх компонентів:

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

Крім того, можна помножити вектор-стовпець на комплексне число z просто шляхом множення компонентів на це число,

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

Вектор-стовпець може бути побудований для простору будь-якого числа вимірів. Наприклад, можна побудувати *тривимірний вектор-стовпець*:

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

Як правило, ми не розглядаємо одночасно вектор різної розмірності.

1.9.3. Бра- та кет- вектора

Як ми бачили, комплексні числа мають дуальну версію: як комплексно сполучених чисел. Таким же чином, комплексний векторний простір має дуальну версію, яка є, по суті, комплексно пов'язаним векторним простором. Для кожного кет-вектора $|A\rangle$, є "бра"вектор у сполученому просторі, що позначається як $\langle A|$. Чому дивні терміни *бра* та *кет*? Незабаром ми визначимо внутрішній твір бра та кетів, використовуючи вирази типу $\langle A|B\rangle$, яке є свого роду дужки, бра-кет (brackets in English). Внутрішні твір має надзвичайно важливе значення у математичному апараті квантової механіки, а також для характеристики векторних просторів загалом.

Бравектори задовольняють тим самим аксіомам, що й кет-векторів. Однак є дві речі, які необхідно мати на увазі, розглядаю дуальні версії векторів:

1. Нехай $\langle A|$ є бра, який відповідає кету $|A\rangle$ і $\langle B|$ це бра, що відповідає кету $|B\rangle$. Тоді бра, що відповідає їх сумі

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

є

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

2. Нехай z є комплексним числом. Тоді не буде вірно сказати, що бра, відповідний $z|A\rangle$ буде $\langle A|z$. Необхідно перейти не тільки до дуального вектора, але і до дуального числа. Тому, бра, відповідний

$$z|A\rangle$$

є

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

У конкретному прикладі, де кети представлені у вигляді векторів-стовпців, дуальні бра представлені вектор-рядками, що складаються з комплексно-сполучених чисел. Таким чином, якщо кет $|A\rangle$ представлений таким вектором-стовпцем,

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

то відповідний бра буде представлений наступним рядком,

$$(\alpha_1^* \alpha_2^* \alpha_3^*) .$$

1.9.4. Скалярний твір

Ви, мабуть, вивчали скалярне твір, визначений для звичайних 3-векторів. Аналогічна операція визначена і для бра-і кет-векторів. Скалярний твір завжди є твором шлюбу. Воно записується так:

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

Результатом операції є комплексне число. Аксиоми для скалярного твору не є надто несподіваними:

1. Скалярний твір - лінійно:

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

2. Перестановка місцями бра- та кет-вектора відповідає комплексному сполучення результату:

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

Вправа 1.1:

1. Використовуючи аксіоми для скалярного твору, доведіть, що

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

2. Доведіть $\langle A|A\rangle$ є дійсним числом.

У конкретному *поданні* бра- та кет-векторів за допомогою рядків- та стовпець-векторів, скалярний твір визначається в термінах компонентів наступним чином:

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

Правило для скалярного твору, наступне: необхідно скласти твори відповідних компонентів векторів, для яких обчислюється скалярний твір.

Вправа 1.2:

1. Показати, що скалярне твір, що визначається рівнянням (1.2), задовольняє всім аксіомам скалярного твору.

Використовуючи скалярне твір, ми можемо визначити деякі поняття, знайомі з прикладу звичайних 3-векторів:

- *Нормований вектор*: Вектор називається нормованим, якщо його скалярний твір із самим собою дорівнює 1. Нормовані вектори задовольняють таку умову,

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

Для звичайних 3-векторів термін нормований вектор зазвичай замінюється терміном *одиничним вектором*, тобто вектор одиничної довжини.

- *Ортогональні вектори*: Два вектори називаються ортогональними, якщо їхній скалярний твір дорівнює нулю. $|A\rangle$ і $\langle B|$ ортогональні, якщо

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

Це є аналогом твердження, що два 3-вектори ортогональні один одному, якщо їх скалярний добуток дорівнює нулю.

1.9.5. Ортонормований базис

При роботі зі звичайними 3-векторами, дуже корисно ввести набір з трьох взаємно ортогональних одиничних векторів і використовувати їх як базис для побудови будь-якого вектора. Прикладом такого базису можуть бути три одиничні 3-вектори, які вказують уздовж осей x , y , z . Вони, як правило, позначаються \hat{i} , \hat{j} і \hat{k} . Кожен з них має одиничну довжину і ортогональний до інших. Якщо ви спробуєте знайти четвертий вектор, ортогональний до цих трьох, то такого не виявиться - не в тривимірному просторі, принаймні. Проте, якби простір було б більшої розмірності, було б більше базисних векторів. *Розмір простору можна визначити як максимальну кількість взаємно ортогональних векторів у цьому просторі.*

Очевидно, що немає нічого особливого в конкретних осях x , y та z . Якщо базисні вектори мають одиничну довжину і ортогональні один одному, вони складають *ортонормований базис*.

Той самий принцип відноситься і до комплексних векторних просторів. Можна почати з будь-якого нормованого вектора, а потім шукати другий, ортогональний до першого. Якщо ви знайшли такий, то простір принаймні двовірний. Тоді спробуйте знайти третій, четвертий, і таке інше. Зрештою, ви не зможете знайти нові ортогональні напрямки і жодних кандидатів бути ортогональними до вже знайдених векторів не буде. *Максимальна кількість взаємно ортогональних векторів визначає розмірність простору.* Для стовпців векторів розмірність просто дорівнює кількості записів у стовпці.

Розглянемо N -мірний простір і конкретний ортонормований базис кет-векторів, що позначаються як $|i\rangle$. Мітка i пробігає значення від 1 до N . Розглянемо вектор $|A\rangle$, написаний у вигляді суми базисних векторів, кожен з яких помножений на якесь число:

$$|A\rangle = \sum_j \alpha_j |j\rangle. \quad (1.3)$$

α_j , комплексні числа, називаються *компонентами вектора* $|A\rangle$. Для того, щоб обчислити компоненти вектора, обчислимо скалярний добуток лівої та правої сторони вищенаведеної рівності з базою $\langle\ell|$:

$$\langle\ell|A\rangle = \sum_j \alpha_j \langle\ell|j\rangle. \quad (1.4)$$

Далі ми використовуємо той факт, що вектори базису ортонормовані. Це означає, що $\langle\ell|j\rangle = 0$, якщо ℓ не дорівнює j , і $\langle\ell|j\rangle = 1$, коли $\ell = j$. Інакше кажучи, $\langle\ell|j\rangle = \delta_{\ell j}$. Ця умова призводить до того, що сума в рівнянні (1.4) зводиться лише до одного члену:

$$\langle\ell|A\rangle = \alpha_\ell. \quad (1.5)$$

Таким чином, бачимо, що компонентами вектора є його скалярні твори з базисними векторами. Ми можемо переписати рівняння (1.3) в елегантній формі

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

2. Квантовий стан

Art: Oddly enough, that beer made my head stop spinning. What state are we in?

Lenny: I wish I knew. Does it matter?

Art: It might. I don't think we're in California anymore.

2.1. Стани та вектори

У класичній фізиці, ми говоримо, що ми знаємо стан системи в тому випадку, коли ми знаємо все, що потрібно, для того, щоб передбачити майбутнє цієї системи.

Як ми вже бачили в останній лекції, квантові системи не є цілком передбачуваними. Очевидно, що квантові стани мають інший сенс, ніж класичні стани. Грубо кажучи, ми говоримо, що ми знаємо стан квантової системи в тому випадку, коли ми знаємо все, що може бути відомо про те, як була "приготовлена" система. У попередньому розділі ми говорили про використання пристрою для того, щоб приготувати певний стан спини. Насправді, ми неявно припускали, що не існує дрібніших деталей, які уточнювали б або могли б уточнити відомості про стан спина.

Можна запитати, чи не є непередбачуваність у поведінці квантової системи результати свого роду неповноти того, що ми називаємо квантовим станом. Є різні думки щодо цього. Ось приклади:

- Так, звичайне поняття квантового стану є неповним. Є "приховані змінні" які, якби ми тільки могли визначити їх, дозволили б описати поведінку квантової системи цілком передбачувано. Є дві версії цієї точки зору. В одній версії приховані змінні важко виміряти, але в принципі вони експериментально доступні для нас. В іншій версії, приховані змінні, в принципі, не можуть бути виявлені нами, тому що ми зроблені з квантово-механічної речовини і тому схильні до тих же обмежень, які, власне, і призводять до того, що змінні є прихованими і не входять явно у квантовомеханічну теорію. Вони приховані від нас.

- Ні, концепція прихованих змінних не є корисною. Квантова механіка є неминуче непередбачуваною. Квантова механіка є максимально можливою повною теорією обчислення ймовірностей. Робота фізика полягає у вивченні та використанні цього обчислення.

Я не знаю ні остаточної відповіді на це питання, ні того, чи є таке питання взагалі осмисленим. Але для наших цілей не так важливо, що конкретний фізик думає про те, що таке квантовий стан. З практичних міркувань, ми приймемо другий погляд. Яка, для квантового спина, розглянутого в Лекції ref lec01, означає наступне. Коли апарат А спрацьовує і каже нам, що $\sigma_z = +1$ або $\sigma_z = -1$, то нам нічого більше не потрібно і тут нічого більше уточнювати. Аналогічно, коли ми повертаємо вісь апарата та вимірюємо $\sigma_x = +1$ або $\sigma_x = -1$, то це все, що нам потрібно. Так само для σ_y або будь-якої іншої проекції спина.

2.2. Подання спинових станів

Тепер настав час, щоб спробувати наші сили у поданні спинових станів за допомогою векторів-станів. Наша мета полягає в тому, щоб побудувати *уявлення*, яке відбиває все, що ми знаємо про поведінку спинів. На даний момент цей процес буде швидше інтуїтивним, ніж формальним. Ми виходитимемо з того, що ми вже дізналися. Будь ласка, прочитайте цей розділ ретельно. Повірте, це окупиться.

Давайте почнемо з позначень для можливих спинових станів вздовж трьох координатних осей. Якщо вісь приладу А орієнтована вздовж осі z , два можливі стани, які можуть бути приготовлені, відповідають $\sigma_z = \pm 1$. Давайте назвемо їх “вверх”(up) і “вниз”(down) і позначимо їх кет-векторами $|u\rangle$ та $|d\rangle$. Отже, коли вісь апарата А орієнтована вздовж осі z і апарат показує $+1$, то результатом виявляється приготовленим стан $|u\rangle$.

З іншого боку, якщо пристрій орієнтований вздовж осі x і реєструє -1 , то підготовлено стан $|l\rangle$. Ми будемо називати його “ліворуч”(left). Якщо А орієнтований уздовж осі y , то можуть бути приготовлені стани $|i\rangle$ і $|o\rangle$ “всередину” (in) та “назовні”(out) . Сподіваюся, ви вловили ідею.

Ідея, що немає жодних прихованих змінних має дуже просте математичне уявлення: простір станів для одного спина має лише два виміри. Цей

момент заслуговує на те, щоб його виділити:

Всі можливі спінові стани можуть бути представлені у двовірному векторному просторі.

Ми могли б, до певної міри довільно, вибрати $|u\rangle$ і $|d\rangle$ як два базові вектори і висловити будь-який спиновий стан у вигляді лінійної суперпозиції цих двох базисних станів. Ми так і вчинимо зараз. Давайте використовувати символ $|A\rangle$ для позначення довільного стану. Ми можемо записати це як наступне рівняння,

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

де α_u і α_d є компонентами стану $|A\rangle$ вздовж базисних напрямків $|u\rangle$ та $|d\rangle$. Формально компоненти вектора визначаються як

$$\begin{aligned}\alpha_u &= \langle u|A\rangle, \\ \alpha_d &= \langle d|A\rangle.\end{aligned}\tag{2.6}$$

Ці рівняння дуже абстрактні та його фізичний сенс не очевидний. Я збираюся сказати вам прямо зараз, що вони означають: Насамперед, $|A\rangle$ може представляти будь-який стан спини, приготовлений будь-яким способом. Компоненти α_u і α_d є комплексними числами і власними силами немає сенсу з погляду експерименту. Проте їх модулі (точніше квадрати модулів) цілком свідомі. Зокрема, $\alpha_u^* \alpha_u$ і $\alpha_d^* \alpha_d$ мають такі значення:

- За умови, що спин був підготовлений у стані $|A\rangle$, і, що пристрій орієнтований вздовж z , величина $\alpha_u^* \alpha_u$ є ймовірність того, що вимір покаже значення $\sigma_z = +1$. Іншими словами, це ймовірність того, що спин спрямований вгору, якщо вимір проводиться вздовж осі z .
- Аналогічно, $\alpha_d^* \alpha_d$ є ймовірність того, що при вимірі виявиться, що спин спрямований вниз.

Значення α_u і α_d , або, що еквівалентно $\langle u|A\rangle$ і $\langle d|A\rangle$, називаються *амплітуди ймовірності*. Вони власними силами є ймовірностями. Можливість визначається як квадрат модуля амплітуди ймовірності. Іншими словами, ймовірності вимірювань вгору та вниз визначаються як

$$P_u = \langle A|u\rangle \langle u|A\rangle, \tag{2.7}$$

$$P_d = \langle A|d\rangle \langle d|A\rangle.$$

Я нічого не говорив про те, якою була σ_z до вимірювання. Перед виміром все, що ми маємо - це вектор $|A\rangle$, який виражає потенційні можливості, але не фактичні значення наших вимірів.

Важливими є два наступні моменти: Перше, зауважте, що вектори $|u\rangle$ і $|d\rangle$ є взаємно ортогональними. Іншими словами,

$$\langle u|d\rangle = 0, \tag{2.8}$$

$$\langle d|u\rangle = 0.$$

Фізичний сенс цього у тому, що й спин приготовлений може вгору, то ймовірність того, щоб виявити його вниз дорівнює нулю, і навпаки. Цей момент такий важливий, що я повторю його ще раз: *два ортогональні стани фізично різні і взаємно виключають*. Якщо спин знаходиться в одному з цих станів, то він не може бути (має нульову можливість бути) в іншому стані. Ця ідея відноситься до всіх квантових систем, а не лише до спин.

Але не плутайте ортогональність векторів станів із ортогональністю напрямків у просторі. Насправді, напрями вгору і вниз, не ортогональні напрями в просторі, хоч і пов'язані з ними векторні стани ортогональні в просторі станів.

Другим важливим моментом є те, що загальна ймовірність дорівнює одиниці:

$$\alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d = 1. \quad (2.9)$$

Це рівнозначно твердженню, що вектор стану $|A\rangle$ є нормованим,

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

Це дуже загальний принцип квантової механіки, який поширюється на всі квантові системи: стан стану представлений одиничним (нормованим) вектором у векторному просторі станів. Крім того, зведені квадрат (квадрат модуля) проекції вектора стану вздовж конкретних базисних векторів, являють собою ймовірності для різних результатів експерименту.

2.3. Вздовж осі x

Ми говорили вище, що ми можемо уявити будь-який спиновий стан у вигляді лінійної комбінації базисних векторів $|u\rangle$ і $|d\rangle$. Давайте спробуємо зробити це зараз для векторів $|r\rangle$ і $|l\rangle$, які є можливими станами спина, приготовленого вздовж осі x . Почнемо з $|r\rangle$, що відповідає стану "направо". Як ви пам'ятаєте з Лекції 1, якщо вимірювальний пристрій A спочатку готує $|r\rangle$, а потім повертається, для того, щоб виміряти σ_z , то будуть рівні ймовірності для станів "вгору" і "вниз". Таким чином, $\alpha_u^* \alpha_u$ і $\alpha_d^* \alpha_d$ обидва повинні дорівнювати $\frac{1}{2}$. Простий вектор, який задовольняє це правило, є

$$|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |d\rangle. \quad (2.10)$$

Існує деяка невизначеність у такому виборі, але, як ми побачимо пізніше, це не що інше, як неоднозначність у виборі точних напрямів для осей x та y .

Далі, погляньмо на вектор $|l\rangle$. Ось що ми знаємо про нього: якщо спин був підготовлений в стані "ліворуч то ймовірності для $\sigma_z = +1$ (стан "вгору") і $\sigma_z = -1$ (стан "вниз") знову однакові і рівні $\frac{1}{2}$. Цього мало визначення значень α_u і α_d . Однак є ще одна умова, яку можна використати. А саме, як я говорив раніше, вектори $|u\rangle$ і $|d\rangle$ ортогональні один одному з тієї простої причини, що якщо спин вгору, це безумовно не вниз. Але немає нічого особливого в цьому "вгору" і "вниз". Те саме справедливо і для станів "вправо" і "вліво". Зокрема, якщо спин знаходиться в стані "вправо то ймовірність виявити його в стані "вліво" дорівнює нулю. Звідси випливає, що стани, описані кет-векторами $|r\rangle$ і $|l\rangle$ ортогональні один одному. Таким чином, за аналогією з рівнянням Eq. (2.8) маємо,

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

Ця умова цілком достатньо для того, щоб визначити вектор $|l\rangle$ у наступному вигляді,

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle. \quad (2.11)$$

Знову ж таки, є певна невизначеність у виборі $|l\rangle$. Це називається фазовою неоднозначністю. Припустимо, що ми примножуємо $|l\rangle$ на будь-яке комплексне число z . Така операція ніяк не позначиться на умові ортогональності між $|l\rangle$ та $|r\rangle$. Хоча в загальному випадку результат більше не буде нормованим вектором (тобто таким, що має одиничну довжину). Але якщо ми виберемо $z = e^{i\theta}$ (де θ може бути будь-яке речове число), то нормування теж не зміниться, тому що $e^{i\theta}$ має одиничну величину. Іншими словами, $\alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d$ залишиться рівним 1. Оскільки число виду $z = e^{i\theta}$ називається фазовим-фактором, розглянута неоднозначність називається *фазовою неоднозначністю*. Пізніше ми дізнаємося, що жодна з вимірюваних величин не є чутливою до загального фазового фактору, і тому ми можемо ігнорувати його при визначенні стану.

Вправа 2.1:

1. Доведіть, що вектор $|r\rangle$ з рівняння (2.10) є ортогональним вектором $|l\rangle$ з рівняння (2.11).

2.4. Вздовж осі y

І, нарешті, розглянемо $|i\rangle$ і $|o\rangle$, вектори, що описують спини, орієнтовані вздовж осі y . Погляньмо на умови, яким вони повинні задовольняти. Перше,

$$\langle i|o\rangle = 0. \quad (2.12)$$

Ця умова свідчить, що стани "всередину" (i) і "назовні" (o) представлені за допомогою ортогональних векторів таким же чином, що і "вгору" і "вниз". Фізично це означає, що якщо спин спрямований усередину, то це безперечно не назовні.

Існують додаткові обмеження на вектори $|i\rangle$ та $|o\rangle$. Використовуючи співвідношення, представлені в рівняннях (2.6) та (2.7), а також статистичні результати наших експериментів, ми можемо написати таке:

$$\begin{aligned} \langle o|u\rangle \langle u|o\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle o|d\rangle \langle d|o\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle i|u\rangle \langle u|i\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle i|d\rangle \langle d|i\rangle &= \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

У перших двох рівняннях $|o\rangle$ грає ту ж роль, що $|A\rangle$ в рівняннях (2.6) та (2.7). У других двох рівняннях $|i\rangle$ виконує цю роль. Дані умови стверджують, що якщо спин орієнтований вздовж y , а потім вимірюється вздовж z , то стани "вгору" і "вниз" будуть виявлені з рівною ймовірністю. Слід також очікувати, що якщо спин спочатку був виміряний уздовж осі y , то стани "вправо" або "вліво" будуть виявлені з рівною ймовірністю. Це призводить до додаткових умов:

$$\begin{aligned} \langle o|r\rangle \langle r|o\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle o|l\rangle \langle l|o\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle i|r\rangle \langle r|i\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle i|l\rangle \langle l|i\rangle &= \frac{1}{2}. \end{aligned} \tag{2.14}$$

Цих умов виявляється достатньо, щоб визначити вид $|i\rangle$ та $|o\rangle$ з точністю до несуттєвого фазового множника. Ось результат:

$$\begin{aligned} |i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |d\rangle, \\ |o\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |d\rangle. \end{aligned} \tag{2.15}$$

Вправа 2.2:

1. Доведіть, що вектори $|i\rangle$ і $|o\rangle$ задовольняють усім умовам рівнянь (2.12), (2.13) та (2.14). Чи є вони єдиними векторами, які відповідають усім зазначеним умовам?

Цікаво відзначити, що два компоненти в рівняннях Eq. (2.15) є уявними. Звичайно, ми говорили весь час, що простір станів є комплексним векторним простором, але нам досі не доводилося використовувати комплексні числа у наших розрахунках. Чи є комплексні числа в рівняннях (2.15) просто зручністю чи нагальною потребою? Враховуючи всі умови, яким повинні задовольняти спінові стани, немає ніякого способу обійтися без комплексних чисел. А саме, використовуючи тільки дійсні числа, ми змогли знайти лише дві пари взаємно ортогональних кет-векторів (що описують спін уздовж осі z і x). Для знаходження третьої пари векторів (що описують спін уздовж третьої осі, y) нам доводиться вдатися до допомоги комплексних чисел. Показати це у явному вигляді не складно, але втомлює. Наступна вправа дає уявлення про те, що слід для цього зробити. Необхідність комплексних чисел є загальною рисою квантової механіки і далі нам зустрінеться більше прикладів.

Вправа 2.3:

На якийсь час забудьте, що рівняння (2.15) дає працездатні вирази для векторів $|i\rangle$ і $|o\rangle$ через вектори $|u\rangle$ і $|d\rangle$. Припустимо, що компоненти α , β , γ та δ у наступних рівняннях невідомі:

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

1. Використовуйте рівняння (2.13), щоб показати, що

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

2. Використовуйте вищенаведений результат та рівняння (2.14) та покажіть, що

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

3. Покажіть, що кожен із наступних виразів $\alpha^* \beta$ і $\gamma^* \delta$ є чисто уявними.

Якщо $\alpha^* \beta$ чисто уявне, то обидва α і β не можуть бути одночасно дійсними. Ті ж міркування застосовні і по відношенню до γ і δ .

2.5. Підрахунок параметрів

Завжди важливо знати, скільки незалежних параметрів потрібно, щоб охарактеризувати систему. Наприклад, кожна з узагальнених координат, що використовуються в класичній механіці (звані q_i), є незалежним ступенем свободи. Підхід заснований на використанні узагальнених координат замість реальних просторових координат, полегшує виконання необхідних розрахунків, які, інакше, повинні враховувати у явному вигляді всілякі фізичні обмеження (зв'язки), що накладаються на систему, що вивчається. З тієї ж причини нам необхідно знати кількість ступенів свободи і у випадку квантової системи. Іншими словами, наше наступне завдання полягає в тому, щоб підрахувати кількість фізично різних станів, які існують для спини. Я робитиму це двома способами, щоб показати, що ви отримаєте ту ж відповідь у будь-якому випадку.

Перший спосіб простий. Направте вісь вимірювального пристрою A вздовж будь-якого одиничного z -вектора \vec{n} і приготуйте спин у стані з $\sigma = +1$ вздовж цієї осі. Значення $\sigma = -1$ може розглядатися як відповідний напрямок $-\vec{n}$. Таким чином, існує стан кожної орієнтації одиничного z -вектора \vec{n} . Скільки параметрів потрібно для орієнтації z -вектора? Відповідь на це питання, звісно, два. Необхідно два кути, щоб визначити напрямок у тривимірному просторі.

Тепер давайте розглянемо те саме питання з іншого погляду. Довіль-

ний стан спина визначається двома комплексними числами, α_u та α_d . Це відповідає чотирма дійсними параметрами (кожне комплексне число складається з двох дійсних). Проте насправді незалежних параметрів не чотири, а два. Нагадаємо, що вектор стану повинен бути нормований, дивись рівняння (2.9). Умова нормування дає одне рівняння (один зв'язок) з участю дійсних змінних, і скорочує кількість незалежних параметрів до трьох.

Як я вже говорив раніше, ми зрештою бачимо, що фізичні властивості не залежать від загального фазового фактора вектора стану. Це означає, що один з трьох параметрів, що залишилися, є надлишковим, залишаючи тільки два незалежні параметри. Стільки ж, скільки й потрібний для завдання напрямок у тривимірному просторі. Таким чином, у наступному вираженні

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

є достатньо волі у тому, щоб описати всі можливі орієнтації спина. Незважаючи на це, є тільки два можливі результати експерименту з вимірювання проекції спина на будь-яку вісь.

2.6. Подання спинових станів вектор-стовпцями

Досі ми змогли багато чого навчитися, використовуючи абстрактну форму наших векторів-станів, таких як $|u\rangle$ та $|d\rangle$ і так далі. Ці абстракції допомагають нам зосередитися на математичних взаєминах, не переймаючись непотрібними деталями. Тим не менш, найближчим часом нам необхідно буде виконати детальні розрахунки з використанням спинових станів, і для цього нам необхідно записати наші вектори-станів у вигляді стовпців. Через "фазову невизначеність уявлення векторів станів у вигляді стовпців не є унікальними. Тому ми намагатимемося вибрати найбільш прості та зручні з тих, що ми зможемо знайти.

Як завжди, ми почнемо з $|u\rangle$ та $|d\rangle$. Нам потрібно, щоб вони мали одиничну довжину, і були взаємно ортогональні. Пара стовпців, яка задовольняє цим вимогам, є

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

$$|d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

За допомогою цих векторів-стовпців буде легко записати вектори-стовпці для $|r\rangle$ і $|l\rangle$ за допомогою формул (2.10) та (2.11), а також для $|i\rangle$ і $|o\rangle$ за допомогою формул (2.15). Ми зробимо це у наступній лекції, де знадобляться ці результати.

2.7. Збираючи все разом

У цій лекції ми розглянули чимало основних понять. Перед тим як рухатися далі, давайте підіб'ємо короткий підсумок того, що ми зробили. Наша мета полягала в тому, щоб поєднати те, що ми знаємо про спини та про векторні простори. Ми з'ясували, як використовувати вектори для представлення спінових станів, і в цьому процесі ми отримали уявлення про те, яку інформацію містить вектор стану (а яку не містить!). Ось короткий виклад того, що ми зробили:

- На основі наших знань про вимірювання проекції спина, ми вибрали три пари взаємно ортогональних базисних векторів. Ми назвали їх попарно $|u\rangle$ і $|d\rangle$, $|r\rangle$ і $|l\rangle$ і $|i\rangle$ та $|o\rangle$. Оскільки базисні вектори $|u\rangle$ і $|d\rangle$ є фізично різні стани, ми змогли стверджувати, що вони взаємно ортогональні. Іншими словами, $\langle u|d\rangle = 0$. Те саме справедливо і для $|r\rangle$ і $|l\rangle$, а також для $|i\rangle$ і $|o\rangle$.
- Ми виявили, що необхідні два незалежні параметри, щоб задати спіновий стан, а потім ми довільно вибрали одну з ортогональних пар, $|u\rangle$ і $|d\rangle$, як базові вектори для представлення всіх спінових станів. Звернемо увагу на те, що необхідні два комплексні числа (або іншими словами, чотири дійсні числа) для того, щоб висловити довільний

спиновий стан через базисні вектори. Як ми змогли визначити ці цифри? Ми помітили, що ці чотири числа пов'язані певними співвідношеннями і тому не є незалежними. Умова нормування (сумарна ймовірність має бути 1) зменшує число незалежних параметрів на один. Крім того, загальна фаза є не суттєвою (тобто фізика вектора-стану не залежить від його загальної фази), що прибирає другий незалежний параметр.

- Вибравши $|u\rangle$ і $|d\rangle$ як основні базові вектори, ми з'ясували, як висловити дві інші пари базисних векторів у вигляді лінійних комбінацій $|u\rangle$ і $|d\rangle$. Для цього ми використовували додаткові умови ортогональності і той факт, що сумарна ймовірність усіх можливих результатів має дорівнювати одиниці.
- І, нарешті, ми встановили спосіб, як уявити наші базові вектори у вигляді стовпців. Таке уявлення не є унікальним. У наступній лекції ми будемо використовувати наші $|u\rangle$ та $|d\rangle$ вектори-стовпчики для того, щоб отримати вектори-стовпчики для двох інших базисів.

У процесі обчислення конкретних результатів, розглянутих вище, ми маємо можливість ознайомитися з математикою, яка використовується для опису станів квантової системи. Нагадаємо, що стани квантової системи описуються векторами в якомусь умовному комплекснозначному лінійному просторі, яке називається простором Гільберта. Хоча ми зосередилися на спині, але ті ж самі поняття та методи застосовні і до інших квантових систем. Будь ласка, знайдіть трохи часу, щоб засвоїти матеріал, який ми розглянули до цього часу, перш ніж переходити до наступної лекції. Як я вже казав на самому початку, це себе окупить.

3. Принципи квантової механіки

Art: I'm not like you, Lenny. My brain just wasn't built for quantum mechanics.

Lenny: Nah, mine wasn't either. Just can't really visualize the stuff. But I'll tell you, I once knew a guy who thought just like an electron.

Art: What happened to him?

Lenny: Art, all I'm gonna tell you is that it sure wasn't pretty.

Art: Hmm, I guess that gene didn't fly.

Ні, ми не створені здатними відчутти квантові явища, як ми можемо сприймати класичні поняття, такі як сила та температура. Але ми дуже кмітливі істоти. І ми можемо замінити абстрактною математикою відсутні органи почуттів, які могли б дозволити нам безпосередньо візуалізувати квантову механіку. І з часом ми зможемо розробити нові види інтуїції (для того, щоб "зрозуміти" як функціонує квантовий світ).

У цьому лекції розглядаються принципи квантової механіки. Щоб описати ці принципи, нам знадобляться деякі нові математичні поняття. Давайте почнемо.

3.1. Математичний відступ: лінійні оператори

3.1.1. Машини та матриці

Стан квантової механіки описуються математично як вектори у векторному просторі. Фізичні спостережуваними – величини, які можна виміряти – описуються *лінійними операторами*. Ми використовуємо це твердження як аксіома. Далі (у розділі [3.1.5](#)), ми встановимо, що оператори, відповідні фізичним спостережуваним, мають бути як лінійними, а й ермітовими. Відповідність між операторами і спостерігається досить хитрим і розуміння цього зв'язку вимагатиме деяких зусиль.

Спостережувані це величини, які ви вимірюєте. Наприклад, ми можемо безпосередньо виміряти координати частки, енергію. Спостережені також пов'язані з векторним простором, але вони є вектор-станами. Вони є величинами, які ви вимірюєте – σ_x , наприклад, - і вони представлені лінійними операторами. Джон Уїлер любив називати такі математичні об'єкти машинами. Він уявляв собі машину з двома портами: порт входу та порт виходу. У порті ви вставляєте вектор, такий як $|A\rangle$. Шестерні повертаються і машина видає результат у вихідний порт. Цей результат є ще одним вектором, наприклад $|B\rangle$.

Давайте позначимо оператор напівжирною літерою \mathbf{M} (від слова "машина"). Нижче наведено рівняння, яке відображає той факт, що \mathbf{M} діє на вектор $|A\rangle$ і в результаті виходить $|B\rangle$:

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

Не кожна машина є лінійним оператором. Лінійність передбачає кілька найпростіших властивостей. Почнемо з того, що лінійний оператор має давати єдиний результат для кожного вектора у просторі. Ми можемо уявити собі машину, яка дає результат для деяких векторів, а інші вектори просто перемелює і нічого не дає. Така машина не буде лінійним оператором. Щось обов'язково має вийти, якщо ви вклали щось у машину.

Наступна властивість показує, що, коли лінійний оператор \mathbf{M} діє на твір вхідного вектора і числа, то виходить твір цього ж числа і того вектора, який вийшов би, якби машина діяла на вектор без співмножника. Таким чином, якщо $\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$, і z є будь-яке комплексне число, то

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

Залишилося тільки ще одне правило, а саме, коли \mathbf{M} діє на суму векторів, то результати просто складаються:

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

Щоб дати конкретне представлення лінійних операторів, звернімося до представлення бра- та кет-векторів за допомогою рядків та стовпців, яке ми використовували в Лекції 1. Позначення рядків та стовпців залежить від вибору базових векторів. Якщо векторний простір N -мірний, то ми виберемо безліч N ортонормованих (ортогональних та нормованих) кет-векторів. Даваймо позначати їх $|j\rangle$, а дуальні ним бра-вектора будемо позначати $\langle j|$.

Зараз ми візьмемо наступне рівняння

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

і розпишемо його покомпонентно. Як ми вже робили в рівнянні (1.3), ми розкладемо довільний кет $|A\rangle$ за базовими векторами, тобто представимо його у вигляді наступної суми:

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

Тут ми використовуємо j , а не i як індекс, щоб ви не були схильні думати, що ми говоримо про спиновий стан $|i\rangle$ (in). Далі ми представимо $|B\rangle$ таким же чином і підставимо обидва ці розкладання до рівняння $\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$. Це дає

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

Останній крок полягає в тому, щоб помножити скалярно обидві сторони на певний базовий вектор $|k\rangle$, що призводить до

$$\sum_j \langle k|\mathbf{M}|j\rangle \alpha_j = \sum_j \beta_j \langle k|j\rangle. \quad (3.18)$$

Щоб зрозуміти зміст отриманого результату, пам'ятайте, що скалярний твір $\langle k|j\rangle$ дорівнює нулю, якщо j і k не рівні, і дорівнює одиниці, якщо ці вектори збігаються. Це означає, що сума в правій стороні зводиться до одного члена β_k .

З лівого боку, бачимо безліч величин $\langle k|\mathbf{M}|j\rangle\alpha_j$. Ми будемо використовувати скорочене позначення m_{kj} для $\langle k|\mathbf{M}|j\rangle$. Зверніть увагу, що кожен m_{kj} є просто комплексне число. Щоб зрозуміти чому це так, зауважимо, що в результаті дія \mathbf{M} на $|j\rangle$ виходить деякий новий кет-вектор. А скалярне твір $\langle k|$ з цим новим кет-вектором є комплексним числом. Величини m_{kj} називаються *матричними елементами* \mathbf{M} і часто групуються всі разом у квадратну $N \times N$ матрицю. Наприклад, якщо $N = 3$, ми можемо записати символічне рівняння

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Це рівняння є прикладом зловживання позначеннями. Ліва сторона є абстрактним лінійним оператором, а права сторона є конкретним уявленням його в конкретному базисі (у нашому випадку, в базисі векторів $|j\rangle$). Прирівнювати їх не можна, це свого роду недбалість, що, однак, не повинно призвести до плутанини.

Тепер давайте повернемося рівняння (3.18) і замінимо $\langle k|\mathbf{M}|j\rangle$ на m_{kj} . Ми отримуємо

$$\sum_j m_{kj}\alpha_j = \beta_k. \quad (3.20)$$

Запишемо дане рівняння також у матричній формі

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Ви, напевно, знайомі з правилом для множення матриць, але я нагадаю вам про всяк випадок. Для того, щоб обчислити перший елемент праворуч β_1 , необхідно взяти перший рядок матриці і скалярно помножити його на колонку α :

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

Для другого елемента ми множимо другий рядок на стовпець α :

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

І так далі. Якщо ви не знайомі з множенням матриць, ознайомтеся з ним негайно. Ця операція є важливою частиною нашого набору інструментів, і я припускаю при подальшому викладі, що ви знайомі з нею.

Є як переваги, так і недоліки у поданні векторів та лінійних операторів у вигляді стовпців, рядків та матриць (відомих під загальною назвою *компоненти*). Переваги очевидні. Компоненти забезпечують явний набір арифметичних правил для роботи машини. Недолік полягає в тому, що вони залежать від конкретного вибору базових векторів. У той же час, співвідношення між векторами та операторами не залежать від конкретного базису, який ми вибираємо. А використання конкретної думки приховує цей важливий факт.

3.1.2. Власні значення та власні вектори

У випадку, коли лінійний оператор діє вектор, він змінює напрям вектора. Це означає, що те, що виходить з машини, буде не тільки вхідний вектор, помножений на деяке число, але і, можливо, повернутий. Однак для конкретного лінійного оператора існують певні вектори, для яких напрямок вихідного вектора збігається з напрямком вхідного вектора. Ці спеціальні вектори називаються власними векторами. За визначенням, власним вектором для лінійного оператора \mathbf{M} називається такий вектор $|\lambda\rangle$

$$\mathbf{M} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle. \quad (3.22)$$

Подвійне використання λ може трохи збивати з пантелику. Для цього пояснимо. Насамперед, λ (на відміну $|\lambda\rangle$) є число, зазвичай, комплексне число, але все-таки число. З іншого боку, $|\lambda\rangle$ є кет-вектором. Більше того, цей кет є спеціальним по відношенню до \mathbf{M} . А саме, коли $|\lambda\rangle$ подається в машину \mathbf{M} , все, що відбувається зводиться до простого множення даного вектора на число λ . Я наведу приклад. Нехай \mathbf{M} є матриця 2×2 ,

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

тоді легко показати, що наступний вектор

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

просто множиться на 3, коли матриця \mathbf{M} діє на нього. Спробуйте перевірити це. Оператор \mathbf{M} має ще один власний вектор:

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

Внаслідок дії \mathbf{M} цей власний вектор множиться на інше число, а саме на -1 . З іншого боку, якщо \mathbf{M} діє наступний вектор

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

то вектор не просто множиться на число. \mathbf{M} змінює як його величину, і його напрям.

Подібно до того, як вектори, які множаться на число, коли \mathbf{M} діє на них, називаються власні вектори \mathbf{M} , константи, на які вони множаться,

називаються *власними значеннями*. У випадку, власні значення є комплексними числами. Нижче наведено приклад, який можна розібрати самостійно. Візьміть матрицю

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

і покажіть, що вектор

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

є власним вектором, якому відповідає значення $-i$.

Лінійні оператори також діють на бра-вектори. Розмноження оператора \mathbf{M} на бра-вектор позначається так,

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

Правила для такого множення є найбільш зрозумілими в компонентному записі. Пам'ятайте, що бра-вектори компонентного запису представлені вектор-рядками. Наприклад, бра $\langle B |$ може бути представлений як

$$\langle B | = (\beta_1^* \beta_2^* \beta_3^*).$$

Правило множення знову легко зводиться до правила матричного множення. У дещо громіздких позначеннях, маємо

$$\langle B | \mathbf{M} = (\beta_1^* \beta_2^* \beta_3^*) \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

3.1.3. Ермітове сполучення

Можна подумати, якщо $\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$, то $\langle A| \mathbf{M} = \langle B|$. Однак, це не так. Проблема полягає у комплексному поєднанні. Навіть тоді, коли Z є просто комплексним числом, з $Z|A\rangle = |B\rangle$ годі було, що $\langle A|Z = \langle B|$. Необхідно використовувати комплексно пов'язане число Z^* при переході від кет до бра векторів. Правильне співвідношення виглядає так: $\langle A|Z^* = \langle B|$. Звичайно, якщо Z є дійсним числом, то комплексне сполучення не має жодного ефекту - кожне речове число дорівнює своєму комплексно сполученому.

Що нам потрібно, то це поняття комплексного сполучення для операторів. Давайте подивимося на рівняння $\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$ у компонентах,

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

і запишемо комплексно пов'язане рівняння,

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

Ми хотіли б записати це рівняння у матричній формі, використовуючи бра замість кетів. При цьому слід пам'ятати, що бра-вектори представлені рядками, а не стовпцями. Для того, щоб результат вийшов правильним, ми також повинні переставити пов'язані елементи матриці \mathbf{M} . Перегрупована матриця позначається \dagger і її вираз у компонентах описано нижче. Наше нове рівняння виглядає так,

$$\langle A| \mathbf{M}^\dagger = (\alpha_1^* \alpha_2^* \alpha_3^*) \begin{pmatrix} m_{11}^* & m_{21}^* & m_{31}^* \\ m_{12}^* & m_{22}^* & m_{32}^* \\ m_{13}^* & m_{23}^* & m_{33}^* \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Подивіться уважно на різницю між матрицею у цьому рівнянні, та матрицею у рівнянні (3.23). Ви побачите дві відмінності. Найбільш очевидним є комплексне поєднання кожного елемента, але ви також можете побачити

різницю в індексах елементів. Наприклад, на тому місці, де стоїть елемент m_{23} у рівнянні (3.23), ви бачите m_{32}^* у формулі (3.24). Іншими словами, рядки та стовпці переставлені місцями.

Коли ми змінюємо рівняння, переходячи від кет до бра, ми повинні одночасно змінити матрицю оператора в два етапи:

1. Переставити рядки та стовпці.
2. Застосувати операцію комплексного сполучення до кожного елемента матриці.

У матричному обчисленні перестановка рядків і стовпців називається *транспонуванням* і позначається верхнім індексом T . Таким чином, результат транспонування матриці \mathbf{M} є

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

Зверніть увагу, що транспонування матриці нагадує перевертання її навколо головної діагоналі (діагоналі від верхнього лівого кута в правий нижній кут).

Комплексно пов'язана транспонована матриця називається *ермітово сполучена* і позначається верхнім індексом - хрест (dagger). Можна сприймати хрест як суміш зірки, що позначає комплексне сполучення, та літери T , що позначає транспонування. У символічному записі маємо,

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

Підсумуємо: якщо \mathbf{M} діє на кет $|A\rangle$ і дає $|B\rangle$, то \mathbf{M}^\dagger діє на бра $\langle A|$ та дає $\langle B|$. Те саме в символічному записі виглядає так:

якщо

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

то

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

3.1.4. Ермітові оператори

Справжні числа відіграють особливу роль у фізиці. Результати будь-яких вимірів є дійсними числами. Іноді ми вимірюємо дві величини, збираємо їх разом та використовуємо комплексну одиницю $i = \sqrt{-1}$, утворюємо комплексне число. Ми також називаємо таке (комплексне) число результатом виміру. Але насправді це просто спосіб поєднання результатів двох реальних вимірів. Якщо ми хочемо бути педантичним, ми могли б сказати, що величини, що спостерігаються, рівні їх власним комплексно пов'язаним. Це, звичайно, лише химерний спосіб сказати, що вони дійсні. Ми збираємося з'ясувати, дуже скоро, що квантові спостереження є лінійними операторами. Якими лінійними операторами? Такими, які найбільш близькі до дійсних операторів. Спостережені в квантовій механіці представлені лінійними операторами, які рівні своїм власним ермітово пов'язаним. Вони називаються *ермітові оператори* на честь французького математика Чарльза Ерміта. Ермітові оператори задовольняють таку властивість

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

Відповідно, матричні елементи задовольняють такій властивості

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

Іншими словами, якщо ви відобразите ермітову матрицю щодо головної діагоналі, а потім застосуйте операцію комплексного сполучення, результат буде таким же, як і вихідна матриця. Ермітові оператори (і матриці) мають деякі спеціальні властивості. По-перше, їх власні значення дійсні. Давайте доведемо це.

Нехай λ і $|\lambda\rangle$ є власним значенням та відповідним власним вектором ермітового оператора \mathbf{L} . У символному записі це виглядає так,

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

Тоді, за визначенням ермітового сполучення,

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

Однак, оскільки \mathbf{L} ермітів, він дорівнює \mathbf{L}^\dagger . Тому ми можемо записати обидва вищенаведені рівняння як

$$\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \tag{3.25}$$

і

$$\langle\lambda|\mathbf{L} = \langle\lambda|\lambda^*. \tag{3.26}$$

Далі помножимо (3.25) на $\langle\lambda|$ та (3.26) на $|\lambda\rangle$. Вони стають

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

і

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

Очевидно, щоб обидва рівняння були правильними, необхідно, щоб λ дорівнювала λ^* . Іншими словами, λ (і тому будь-яке власне значення ермітового оператора) має бути дійсним.

3.1.5. Ермітові оператори та ортонормовані базиси

Тепер ми переходимо до основної математичної теореми - я називатиму її фундаментальна теорема, - яка є основою квантової механіки. Основна ідея полягає в тому, що величини, що спостерігаються в квантовій механіці, представлені ермітовими операторами. Це дуже проста теорема, але надзвичайно важлива. Ми можемо її сформулювати більш точно таким чином:

Основна теорема

- Власні вектори ермітового оператора складають повний набір. Це означає, що будь-який вектор, який може генерувати даний оператор, може бути представлений як сума його власних векторів (кожен з яких, можливо, множиться на деяке комплексне число).
- Якщо λ_1 і λ_2 два не рівні власні значення ермітового оператора, то відповідні власні вектори ортогональні один одному.
- Навіть коли два власні значення рівні один одному, відповідні власні вектори можуть бути обрані ортогональними один одному. Ця ситуація, коли два власні вектори мають однакові власні значення, має спеціальну назву: це називається *виродженням*. Виродження виникає, коли два оператори мають спільні власні вектори, що будуть розглядатися пізніше, у розділі 5.1.

Можна коротко викласти основну теорему так: Власні вектори ермітового оператора утворюють ортонормований базис. Давайте доведемо цю теорему починаючи з другого пункту.

Відповідно до визначення власного вектора та власного значення, маємо

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

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

Тепер, використовуючи той факт, що \mathbf{L} є ермітовим (тобто співпадає зі своїм ермітово пов'язаним), ми можемо перетворити перше рівняння для відповідного бра вектора. Таким чином,

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

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

З цього місця вже очевидно, що слід робити, але я все ж таки озвучу, що слід робити. Слід взяти перше рівняння та примножити його скалярно на кет $| \lambda_2 \rangle$. Потім слід взяти друге рівняння і примножити його скалярно на бра $\langle \lambda_1 |$. В результаті отримаємо,

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

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

Віднімаючи одне з іншого, отримаємо

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

Тому, якщо λ_1 і λ_2 різні, то скалярне твір $\langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle$ має бути нулем. Або іншими словами, два відповідні власні вектори є ортогональними один одному.

Тепер, давайте доведемо, що навіть якщо $\lambda_1 = \lambda_2$, то два відповідні власні вектори *можуть бути обрані* ортогональними. Візьмемо

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

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

Іншими словами, нехай два різні власні вектори мають однакові власні значення. Цілком ясно, що будь-яка лінійна комбінація цих векторів є власним

вектором і має теж саме значення. Ця властивість забезпечує достатній рівень свободи для того, щоб знайти дві ортогональні один одному лінійні комбінації вихідних векторів.

Давайте подивимося, як це можна зробити. Розглянемо довільну лінійну комбінацію заданих двох власних векторів:

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

Діючи на обидві сторони оператором \mathbf{L} , отримаємо

$$\mathbf{L}|A\rangle = \alpha\mathbf{L}|\lambda_1\rangle + \beta\mathbf{L}|\lambda_2\rangle,$$

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

і наприкінці,

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

Це рівняння виявляє в явному вигляді, що будь-яка лінійна комбінація λ_1 і λ_2 також є власним вектором оператора \mathbf{L} з тим самим власним значенням. За вихідним припущенням λ_1 і λ_2 лінійно незалежні - інакше, вони не представляли б помітні стану. Ми також припустимо, що вони охоплюють весь підпростір власних векторів оператора \mathbf{L} із заданим власним значенням (тобто, немає третього лінійно незалежного вектора з тим самим власним значенням). Є наочна процедура, звана процедурою Грама - Шмідта, для відшукування ортонормованого базису для підпростору, що визначається набором незалежних векторів, що охоплюють весь підпростір. Говорячи простою українською (в оригіналі "in plain English"), ми можемо знайти два ортонормовані власні вектори, записуючи їх у вигляді лінійної комбінації заданих векторів λ_1 і λ_2 . У наступному розділі ми наведемо таку процедуру.

Остання частина теореми стверджує, що власні вектори є повними. Іншими словами, якщо простір N -мірний, то буде N ортонормованих власних векторів. Доказ є легким і я залишу його вам.

Вправа 3.1:

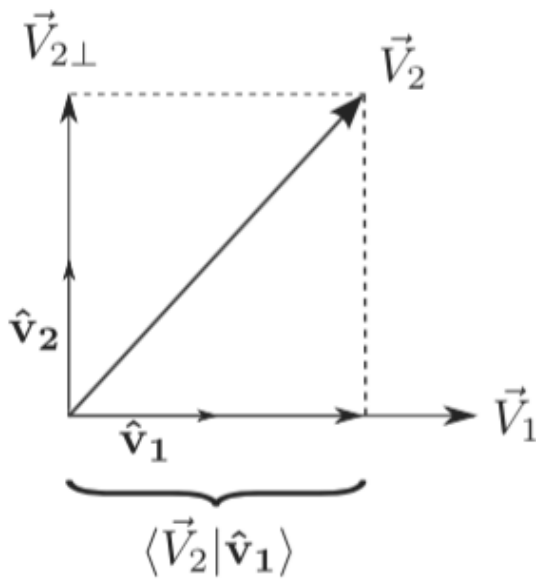
1. Доведіть наступне: Якщо векторний простір є N -мірним, то ортонормований базис із N векторів можна побудувати із власних векторів ермітового оператора.

Підказка: Покажіть, що у ермітового оператора, що діє на даному просторі, не може бути менше або більше власних векторів, ніж розмірність простору.

3.1.6. Процедура ортогоналізації Граму - Шмідта

Іноді ми стикаємося з багатьма лінійно незалежними власними векторами, які не утворюють ортонормований базис. Це зазвичай відбувається тоді, коли система має вироджені стани, тобто помітні стани, які мають однакові власні значення. У цій ситуації ми завжди можемо використовувати наявні лінійно незалежні вектори, щоб створити ортонормований базис, який охоплює той самий простір. Це є процедура Грама – Шмідта, про яку згадувалося раніше. На малюнку 3.1 показано, як це працює для простого випадку двох лінійно незалежних векторів. Почнемо з двох векторів \vec{V}_1 і \vec{V}_2 , і з них ми побудуємо два ортонормовані вектори, \hat{v}_1 і \hat{v}_2 .

Перший крок у тому, що ми ділимо вектор \vec{V}_1 з його довжину, $|\vec{V}_1|$, що дає нам одиничний вектор, паралельний \vec{V}_1 . Ми назвемо цей одиничний вектор \hat{v}_1 і він стає першим вектором у нашому ортонормованому базисі. Далі, ми проектуємо \vec{V}_2 на напрям \hat{v}_1 шляхом формування скалярного твору $\langle \vec{V}_2 | \hat{v}_1 \rangle$. Потім, ми віднімаємо $\langle \vec{V}_2 | \hat{v}_1 \rangle$ з \vec{V}_2 . Ми називати результат такого віднімання $\vec{V}_{2\perp}$. Ви можете побачити на малюнку 3.1, що $\vec{V}_{2\perp}$ ортогональний одиничному вектору \hat{v}_1 . Нарешті, ми розділимо $\vec{V}_{2\perp}$ на його довжину, щоб сформуванати другий елемент нашого ортонормованого набору \hat{v}_2 . Повинне бути зрозуміло, що ми можемо узагальнити цю процедуру на випадок більшої кількості вихідних лінійно незалежних векторів (тобто на випадок більшої кількості вимірювань). Наприклад, якщо у нас є третій лінійно незалежний вектор, скажімо \vec{V}_3 , що лежить поза площиною



$$\hat{v}_1 = \frac{\vec{V}_1}{|\vec{V}_1|}$$

$$\vec{V}_{2\perp} = \vec{V}_2 - \langle \vec{V}_2 | \hat{v}_1 \rangle \hat{v}_1$$

$$\hat{v}_2 = \frac{\vec{V}_{2\perp}}{|\vec{V}_{2\perp}|}$$

Мал. 3.1. Процедура Грама – Шмідта. Нехай дано два лінійно незалежні вектори, \vec{V}_1 і \vec{V}_2 , які не ортогональні один одному. Можна побудувати два ортонормованих вектори, \hat{v}_1 і \hat{v}_2 . Вектор $\vec{V}_{2\perp}$ є проміжним результатом, що використовується у процесі побудови. Ми можемо розширити цю процедуру для великих наборів лінійно незалежних векторів.

малюнка 3.1, то ми віднімемо з нього його проекції на кожен із одиничних векторів \hat{v}_1 і \hat{v}_2 , а потім розділимо результат на його довжину.

3.2. Принципи

Тепер ми повністю готові сформулювати принципи квантової механіки, тому, без зайвих слів, давайте зробимо це.

Усі принципи включають ідею спостережуваної, і вони передбачають існування відповідного комплексного векторного простору, вектори якого є станом системи. У цій лекції ми дамо лише чотири принципи, які не розглядають еволюцію векторів станів з часом. У лекції 4 ми додамо п'ятий принцип, який описує еволюцію станів системи з часом.

Спостережувану величину (або коротко, що спостерігається) також називають вимірюваною величиною (або коротко, що вимірюється). Цю величину ми власне і вимірюємо за допомогою відповідного вимірювального

пристрою. Раніше ми говорили про вимір компонент спина, σ_x , σ_y і σ_z . Це приклади спостережуваних. Ми ще повернемося до них, але спочатку сформулюємо самі принципи:

- **Принцип 1:** Наявні величини квантової механіки представлені лінійними операторами \mathbf{L} .

Я розумію, що це свого роду безнадійно абстрактне твердження, яке часто змушує людей відмовлятися від вивчення квантової механіки і зайнятися серфінгом натомість. Не хвилюйтеся, значення цього принципу стане зрозумілим до кінця лекції. Ми скоро побачимо, оператор \mathbf{L} має бути ермітом. Деякі автори розглядають це як постулат, тобто ще один основний принцип. Ми вибрали інший підхід і доведемо ермітність, виходячи з інших принципів. Кінцевий результат буде таким же так чи інакше: оператори, які представляють ермітові оператори, що спостерігаються.

- **Принцип 2:** Можливі результати вимірювання є власними значеннями оператора, який представляє спостережувану. Ми називатимемо ці власні значення λ_i . Стан, для якого результат вимірювання однозначно є λ_i , описується відповідним власним вектором $|\lambda_i\rangle$.

Не розпаковуйте поки що вашу дошку для серфінгу.

Ось ще один спосіб сформулювати сказане вище: якщо система перебуває в стані, який описується власним вектором $|\lambda_i\rangle$, то результат виміру гарантовано буде λ_i .

- **Принцип 3:** Однозначно помітні стану представлені ортогональними векторами.
- **Принцип 4:** Якщо $|A\rangle$ це вектор стану системи і вимірюється \mathbf{L} , то ймовірність отримати значення λ_i визначається так,

$$P(\lambda_i) = \langle A|\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|A\rangle. \quad (3.28)$$

Нагадаю, що λ_i є власними значеннями лінійного оператора \mathbf{L} , а $|\lambda_i\rangle$ є відповідними власними векторами.

Ці короткі висловлювання навряд досить зрозумілі. Але на даний момент, давайте хоча б прийmemo на віру перший елемент, а саме, що кожна спостереження ототожнюється з лінійним оператором. Ми вже можемо почати розуміти, що оператор є своєрідним способом об'єднання станів разом із власними значеннями, які є можливими результатами вимірювання цих станів. Ці ідеї будуть прояснитися у міру того, як ми рухатимемося вперед.

Згадаймо деякі важливі моменти з нашого попереднього обговорення спинів. По-перше, результат виміру, зазвичай, є статистично невизначеним. Тим не менш, для будь-якої заданої спостерігається існують особливі стани, для яких результат вимірювання однозначно визначений. Наприклад, якщо спін-вимірювальний апарат орієнтований вздовж осі z , стан $|u\rangle$ завжди призводить до значення $\sigma_z = +1$. Аналогічно, стан $|d\rangle$ ніколи не дає нічого, крім $\sigma_z = -1$. **Принцип 1** дає нам новий спосіб подивитись ці факти. Він має на увазі, що кожна спостерігається $(\sigma_x, \sigma_y$ і $\sigma_z)$ ототожнюється з певним лінійним оператором у двовимірному просторі станів, що описують спин.

Коли спостерігається вимірюється, результатом є речовинне число, одне з набору можливих результатів. Наприклад, якщо вимірюється енергія атома, то результатом буде один із встановлених рівнів енергії атома. Для добре відомого нам випадку спина, можливі значення будь-якого з компонентів дорівнюють ± 1 . Вимірювальний пристрій ніколи не дасть жодного іншого результату. **Принцип 2** визначає зв'язок між оператором відповідним спостерігається та можливими чисельними результатами вимірювань. А саме результат вимірювання завжди є одним із власних значень відповідного оператора. Таким чином, кожен компонент оператора спина повинен мати два власні значення, рівні ± 1 .

Принцип 3 є найцікавішим. Принаймні, я вважаю, що це так. Він говорить про *однозначно різні стани*. Ми вже стикалися з цим. Два стани фізично різні, якщо є вимір, який може однозначно відрізнити їх. Наприклад, $|u\rangle$ і $|d\rangle$ можна розрізнити шляхом вимірювання σ_z . Якщо вам дали спин і сказали, що він або може $|u\rangle$ або може $|d\rangle$, то щоб з'ясувати, який із цих двох станів є правильним, все, що вам потрібно зробити, це вирівняти вісь вимірювального пристрою \mathbf{A} з віссю z і виміряти σ_z . При цьому

не виникне жодної помилки. Те ж саме і для пари взаємовиключних (або іншими словами, однозначно різних) станів $|l\rangle$ і $|r\rangle$. Відрізнити їх можна шляхом вимірювання σ_x .

Але припустимо, що вам сказали, що спин в одному з двох наступних станів $|u\rangle$ або $|r\rangle$ (вгору або вправо). В цьому випадку не існує вимірювання, яке дозволить вам однозначно визначити в якому саме стані знаходиться спин. Вимірювання σ_z не може відповісти на це запитання. Якщо ви отримаєте $\sigma_z = +1$, це може означати і те, що вихідний стан був $|r\rangle$, так як є 50% ймовірність отримати цю відповідь у стані $|r\rangle$. З цієї причини $|u\rangle$ і $|d\rangle$ є фізично помітними станами, а стану $|u\rangle$ і $|r\rangle$ не є такими. Можна сміливо сказати, що скалярне твір двох станів є мірою нездатності достовірно розрізнити такі стану. Іноді скалярне твір називається перекриттям (станів). **Принцип 3** вимагає, щоб фізично різні стани були представлені ортогональними векторами станів, тобто, без перекриття. Таким чином, для спинових станів, $\langle u|d\rangle = 0$, але $\langle u|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

І, нарешті, **принцип 4** доводить ці ідеї до числа у правилі, що виражає ймовірності різних результатів експерименту. Якщо ми припустимо, що система була приготовлена в стані $|A\rangle$, а потім була виміряна \mathbf{L} , то результат співпадатиме з одним із власних значень λ_i оператора \mathbf{L} . Слід сказати, що в загальному випадку не існує ніякого способу дізнатися, яке саме з цих значень буде спостерігатися при даному вимірі. Існує лише ймовірність - назвемо її $P(\lambda_i)$, - що результат виміру буде λ_i . **Принцип 4** говорить нам про те, як обчислити цю ймовірність, і вона виражається через перекриття $|A\rangle$ і $|\lambda_i\rangle$. Точніше кажучи, ймовірність дорівнює квадрату величини перекриття:

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

або у розгорнутому вигляді,

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

Ви можете бути здивовані чому саме перекриття не є ймовірністю? Чому саме квадрат перекриття? Майте на увазі, що скалярний добуток двох векторів не завжди позитивний, або навіть не завжди є дійсною (не уявною) величиною. Ймовірність завжди позитивна і є дійсним числом. Тому

немає сенсу ототожнювати ймовірність $P(\lambda_i)$ з перекриттям $\langle A|\lambda_i\rangle$. Однак квадрат величини перекриття $\langle A|\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|A\rangle$ завжди позитивний і дійсний і, таким чином, може бути ідентифікований як ймовірність даного результату.

Важливим наслідком принципів 1-4 є наступне твердження:

Оператори, які представляють спостерігаються, є ермітовими операторами.

Причина цього двояка. По-перше, оскільки результат експерименту має бути дійсним числом, власні значення оператора \mathbf{L} також мають бути дійсними. По-друге, власні вектори, які представляють однозначно помітні результати, повинні мати різні власні значення, а також бути ортогональними. Ці умови є достатніми, щоб довести, що \mathbf{L} має бути ермітом.

3.3. Приклад: спінові оператори

Важко повірити, але одиночні спини - якими б простими вони не були - здатні багато чому навчити про квантову механіку, і ми плануємо цим скористатися повною мірою. Наша мета в цьому розділі полягає в тому, щоб записати спінові оператори у конкретній формі, як 2×2 матриці. Тоді ми зможемо побачити, як вони працюють у конкретних ситуаціях. Ми незабаром сконструюємо наші спінові оператори та вектори станів. Але перш ніж ми заглибимося в деталі, я хотів би сказати трохи більше про те, як оператори пов'язані з фізичними вимірами. Такий зв'язок досить тонкий, і ми будемо прояснити його по ходу справи.

Як ви знаєте, фізики визнають різні типи фізичних величин, такі як скаляри та вектори. Тому не дивно, що оператор, пов'язаний із виміром вектора (наприклад, такого як спін) також має векторний характер.

До цього часу ми бачили більш ніж один вид вектора. 3-вектор є найпростішим і служить як прототип. Це математичне уявлення стрілки у тривимірному просторі, і його часто представляють за допомогою трьох дійсних чисел, записаних як матриця-стовпець. Оскільки їх компоненти є речовими, 3-вектори не підходять для того, щоб представити квантові стани. Для цього нам потрібні бракет вектори, які мають комплекснозначні компоненти.

Яким вектором є оператор спина σ ? Він, безперечно, не є вектором стану (бра або кет). Він і не 3-вектор, хоча і нагадує останній у тому сенсі, що він також пов'язаний із напрямком у просторі. Насправді, ми часто будемо використовувати σ , якби це був простий 3-вектор. Тим не менш, щоб не вводити в оману і враховувати те, що оператор спина все ж таки не зовсім 3-вектор, ми будемо називати σ *3-вектор оператор*.

Але що це насправді означає? Фізично це означає наступне: Як пристрій вимірює спин може тільки відповісти на питання про орієнтацію спина в певному напрямку ("вгору" або "вниз" по відношенню до заданої осі), так і оператор спина може надати інформацію тільки про компонент спина у певному напрямку. Для того, щоб фізично виміряти спина в іншому напрямку, нам потрібно повернути пристрій, щоб вказати на новий напрямок. Та ж ідея застосовна і до оператора спина - якщо ми хочемо від нього отримати інформацію про складову спина в новому напрямку, ми повинні повернути відповідно і сам оператор спина. Однак цей вид обертання здійснюється лише математично і не пов'язаний з реальним обертанням чогось. Суть у тому, що є оператор спина кожному за напрямку, у якому вимірювальний пристрій може бути орієнтованим.

3.4. Побудова спинових операторів

Тепер давайте попрацюємо над деталями спинових операторів. Перша мета полягає в тому, щоб побудувати оператори компоненти спина, σ_x , σ_y і σ_z . Потім ми будемо спиратися на ці результати, щоб побудувати оператор, який є компонентом спина в довільному напрямку. Як завжди, ми почнемо з σ_z . Ми знаємо, що σ_z має певні значення для станів $|u\rangle$ і $|d\rangle$, і що відповідні виміряні значення є $\sigma_z = +1$ та $\sigma_z = -1$. Далі, ось те, що перші три принципи кажуть нам:

- **Принцип 1:** Кожна компонента σ є лінійним оператором.

- **Принцип 2:** Власні вектори $\sigma_z \in |u\rangle$ і $|d\rangle$. Відповідні власні значення є $+1$ та -1 . Ми можемо записати це за допомогою абстрактних рівнянь

$$\sigma_z |u\rangle = |u\rangle \tag{3.29}$$

$$\sigma_z |d\rangle = -|d\rangle.$$

- **Принцип 3:** Стан $|u\rangle$ і $|d\rangle$ ортогональні один одному. Це можна записати як

$$\langle u|d\rangle = 0. \tag{3.30}$$

Згадуючи уявлення $|u\rangle$ і $|d\rangle$ за допомогою стовпців, дивись рівняння (2.16) та (2.17), ми можемо записати рівняння (3.29) у матричній формі як

$$\begin{pmatrix} (\sigma_z)_{11} & (\sigma_z)_{12} \\ (\sigma_z)_{21} & (\sigma_z)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.31}$$

и

$$\begin{pmatrix} (\sigma_z)_{11} & (\sigma_z)_{12} \\ (\sigma_z)_{21} & (\sigma_z)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3.32}$$

Існує єдина матриця, яка відповідає цим рівнянням. Спробуйте довести самі це твердження та показати, що

$$\begin{pmatrix} (\sigma_z)_{11} & (\sigma_z)_{12} \\ (\sigma_z)_{21} & (\sigma_z)_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.33}$$

або в стислому вигляді

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.34)$$

Вправа 3.2:

1. Доведіть, що вираз (3.33) є єдиним рішенням рівнянь (3.31) та (3.32).

Це наш перший приклад квантово-механічного оператора. Давайте підб'ємо підсумок тому, що ми використовували для такої побудови:

По-перше, ми використовували деякі експериментальні дані, а саме: існують певні стани, які ми назвали $|u\rangle$ та $|d\rangle$, у якому вимір σ_z дає однозначні результати ± 1 .

Далі ми використовували принципи квантової механіки, які сказали нам, що $|u\rangle$ і $|d\rangle$ ортогональні один одному і є власними векторами лінійного оператора σ_z .

Нарешті, ми дізналися з принципів, що відповідні власні значення є саме тим, що і вимірюється, тобто ± 1 . Це все, що потрібно для одержання рівняння (3.34)

Чи можемо ми зробити те саме для двох інших компонентів спіна, σ_x і σ_y ? Так, ми можемо це зробити. Власними векторами σ_x є $|r\rangle$ і $|l\rangle$, з власними значеннями $+1$ та -1 відповідно. Запишемо це у вигляді рівнянь,

$$\begin{aligned} \sigma_x |r\rangle &= |r\rangle \\ \sigma_x |l\rangle &= -|l\rangle. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Нагадаємо, що $|r\rangle$ і $|l\rangle$ є лінійними суперпозиціями $|u\rangle$ і $|d\rangle$:

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

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |d\rangle$$

(3.36)

Підставляючи відповідні вектори-стовпці для $|u\rangle$ та $|d\rangle$, отримаємо

$$|r\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$|l\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Щоб зробити рівняння (3.35) більш конкретними, запишемо їх у матричній формі:

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

і

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

Якщо ви перепишете ці рівняння в компонентах, то вони перетворяться на чотири рівняння для матричних елементів $(\sigma_x)_{11}$, $(\sigma_x)_{12}$, $(\sigma_x)_{21}$ і $(\sigma_x)_{22}$, які легко вирішити. Ось рішення:

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

або

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

І, нарешті, можна аналогічно отримати вираз для σ_y . Власні вектори σ_y є стану “всередину” та “назовні”, які ми позначаємо як $|i\rangle$ і $|o\rangle$, відповідно:

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

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

Перепишемо ці рівняння у вигляді векторів-стовпців,

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

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

Просте обчислення дає

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

Можна підбити підсумок: три оператори σ_x , σ_y і σ_z представляються такими трьома матрицями:

$$\begin{aligned} \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.37}$$

Ці три матриці добре відомі у фізиці і називаються на ім'я того, хто їх відкрив. Вони називаються *матрицями Паулі*.

3.5. Поширена помилка

Зараз саме час для того, щоб попередити вас про потенційну небезпеку. Відповідність між операторами та вимірами має фундаментальне значення у квантовій механіці. Однак його (ця відповідність) дуже легко неправильно зрозуміти. Ось те, що вірно щодо операторів у квантовій механіці:

1. Оператори це те, що ми використовуємо для обчислення власних значень та власних векторів.
2. Оператори діють на вектори станів (які є абстрактними математичними об'єктами), а не реальні фізичні системи.
3. Коли оператор діє на вектор стану, створюється новий вектор стану.

Сказавши, що вірно щодо операторів, я хочу попередити вас про поширену помилку. Часто вважається, що результат вимірювання спостерігається таким же, як і результат дії відповідного оператора на вектор стану. Наприклад, припустимо, що ми зацікавлені у вимірі \mathbf{L} . Вимірювання є свого роду операцією, яка проводиться вимірювальним пристроєм над змінюваною фізичною системою, але ця операція жодним чином не є такою самою, як дія оператора \mathbf{L} на вектор стану. Наприклад, якщо стан системи до того, як ми проводимо вимір є $|A\rangle$, то не правильно говорити, що після вимірювання величини, яка описується оператором \mathbf{L} , стан системи стане $\mathbf{L}|A\rangle$. Загалом, це зовсім не так. Після такого виміру система перейде у стан, який описується одним із власних векторів оператора \mathbf{L} . Якщо таких станів кілька, то ми не можемо з достовірністю вказати, який саме з таких станів перейде система.

Щоб це зрозуміти, давайте уважно подивимося на приклад. На щастя, приклад спина, яку ми розглянули в попередньому пункті, є тим, що нам потрібно. Нагадаємо формули (3.29):

$$\sigma_z |u\rangle = |u\rangle,$$

$$\sigma_z |d\rangle = -|d\rangle.$$

В даному випадку ми не потрапляємо в пастку, тому що $|u\rangle$ та $|d\rangle$ є власними векторами оператора σ_z . Якщо система підготовлена, скажімо, може $|d\rangle$, то вимір, безумовно, дасть результат -1 , і оператор σ_z переводить початковий стан у відповідний стан після вимірювання $-|d\rangle$. Стан $-|d\rangle$ такий самий, як $|d\rangle$, за винятком множника -1 , так що обидва стани дійсно збігаються. Тут не виникло жодних проблем.

Але тепер давайте розглянемо дію σ_z на приготовлений стан $|r\rangle$, який не є одним із його власних векторів. З рівняння (3.36) ми знаємо, що

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

Діючи на цей вектор стану оператором σ_z , отримаємо

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

або

$$\sigma_z |r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |d\rangle. \quad (3.38)$$

Добре, от і пастка. Що б ви не думали, але вектор стану в правій частині рівняння (3.38), безумовно, не описує стан, який виникає після вимірювання σ_z . Результат такого виміру буде або $+1$, залишивши систему в стані $|u\rangle$, або -1 , залишаючи систему в стані $|d\rangle$. Жоден з результатів вимірювання (проекції спина на вісь z) не переведе систему на суперпозицію, представлену формулою (3.38).

Це правда, що вектор стану системи після вимірювання має бути пов'язаний з результатом вимірювання. Але як саме? Ми знайдемо частину відповіді в

лекції 4, де побачимо, як новий вектор стану дозволяє нам обчислити ймовірність кожного можливого результату виміру. Проте результат вимірювання не може бути описаний належним чином, без того, щоб не розглядати вимірювальний пристрій як частину системи. Що насправді відбувається під час вимірювання, є предметом розділу 7.8.

3.6. Перегляд операторів для 3-векторів

Тепер давайте повернемося до ідеї 3-вектор оператора. Я назвав σ_x , σ_y і σ_z компонентами спина вздовж трьох осей, маючи на увазі, що вони є компонентами певного виду 3-вектора. Зараз слушний момент, щоб повернутися до двох понять векторів, які виникають весь час у фізиці. По-перше, є вектор у звичайному тривимірному просторі, який вирішили назвати 3-вектор. Як ми бачили, 3-вектор має компоненти вздовж трьох напрямів простору.

Інший, зовсім інший зміст терміна вектор пов'язують із вектором стану системи. Таким чином, $|u\rangle$ і $|d\rangle$, $|r\rangle$ і $|l\rangle$ і $|i\rangle$ і $|o\rangle$ є векторами стану двомірному просторі спинових станів. Як щодо σ_x , σ_y і σ_z ? Чи є вони векторами, і якщо так, то якими?

Зрозуміло, що вони є векторами стану; вони є операторами (написаними як матриць), які відповідають трьом вимірним компонентам спина. Фактично, ці 3-векторні оператори є новим типом вектора. Вони відрізняються як від векторів стану, і від звичайних 3-векторів. Однак у зв'язку з тим, що спінові оператори поведуться багато в чому як 3-вектори, то не буде великою помилкою думати про них як про об'єкти, що нагадують 3-вектори, як ми і будемо чинити надалі.

Для вимірювання компонентів спина ми орієнтуємо пристрій А вздовж однієї з трьох осей, а потім запускаємо пристрій та виконуємо вимірювання. Але чому б не зорієнтувати цей пристрій уздовж довільної осі та не виміряти складову σ вздовж цієї осі? Іншими словами, візьміть будь-який одиничний 3-вектор \hat{n} з компонентами n_x , n_y і n_z і орієнтуйте пристрій А з його стрілкою вздовж \hat{n} . Тоді активація приладу А призведе до вимірювання складової σ вздовж осі \hat{n} . Отже, повинен бути оператор, який відповідає цій величині, що вимірюється.

Якщо σ дійсно веде себе як 3-вектор, то його компонента вздовж \hat{n} задається ні чим іншим, як скалярним твором σ і \hat{n} . Позначимо цю компоненту σ як σ_n , так що

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

або у розгорнутому вигляді,

$$\sigma_n = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z. \quad (3.39)$$

Для того, щоб зрозуміти зміст цього рівняння, необхідно мати на увазі, що компоненти \hat{n} це просто числа. Вони власними силами є операторами. Рівняння (3.39) описує вектор-оператор, який будується у вигляді суми трьох доданків, кожне з яких містить числовий коефіцієнт n_x , n_y або n_z . Щоб бути конкретнішим, давайте запишемо рівняння (3.39) у матричній формі:

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

Або ще конкретніше, давайте об'єднаємо всі три доданки в одну матрицю

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} n_z & (n_x - in_y) \\ (n_x + in_y) & -n_z \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

Навіщо ж це знадобиться? Не багато, поки ми не знайдемо власні вектори і власні значення σ . Але як тільки ми це зробимо, ми знатимемо можливі результати вимірювання вздовж напрямку \hat{n} . І ми також зможемо розрахувати ймовірність цих результатів. Іншими словами, ми матимемо повну картину спинових вимірювань у тривимірному просторі.

3.7. Підбиваємо підсумки

Ми тепер цілком озброєні, щоби робити якісь справжні розрахунки. Давайте розглянемо окремий випадок, а саме коли \hat{n} лежить у площині

$x-z$, яка, у свою чергу, є площиною цієї сторінки. Оскільки \hat{n} це одиничний вектор, ми можемо написати

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

де θ це кут між віссю z і віссю \hat{n} . Підставляючи ці висловлювання (3.40), запишемо

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

Вправа 3.3:

1. Обчисліть власні вектори та власні значення оператора σ_n . Підказка: Припустимо, що власний вектор має такий вигляд

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

де α є невідомим параметром, який потрібно визначити. Далі підставимо цей вектор на рівняння на власні значення і вирішимо його. В результаті ми висловимо α через θ . Нагадаємо, що θ є кут нахилу вектора \hat{n} до осі z . Зауважте, що ми записали рішення за допомогою одного невідомого параметра α , оскільки вектор, що шукається, повинен бути нормований, тобто він повинен мати одиничну довжину.

Результати розв'язання вищенаведеного рівняння:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= 1 \\ |\lambda_1\rangle &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

i

$$\begin{aligned}\lambda_2 &= -1 \\ |\lambda_2\rangle &= \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Зверніть увагу на деякі важливі факти. По-перше, два власні значення знову $+1$ і -1 . Це не повинно викликати подиву, оскільки вимірювальний прилад $\text{cal } A$ може дати тільки одну з цих двох відповідей, незалежно від того, яким чином він орієнтований. Але завжди корисно вивести цей факт безпосередньо із рівнянь. Другий факт полягає в тому, що два власні вектори ортогональні.

Тепер ми готові зробити експериментальне передбачення. Нехай вісь приладу A спочатку орієнтована вздовж осі z і нехай ми виконали попередній вимір та приготували спин у стані $|u\rangle$. Потім ми повернемо вісь приладу вздовж осі \hat{n} . Яка ймовірність того, що новий вимір дасть $\sigma_n = +1$? Відповідно до **принципу 4**, а також з використанням рядків і стовпців розкладання $\langle u|$ і $|\lambda_1\rangle$, відповідь є

$$P(+1) = |\langle u|\lambda_1\rangle|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2}. \quad (3.41)$$

Аналогічно, для того ж випадку

$$P(-1) = |\langle u|\lambda_2\rangle|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (3.42)$$

З цим результатом ми пройшли майже повне коло. При введенні спіна, ми зробили заяву, що якщо ми приготуємо велику кількість спинів в ідентичних станах “вгору”, а потім для кожного з них виміряємо складову вздовж осі \hat{n} , тобто під кутом θ до осі z , то середнє значення результатів вимірювань було $\hbar \cos \theta$ - такий самий результат, ми отримали \hbar для простого z -вектора в класичній фізиці. Чи призводить наша математична конструкція (заснована на лінійних операторах) до цього результату? Фактично питання стоїть ще радикальніше. Якщо наша теорія не узгоджується з експериментом, ми маємо викинути таку теорію. Давайте перевіримо, як добре досі наша теорія узгоджується з експериментом.

На жаль, ми будемо не зовсім послідовними, оскільки нам доведеться використовувати рівняння, яке ми пояснимо лише у наступній лекції. А саме ми використовуємо рівняння, яке говорить нам, як обчислити середнє значення (також зване очікуване значення) вимірювання,

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i). \quad (3.43)$$

Варто відзначити, що рівняння (3.43) це просто стандартна формула для середнього значення. Це не є специфічним для квантової механіки.

Для розрахунку середнього значення вимірювання, яке відповідає оператору \mathbf{L} , ми помножимо кожне власне значення на можливість отримати при вимірюванні саме це власне значення, а потім підсумуємо результати. Звичайно, оператор, який ми шукаємо зараз, це просто σ_n і ми вже маємо всі значення, які нам потрібні. Використовуючи формули (3.41) та (3.42) разом із відомими власними значеннями, ми можемо написати

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

або

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

Якщо ви пам'ятаєте тригонометрію, то відразу зрозумійте, що наведене вище рівняння є

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

що добре узгоджується з експериментом. Так, ми це зробили!

Дійшовши так далеко, ви можете спробувати свої сили у вирішенні дещо більш загальної проблеми. Як і раніше, ми починаємо з пристрою \mathcal{A} , вісь якого вказує у напрямку z . Але тепер, як тільки спина була підготовлена в стані "вгору ми можемо повернути вісь \mathcal{A} у довільному напрямку у просторі, а потім виконати другий набір вимірювань. У цьому випадку вектор \hat{n} не лежить у площині $x - z$, тобто $n_y \neq 0$. Тепер спробуйте виконати таку вправу.

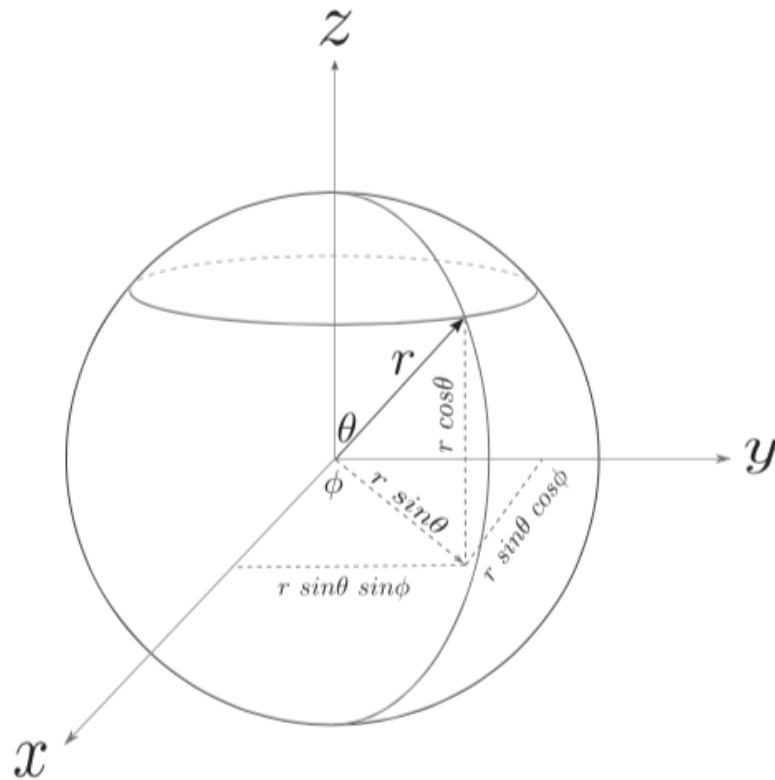
Вправа 3.4:

1. Нехай $n_z = \cos \theta$, $n_x = \sin \theta \cos \phi$, і $n_y = \sin \theta \sin \phi$. Кути θ і ϕ визначаються відповідно до звичайного правила для сферичних координат, дивись Fig. 3.2. Обчислити власні значення та власні вектори для матриці, представлені в рівнянні (3.40).

Можна також спробувати вирішити набагато складніший приклад, що включає два напрямки, \hat{n} і \hat{m} . У цьому прикладі, вісь \mathcal{A} не тільки закінчується в довільному напрямку, але також починається в іншому довільному напрямку.

Вправа 3.5:

1. Припустимо, що спин приготовлений у стані, для якого $\sigma_m = +1$. Вісь вимірювального приладу потім повертається у напрямку вектора \hat{n} і вимірюється проекція спина σ_n . Чому дорівнює ймовірність того, що пристрій покаже $+1$? Зверніть увагу, що $\sigma_m = \sigma \cdot \hat{m}$.



Мал. 3.2. Сферичні координати. Ця діаграма ілюструє звичайні сферичні координати, що позначаються r, θ і ϕ . Діаграма також ілюструє перетворення сферичних координат в декартові координати: $x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$, і $z = r \cos \theta$.

Тут ми використовуємо позначення аналогічні тим, які використовували для σ_n .

Відповіддю буде квадрат косинуса половини кута між векторами \hat{m} і \hat{n} . Ви можете отримати це?

3.8. Принцип спінової поляризації

Існує важлива теорема, яку можна спробувати довести. Я сформулюю її:

Принцип спінової поляризації: *Будь-який стан одиничного спіна є власним вектором деякої компоненти спіна.*

Іншими словами, для довільно заданого стану

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

існує деякий напрямок \hat{n} , таке, що

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

Це означає, що для будь-якого спінового стану є певна орієнтація пристрою \mathcal{A} , таке, що \mathcal{A} завжди реєструватиме $+1$. На мові фізики, ми говоримо, що стани спіна характеризуються *вектором поляризації*, і вздовж цього вектора поляризації компонента спіна передбачувано є $+1$ (тобто результат вимірювання завжди є $+1$), якщо, звичайно, вам відомий відповідний вектор стану.

Цікавим наслідком цієї теореми є те, що немає жодного стану, для якого *очікувані значення* всіх трьох компонентів спіна дорівнюють нулю. Існує кількісний спосіб висловити цей факт. Розглянемо очікуване значення спіна вздовж напрямку \hat{n} . Оскільки $|A\rangle$ є власним вектором оператора $\vec{\sigma} \cdot \vec{n}$ (з власним значенням $+1$), то звідси випливає, що очікуване значення може бути виражене як

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

З іншого боку, очікуване значення перпендикулярних компонент σ рівні нулю може $|A\rangle$. Звідси випливає, що сума квадратів середніх значень всіх трьох складових σ дорівнює 1. Понад те, це твердження залишається вірним й у довільного стану:

$$\langle \sigma_x \rangle^2 + \langle \sigma_y \rangle^2 + \langle \sigma_z \rangle^2 = 1. \quad (3.44)$$

Запам'ятайте цей факт. Ми ще повернемося до нього в Лекції 6.

4. Еволюція системи в часі

There is a massive, quiet, intimidating man sitting alone at the end of the bar. His T-shirt says “-1”.

Art: Who is that “Minus One” guy over in the corner? The bouncer?

Lenny: He’s way more than a bouncer. He’s

THE LAW.

Without him, this whole place would fall apart.

4.1. Класична фізика

Потрібно трохи більше сторінки, щоб пояснити, що таке стан у класичній механіці. Квантова версія зайняла вже три лекції, знадобилося три математичні відступи, і за моїми приблизними підрахунками, близько 17 000 слів, щоб дістатися до того ж місця. Але я думаю, що найгірше вже позаду. Тепер ми знаємо, що таке становище. Тим не менш, так само, як і в класичній фізиці, знання стану системи є лише підлогою справи. Інша половина включає правило про те, як стан змінюється з часом. Зрозуміти це є нашим наступним завданням.

Для початку, давайте розглянемо, як відбувається зміна стану в класичній фізиці. У класичній фізиці простір станів є *математичне безліч*. Логіка є Булевою і еволюція станів з часом є детермінованою та оборотною. Найпростішим прикладом класичної системи є монета. Для неї простір станів складається з декількох точок: "орла" і "решки". Трохи складнішою класичною системою є кубик, або гральна кістка. Для кістки простором станів є безліч із шести елементів $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Стан кубика можуть бути зображені у вигляді набору точок на сторінці, а еволюція в часі визначається правилом, яке говорить нам, куди йти далі. Закон руху складався з графа зі стрілками, що з’єднують стани. Головне правило - детермінізм - у тому, що хоч би система була у просторі станів, наступне стан повністю

визначається законом руху. Але було й інше правило, зване оборотністю. Оборотність є вимогою, згідно з якою допустимим законом руху є такий закон, при якому можна цілком визначено сказати, де система була востаннє. Хороший закон відображається графом з лише однією стрілкою, яка спрямована до даного вузла (така стрілка показує звідки система прийшла) і лише однією стрілкою, яка спрямована від даного вузла (така стрілка показує куди система піде).

Існує ще один спосіб для опису цих вимог. Я назвав це *мінус перший закон*, тому що він лежить в основі всього іншого. Він каже що

інформація ніколи не втрачається.

Тож якщо дві однакові ізольовані системи спочатку перебувають у різних станах, всі вони й надалі залишатимуться у різних станах. Крім того, у минулому вони також були у різних станах. З іншого боку, якщо дві однакові системи перебувають у тому самому стані, в якийсь момент часу, то їх історії та їх майбутніх еволюцій також мають бути однаковими. Відмінності зберігаються. Квантова версія мінус першого закону має ім'я - *унітарність*.

4.2. Унітарність

Розглянемо замкнуту систему, яка в момент часу t знаходиться у квантовому стані $|\Psi\rangle$. (Використання грецької літери Ψ [пси] для квантових станів є традиційним під час розгляду еволюції систем.) Для того, щоб вказати, що стан $|\Psi\rangle$ був у певний момент часу t , давайте трохи ускладнимо позначення і назвемо стан $|\Psi(t)\rangle$. Звичайно, це позначення передбачає трохи більше, ніж просто стан був $|\Psi\rangle$ в момент часу t . Це також передбачає, що стан може бути різним у різний час. Таким чином, ми використовуємо позначення $|\Psi(t)\rangle$ для представлення всієї історії системи.

Основне динамічне припущення квантової механіки полягає в тому, що, якщо ви знаєте, стан одночасно, то квантові рівняння руху скажуть

вам, який стан пізніше. Не обмежуючи спільності, ми можемо взяти початковий час рівним нулю, і позначимо пізніше як t . Стан у момент часу t задається певною операцією, ми позначимо її $\mathbf{U}(t)$, яка діє стан у початковий (нульовий) момент часу. Без подальшого уточнення властивостей $\mathbf{U}(t)$ це говорить нам дуже мало, за винятком того, що $|\Psi(t)\rangle$ визначається через $|\Psi(0)\rangle$. Виразимо це співвідношення за допомогою наступного рівняння,

$$|\Psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t) |\Psi(0)\rangle. \quad (4.45)$$

Оператор \mathbf{U} називається *оператором еволюції* системи. Цей оператор визначає те, як стан системи змінюється (еволюціонує) у часі.

4.3. Детермінізм у квантовій механіці

На даний момент нам потрібно зробити деякі уточнення. З нашим визначенням $\mathbf{U}(t)$ вектор стану розвивається детермінованим чином. Так, ви не дочули - еволюція в часі вектора стану є детермінованою. Це добре, тому що це дає нам щось, що ми можемо спробувати передбачити. Але як це співвідноситься зі статистичним характером результатів наших вимірів?

Як ми бачили, знання квантового стану значить, що ви можете передбачити результат експерименту з достовірністю. Наприклад, знання того, що стан спина є $|r\rangle$ може сказати вам результат виміру σ_x , але нічого не говорить вам про вимір σ_z або σ_y . З цієї причини рівняння (4.45) не тотожне класичному детермінізму. Класичний детермінізм дає змогу прогнозувати результати експериментів. Квантова еволюція станів дозволяє обчислити ймовірність результатів пізніших експериментів.

Це одна з основних відмінностей між класичною та квантовою механікою. Воно перегукується між станом і виміром, які ми згадували на початку цієї книги. У класичній механіці немає істотної різниці між станами і вимірами. У квантовій механіці різниця суттєва.

4.4. Оператор еволюції $U(t)$

Звичайна квантова механіка пред'являє кілька вимог $\mathbf{U}(t)$.

По-перше, вона вимагає, щоб $\mathbf{U}(t)$ був *лінійним оператором*.

Це не дуже дивно. Відносини між станами квантової механіки завжди лінійно. Це узгоджується з ідеєю у тому, що простір станів є векторним простором. Але лінійність не єдине, що квантова механіка вимагає $\mathbf{U}(t)$.

Вона також вимагає квантовий аналог мінус першого закону: збереження відмінностей.

Нагадаємо, з останньої лекції, що два стани помітні, якщо вони ортогональні. Будучи ортогональними, два різних базисних векторів представляють два помітні стани. Припустимо, що $|\Psi(0)\rangle$ і $|\Phi(0)\rangle$ є два помітні стани. Іншими словами, існує експеримент, який може розрізнити їм один від одного, і тому вони повинні бути ортогональні:

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

Збереження відмінностей вимагає, щоб вони залишалися ортогональними і надалі. Це може бути записано як

$$\langle \Psi(t) | \Phi(t) \rangle = 0 \tag{4.46}$$

для всіх значень $t > 0$. Цей принцип тягне за собою певні наслідки для оператора тимчасової еволюції $\mathbf{U}(t)$. Для того, щоб побачити їх, давайте перейдемо в рівняння (4.45) від кет-векторів до аналогів бра-векторам:

$$\langle \Psi(t) | = \langle \Psi(0) | \mathbf{U}^\dagger(t). \tag{4.47}$$

Зверніть увагу на хрест, який означає операцію ермітового сполучення. Далі підставимо вирази (4.45) і (4.47) у вираз (4.46):

$$\langle \Psi(0) | \mathbf{U}^\dagger(t) \mathbf{U}(t) | \Phi(0) \rangle = 0. \tag{4.48}$$

Щоб вивчити наслідки, які з цього рівняння, розглянемо ортонормований базис векторів $|i\rangle$. Будь-який базис підійде. Ортонормованість виражається у вигляді наступного рівняння

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

де δ_{ik} є символ Кронекера.

Далі, давайте виберемо серед цього базису два вектори $|\Phi(0)\rangle$ і $|\Psi(0)\rangle$. Відповідна підстановка рівняння (4.48) дає

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

для будь-яких не збігаються i та j . З іншого боку, якщо i і j однакові, то і результуючі вектори $\mathbf{U}(t)|i\rangle$ і $\mathbf{U}(t)|j\rangle$ також будуть однаковими. У цьому випадку скалярний добуток цих векторів має бути рівним одиниці. Таким чином, загальне співвідношення має вигляд

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

Іншими словами, оператор $\mathbf{U}^\dagger(t)\mathbf{U}(t)$ веде себе як одиничний оператор I , коли він діє між двома будь-якими базовими векторами. Звідси не важко довести, що $\mathbf{U}^\dagger(t)\mathbf{U}(t)$ завжди діє як одиничний оператор I , тобто коли він діє будь-який стан. Оператор \mathbf{U} , який відповідає наступному рівнянню,

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

називається *унітарний* оператор. Що фізичною мовою означає, що еволюція у часі унітарна.

Унітарні оператори грають величезну роль квантової механіці. Вони представляють всі види перетворень у просторі станів. Тимчасова еволюція це лише один приклад. Ми завершимо цей розділ п'ятим принципом квантової механіки:

- **Принцип 5:** Еволюція вектора стану у часі є унітарною.

Вправа 4.1:

- Доведіть, що, якщо оператор $U(t)$ унітарний і якщо стан $|A\rangle$ і $|B\rangle$ будь-які два вектори стану, то скалярний твір $U|A\rangle$ і $U|B\rangle$ збігається зі скалярним твором $|A\rangle$ і $|B\rangle$. Цю властивість можна назвати *збереженням перекриття*. Воно виражає те що, що ставлення між станами зберігається з часом.

4.5. Гамільтоніан

У класичній механіці є ідея поступової зміни в часі. Квантова механіка нічим не відрізняється щодо цього: ми можемо розглянути кінцеві інтервали часу шляхом об'єднання багатьох нескінченно малих інтервалів. Це призведе до диференціального рівняння для розвитку векторів станів. Для цього ми замінимо інтервал часу t нескінченно малим часовим інтервалом ϵ і розглянемо оператор еволюції у часі цього невеликого інтервалу.

Є два принципи, які нам знадобляться. Перший принцип – це унітарність:

$$\mathbf{U}^\dagger(\epsilon)\mathbf{U}(\epsilon) = I. \quad (4.49)$$

Другий принцип – це безперервність. Це означає, що вектор стану плавно змінюється. Щоб прояснити, що мають на увазі, спочатку розглянемо випадок, коли ϵ дорівнює нулю. Очевидно, що в цьому випадку оператор тимчасової еволюції зводиться до одиничного оператора I . Безперервність означає, якщо ϵ дуже мало, то оператор $\mathbf{U}(\epsilon)$ близький до одиничного оператора, відрізняючись від нього на величину порядку ϵ . Таким чином ми можемо записати

$$\mathbf{U}(\epsilon) = I - i\epsilon\mathbf{H}. \quad (4.50)$$

Ви можете запитати, чому я ставлю знак мінус і уявну одиницю i перед \mathbf{H} . Ці множники абсолютно довільні на цьому етапі. Іншими словами, використання їх є угодою, яка не має жодного змісту (на даному етапі). Я використав їх оскільки знаю, що це необхідно, для того, щоб оператор \mathbf{H} можна було порівняти з аналогом із класичної фізики. Такий вибір стане більш зрозумілим пізніше.

Нам також знадобиться вираз \mathbf{U}^\dagger . Згадуючи, що ермітове сполучення вимагає комплексного сполучення коефіцієнтів, ми бачимо, що

$$\mathbf{U}^\dagger(\epsilon) = I + i\epsilon\mathbf{H}^\dagger. \quad (4.51)$$

Далі ви підставимо вирази (4.50) та (4.51) за умови унітарності (4.49)

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

Розкладаючи до членів першого порядку по ϵ , знаходимо

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

або у більш ясній формі,

$$\mathbf{H}^\dagger = \mathbf{H}. \quad (4.52)$$

Останнє рівняння отримано за умови унітарності. Тому можна сказати, що воно (це рівняння) виражає умову унітарності, але не в термінах оператора еволюції \mathbf{U} , а в термінах іншого оператора, а саме оператора \mathbf{H} .

Рівняння (4.52) також говорить, що \mathbf{H} є ермітовим оператором. Це має велике значення. Тепер ми можемо сказати, що \mathbf{H} відповідає спостереженню і має повний набір ортонормованих власних векторів та власних значень. У міру просування \mathbf{H} стане дуже знайомим об'єктом, а саме *квантовим гамільтоніаном*. Його власні значення є значеннями, що є результатом виміру енергії квантової системи. Чому саме ми ототожнюємо \mathbf{H} з класичним поняттям гамільтоніану, а його власні значення з енергією стане ясно найближчим часом.

Повернемося тепер до рівняння (4.45) і використовуємо його у разі інфінітезимального часу (тобто нескінченно малого) $t = \epsilon$. Використовуючи рівняння (4.50) знаходимо,

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

Це такий вид рівняння, який легко можемо перетворити на диференціальне рівняння. По-перше, ми перенесемо перший доданок у правій частині на ліву сторону, а потім розділимо на *epsilon*:

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

Якщо ви пам'ятаєте математичний аналіз, то ви побачите, що ліва частина цього рівняння виглядає так само, як визначення похідної. Якщо ми перейдемо до межі при $\epsilon \rightarrow 0$, то ліворуч отримаємо похідну за часом від вектора станів:

$$\frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = -i\mathbf{H}|\Psi\rangle. \quad (4.53)$$

Ми вибрали початковий момент часу рівним нулю. Однак це не є принциповим. Якби ми вибрали інший початковий час і проробили ту саму процедуру, то ми отримали б такий самий результат, а саме, рівняння (4.53). Це рівняння говорить нам, як змінюється вектор стану: якщо ми знаємо вектор стану в одну мить, то рівняння (4.53) говорить нам, яким він буде

наступної миті. Рівняння (4.53) є досить важливим тому має спеціальну назву. Вона називається *узагальненим рівнянням Шредінгера*, або, що використовується більш часто, *залежним від часу рівнянням Шредінгера*. Якщо ми знаємо гамільтоніан, це рівняння свідчить про те, як стан незбудованої системи розвивається з часом.

4.6. Що сталося з постійною Планка?

Я впевнений, що ви всі чули про постійну Планку. Сам Планк позначив її h і визначив її значення як $6.6 \times 10^{-34} \text{kg m}^2/\text{s}$. Пізніше її перевизначили, розділивши на 2π і назвали результат \hbar :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054571726 \dots \times 10^{-34} \frac{\text{kg m}^2}{\text{s}}.$$

Чому ділимо на 2π ? Тому що це позбавляє нас необхідності писати 2π в багатьох інших місцях. Враховуючи важливість постійної Планки в квантовій механіці, здається трохи дивним, що вона ще не з'явилася у наших розрахунках. Ми збираємося виправити це зараз.

У квантовій механіці, як і в класичній фізиці, гамільтоніан є математичним об'єктом, який є енергією системи. У зв'язку з цим виникає питання, якщо ви дуже пильні, який може бути джерелом плутанини. Вдивіться у формулу (4.53). Вона безглузда з точки зору розмірності фізичних величин. Якщо проігнорувати $|\Psi\rangle$ по обидва боки рівняння, то ліва сторона має розмірність зворотного часу. Якщо квантовий гамільтоніан справді ототожнюється з енергією, то права сторона має розмірність енергії. Енергія вимірюється в джоулях, або $\text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2$. Очевидно, що формула написана не зовсім правильно. Рішення полягає у використанні постійної Планки \hbar , світової константи, яка має розмірність $\text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}$. Константа з такою розмірністю саме те, що нам потрібно для того, щоб узгодити розмірність правої та лівої частин у рівнянні (4.53). Давайте перепишемо це рівняння у правильній формі, тобто з постійною Планкою на своєму місці:

$$\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = -i\mathbf{H} |\Psi\rangle. \quad (4.54)$$

Чому так виходить, що така важлива константа, як постійна Планка, має таке сміховинно мале значення? Відповідь це питання має набагато більше спільного з біологією, ніж із фізикою. Реальне питання не чому \hbar настільки мала, а чому ви такі великі. Одиниці, які ми використовуємо, відображають наш розмір. Походження метра є пов'язаним з необхідністю вимірювання мотузки або тканини: йдеться про відстань від носа людини до її витягнутих пальців. Секунда приблизно дорівнює періоду серцебиття у людини. А кілограм є гарною вагою, щоб носити із собою. Ми використовуємо ці одиниці, тому що вони зручні, але фундаментальну фізику це не хвилює. Розмір атома становить близько 10^{-10} метрів. Чому так мало? Це неправильне питання. Правильно спитати: Чому так багато атомів уміщається на довжині руки? Причина полягає в тому, що для того, щоб створити розумну істоту, яка власне і здатна визначити одиниці виміру, необхідно зібрати дуже багато атомів. Аналогічним чином, кілограм у багато разів більший, ніж атомна маса, тому що люди не носять із собою поодинокі атоми; їх було дуже легко втратити. Те саме стосується і часу з нашою такою довгою секундою. Зрештою, причина того, що стала Планка настільки мала, полягає в тому, що ми настільки великі, важкі і повільні.

Фізики, зацікавлені у мікроскопічному світі, схильні використовувати одиниці, які пристосовані до явищ, що вони вивчають. Якби ми використовували атомні довжини шкали, тимчасові масштаби та атомні масштаби маси, то постійна Планка була б таким громіздким числом; вона була набагато ближче до одиниці. Фактично, одиниці виміру, для яких постійна Планка дорівнює одиниці, є природним вибором для квантової механіки та звичайної такої одиниці і використовують. Тим не менш, у цій книзі, ми будемо зберігати \hbar у наших рівняннях.

4.7. Очікувані значення

Давайте зробимо невелику перерву, щоб обговорити важливий аспект статистики, а саме ідею усередненого або просто середнього значення. Ми вже згадували цю ідею коротко в попередній лекції, але тепер настав час, щоб придивитися до неї уважніше.

У квантової механіки усереднені значення називаються очікуваними значеннями. (У певному сенсі, це поганий вибір слів, я скажу вам пізніше чому.) Припустимо, що ми маємо функцію розподілу для результату експерименту, який вимірює \mathbf{L} . Результатом вимірювання має бути одне зі своїх значень λ_i оператор \mathbf{L} . При цьому, функція розподілу визначена для цих значень λ_i , що можна позначити як $P(\lambda_i)$. У статистиці, усереднене значення (або середнє) позначається межею над вимірюваною величиною. Середнє значення \mathbf{L} буде позначатися $\bar{\mathbf{L}}$. У квантовій механіці стандартне позначення відрізняється. Воно ґрунтується на бра-кет позначеннях Поля Дірака. Представимо квантово-механічну середню величину \mathbf{L} як $\langle \mathbf{L} \rangle$. Ми скоро побачимо, чому бра-кет позначення настільки природні, але спочатку обговоримо значення терміна *усереднене*.

З математичної точки зору, усереднене визначається наступним рівнянням

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i). \quad (4.55)$$

Іншими словами, воно є виваженою сумою, виваженою з функцією розподілу P .

З іншого боку, усереднене можна визначити експериментально. Припустимо, що виконано дуже багато ідентичних експериментів та їх результати записані. Можна визначити функцію розподілу безпосередньо з цих результатів. Ми ототожнимо $P(\lambda_i)$ з тією частиною (кількістю) спостережень, чий результат був λ_i . Визначення (4.55) потім ототожнюється з експериментальним усереднення результатів спостережень. Основна гіпотеза будь-якої статистичної теорії полягає в тому, що якщо кількість випробувань досить велика, то математичні та експериментальні поняття ймовірності та середнього узгоджуються. Ми не заперечуватимемо цієї гіпотези.

Тепер я доведу елегантну невелику теорему, що пояснює бракет позначення для середніх. Припустимо, що нормований стан квантової системи є $|A\rangle$. Розкладемо $|A\rangle$ за ортонормованим базисом власних векторів оператора \mathbf{L} :

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |\lambda_i\rangle. \quad (4.56)$$

Давайте просто так, без особливих обґрунтувань обчислимо $\langle A | \mathbf{L} | A \rangle$. Сенс цієї операції цілком зрозумілий: Спочатку подіє оператором \mathbf{L} на $|A\rangle$. Потім, обчислимо скалярний добуток результату та бра вектора $\langle A |$. Давайте зробимо перший крок і дозволимо оператору \mathbf{L} вплинути на обидві сторони рівняння (4.56):

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

Пам'ятайте, що вектори λ_i є власними векторами оператора \mathbf{L} . Використовуючи той факт, що $\mathbf{L} |\lambda_i\rangle = \lambda_i |\lambda_i\rangle$, ми можемо написати

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

Останнім кроком є обчислення скалярного твору $\langle A |$. Для того, щоб обчислити такий скалярний твір, ми насамперед розкладемо $\langle A |$ за власними векторами оператора \mathbf{L} . Потім скористаємося ортонормованістю базису та отримаємо,

$$\langle A | \mathbf{L} | A \rangle = \sum_i (\alpha_i^* \alpha_i) \lambda_i. \quad (4.57)$$

Використовуючи принцип ймовірності (**принцип 4**) для того, щоб ототожнити $(\alpha_i^* \alpha_i)$ з ймовірністю $P(\lambda_i)$, ми відразу бачимо, що вирази у правій частині рівняння (4.57) збігаються з виразом у правій частині рівняння (4.55). Тобто,

$$\langle L \rangle = \langle A | \mathbf{L} | A \rangle. \quad (4.58)$$

Таким чином, ми маємо швидке правило для обчислення середніх значень. Просто помістіть оператор спостережуваної між бра і кет уявленнями вектора стану. Вийде своєрідний бутерброд.

У попередній лекції (розділ 3.5), ми обіцяли пояснити, як дія ермітового оператора на вектор стану пов'язана з результатами фізичних вимірювань. Збройні знанням середніх значень тепер ми можемо виконати цю обіцянку. Якщо ми озирнемося на рівняння (3.38), то ми побачимо приклад оператора σ_z , що діє на вектор стану $|r\rangle$ і створює новий стан. Ми можемо розглядати це рівняння як першу половину обчислень очікуваного значення при вимірі σ_z - права сторона бутерброду, якщо хочете. Інша частина цих обчислень передбачає визначення скалярного твору отриманого вектора стану та дуального вектора $\langle r|$. Таким чином, коли σ_z діє на $|r\rangle$ у рівнянні (3.38), то вона створює вектор станів, за допомогою якого ми можемо обчислити ймовірність кожного результату вимірювання σ_z .

4.8. Ігнорування фазового множника

У попередніх лекціях ми говорили, що ми можемо ігнорувати загальний фазовий множник вектора стану, і я пообіцяв пояснити наступний розділ, чому це можна робити. Маючи під руками правило для середніх, ми трохи відхилилися убік, щоб стримати цю обіцянку.

Що означає "ігнорувати загальний фазовий фактор"? Це означає, що ми можемо помножити будь-який вектор стану на постійний множник $e^{i\theta}$, де θ є дійсним числом. При цьому фізичний сенс вектора стану не зміниться. Щоб переконатися в цьому, помножимо рівняння (4.56) на $e^{i\theta}$ і назвемо результат $|B\rangle$:

$$|B\rangle = e^{i\theta} |A\rangle = e^{i\theta} \sum_j \alpha_j |\lambda_j\rangle. \quad (4.59)$$

Зверніть увагу, що ми змінили індекс підсумовування i на j , щоб уникнути плутанини. Легко бачити, що $|B\rangle$ має таку саму величину, як і $|A\rangle$, оскільки абсолютна величина множника $e^{i\theta}$ дорівнює одиниці:

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

Той самий принцип знищення фазового множника зберігається і для вимірюваних величин. Наприклад, хоча амплітуди ймовірності α_j різних результатів вимірювання $|A\rangle$ стають $e^{i\theta}\alpha_j$ для $|B\rangle$, але власне ймовірність різних результатів (яка визначається як квадрат модуля амплітуди), - яка тільки і може бути виміряна, - не змінюється. Справді, якщо система перебуває у стані $|B\rangle$, і ми проводимо вимір, то результат буде власним значенням λ_j з ймовірністю

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

що повністю збігається з результатом, який ми отримуємо б для стану $|A\rangle$. І, нарешті, давайте використовуємо цей прийом і перевіримо чи зміниться середнє значення ермітового оператора \mathbf{L} . Застосовуючи рівняння (4.58) до стану $|B\rangle$, ми запишемо

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

Використовуючи рівняння (4.59) для $|B\rangle$, отримаємо

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

або

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

Іншими словами, \mathbf{L} має однакове очікуване значення як у стані $|A\rangle$ так і в стані $|B\rangle$.

4.9. Зв'язок із класичною механікою

Середнє чи очікуване значення спостерігається в квантовій механіці найближче до класичного значення. Якщо розподіл ймовірностей для спостережуваної задається дзвоноподібною кривою, яка не надто широка, то величина математичного очікування дійсно це значення, яке ви очікуєте виміряти. Якщо система є настільки великою і важкою, що квантова механіка виявляється не надто важливою, то середнє значення веде себе майже точно відповідно до класичних рівнянь руху. Тому цікаво і важливо з'ясувати, як середні значення змінюються з часом.

Насамперед, чому вони змінюються з часом? Вони змінюються з часом, оскільки стан системи змінюється з часом. Припустимо, що стан у момент часу t представлений кет-вектором $|\Psi(t)\rangle$ і бра-вектором $\langle\Psi(t)|$. Середнє значення \mathbf{L} в момент часу t є

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

Давайте подивимося, як ця величина змінюється в часі. Для цього продиференціюємо її по t і використовуємо рівняння Шредінгера для похідних часу від $|\Psi(t)\rangle$ і $\langle\Psi(t)|$. Використовуючи правило для похідної праці, ми бачимо, що

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

де, як завжди, точка над символом позначає похідну за часом. Сам оператор \mathbf{L} не має певної залежності від часу, тому він залишається без зміни. Тепер, використовуючи бра кет версії рівняння Шредінгера, (4.54), отримуємо

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

або у більш короткій формі,

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \mathbf{L} | \Psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | \mathbf{H}\mathbf{L} - \mathbf{L}\mathbf{H} | \Psi(t) \rangle. \quad (4.60)$$

Якщо ви звикли до звичайної алгебри, то рівняння (4.60) здасться дивним. Права частина містить комбінацію $\mathbf{H}\mathbf{L} - \mathbf{L}\mathbf{H}$, комбінацію, яка зазвичай дорівнює нулю. Але лінійні оператори є звичайними числами: коли вони множаться (або застосовуються послідовно), порядок виявляється важливим. У загальному випадку, коли \mathbf{H} діє на $\mathbf{L} | \Psi(t) \rangle$, то результат відрізняється від того, коли \mathbf{L} діє на $\mathbf{H} | \Psi(t) \rangle$. Інакше кажучи, крім спеціальних випадків, $\mathbf{H}\mathbf{L} \neq \mathbf{L}\mathbf{H}$. Для будь-яких двох операторів чи матриць, комбінація

$$\mathbf{L}\mathbf{M} - \mathbf{M}\mathbf{L}$$

називається *комутатором* \mathbf{L} і \mathbf{M} і позначається спеціальним символом

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

Варто зауважити, що $[\mathbf{L}, \mathbf{M}] = -[\mathbf{M}, \mathbf{L}]$ для будь-якої пари операторів. Озброєні позначенням комутатора, тепер ми можемо написати рівняння (4.60) у простій формі:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{L} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{H}, \mathbf{L}] \rangle \quad (4.61)$$

або в іншому еквівалентному записі,

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{L} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{L}, \mathbf{H}] \rangle. \quad (4.62)$$

Це дуже цікаве та важливе рівняння. Воно пов'язує похідну за часом від середнього значення \mathbf{L} і очікувану величину для іншої спостережуваної, а саме $-\frac{i}{\hbar} [\mathbf{L}, \mathbf{H}]$.

Вправа 4.2:

- Доведіть, що, якщо оператори \mathbf{M} і \mathbf{L} обидва ермітові, то комутатор (помножений на уявну одиницю i), а саме $i[\mathbf{M}, \mathbf{L}]$ також є ермітовим. Підкреслимо, що наявність i тут є суттєвою. Комутатор сам собою не є ермітовим.

Якщо ми припустимо, що розподіл ймовірностей описується вузькими, дзвоновими кривими (що, однак, не завжди дотримується), то рівняння (4.62) говорить нам як саме піки кривих рухаються з часом. Рівняння, подібні до цього, найближче в квантовій механіці до рівнянь класичної фізики. Іноді ми навіть опускаємо кутові дужки у таких рівнянь та записуємо їх у скороченому вигляді:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{L}, \mathbf{H}]. \quad (4.63)$$

Але майте на увазі, що квантове рівняння такого типу повинне бути в середині бутерброду, з бра $\langle \Psi |$ з одного боку і кет $|\Psi(t)\rangle$ з іншого боку. Як альтернатива, ми можемо розглядати таке рівняння як рівняння, яке говорить нам про те, як рухаються центри розподілу ймовірностей.

Чи знайоме вам рівняння (4.63)? Якщо ні, зверніться до курсу класичної механіки, де можна дізнатися про формулювання класичної механіки в термінах дужок Пуассона. Там можна знайти наступне рівняння:

$$\dot{F} = \{F, H\}. \quad (4.64)$$

У цьому рівнянні $\{F, H\}$ не є комутатором; це дужки Пуассона. Але все-таки, рівняння (4.64) дуже схоже на рівняння (4.63). Насправді існує тісна паралель між комутаторами і дужками Пуассона, і їх алгебраїчні

властивості дуже схожі. Наприклад, якщо F і G є операторами, то як комутатори так і дужки Пуассона змінюють знак, коли F і G поміняти місцями. Дірак виявив це, і усвідомив, що це важливий структурний зв'язок між математикою класичної механіки і математикою квантової механіки. Формальна відповідність між комутаторами та дужками Пуассона є такою:

$$[\mathbf{F}, \mathbf{G}] \iff i\hbar \{F, G\}. \quad (4.65)$$

Для полегшення порівняння з рівнянням (4.63) ми можемо підставити символи \mathbf{L} і \mathbf{H} , які ми використовуємо у цьому розділі.

$$[\mathbf{L}, \mathbf{H}] \iff i\hbar \{L, H\}. \quad (4.66)$$

Давайте спробуємо зробити це ототожнення якомога чіткішими. Якщо ми почнемо з рівняння (4.63),

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

а потім використовуємо відповідність, представлену в (4.66), і запишемо відповідний йому класичний аналог, то результат буде таким:

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

або

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

що точно нагадує (4.64).

Вправа 4.3:

- Згадайте (або подивіться) визначення дужок Пуассона в будь-якому підручнику з класичної механіки та перевірте, що ототожнення, зроблене в рівнянні (4.65), не суперечливе з погляду розмірності фізичних величин. Покажіть, що без множника \hbar це було б не так.

Рівняння (4.65) вирішує поставлене завдання. У класичній фізиці немає ніякої різниці між FG і GF . Іншими словами: класичні, комутатори між звичайними спостерігаються рівні нулю. З рівняння (4.65) бачимо, що комутатори в квантовій механіці не рівні нулю, але вони дуже малі. Класична межа (межа, при якій класична механіка є точною) також є межею, при якій \hbar мізерно мала. Таким чином, це також межа, при якій комутатори дуже малі в "людських" одиницях.

4.10. Збереження енергії

Як ми можемо сказати про те, чи зберігається щось у квантовій механіці? Що ми маємо на увазі, кажучи, що спостерігається - назовемо її Q - зберігається? Як мінімум, ми маємо на увазі, що її очікуване значення $\langle Q \rangle$ не змінюється з часом (якщо, звичайно, система не обурюється). Ще більша умова, що $\langle Q^2 \rangle$ (або середнє значення будь-якого ступеня Q) не змінюється з часом.

Дивлячись на рівняння (4.63) ми можемо бачити, що умова сталості $\langle Q \rangle$ це така умова:

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

Іншими словами, якщо оператор цієї величини комутує з гамільтоніаном, то її математичне очікування зберігається. Ми можемо зробити це твердження сильнішим. Використовуючи властивості комутаторів, легко бачити,

що якщо $[\mathbf{H}, \mathbf{Q}] = 0$, то $[\mathbf{Q}^2, \mathbf{H}] = 0$, або навіть у більш загальному плані, $[\mathbf{Q}^n, \mathbf{H}] = 0$ для будь-якого n . Виявляється, ми можемо зробити сильніше твердження: якщо \mathbf{Q} комутує з гамільтоніаном, то середні значення всіх функцій \mathbf{Q} зберігаються. У цьому полягає поняття збереження у квантовій механіці.

Найбільш очевидною величиною, що зберігається, є сам гамільтоніан. Оскільки будь-який оператор комутує сам із собою, то можна написати

$$[\mathbf{H}, \mathbf{H}] = 0,$$

що саме є умовою того, що \mathbf{H} зберігається. Як і класичної механіки, гамільтоніан є синонімом енергії системи, це визначення енергії. Ми бачимо, що за дуже загальних умов, енергія зберігається в квантовій механіці.

4.11. Спін у магнітному полі

Спробуємо сформулювати гамільтонові рівняння руху для одиничного спина. Спочатку нам потрібний гамільтоніан. Звідки ми можемо отримати його? Загалом, відповідь така сама, як і в класичній фізиці: вивести його з експерименту, брати його з якоїсь теорії, що нам подобається, або просто вибрати якусь і подивитися, що вдасться. Але у випадку одного спина, у нас немає особливого вибору. Давайте почнемо з одиничного оператора I і виберемо його як гамільтоніан. Оскільки I комутує з усіма операторами, то нічого не зміниться з часом. Пам'ятайте, що тимчасова залежність спостережуваної дається комутатором спостережуваної з гамільтоніаном.

Єдиним іншим вибором є сума спінових компонентів. Насправді це саме те, що ми отримали б з експерименту зі спостереження поведінки реального спина, скажімо спина електрон, в магнітному полі. Магнітне поле \vec{B} являє собою 3-вектор - звичайний вектор у просторі - і воно задається трьома декартовими компонентами, B_x , B_y і B_z . Коли класичний спин (заряджений ротор) міститься в магнітне поле, він має енергію, яка залежить від його орієнтації. Енергія пропорційна скалярному твору спина та магнітного поля. Квантовий варіант цього

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

де символ \sim означає "пропорційний". Пам'ятайте, що σ_x , σ_y і σ_z представляють компоненти оператора спина в квантовій версії, наведеній вище.

Давайте розглянемо простий приклад, у якому магнітне поле лежить вздовж осі z . І тут гамільтоніан пропорційний σ_z . Для зручності, ми зберемо всі числові константи, у тому числі величину поля (але не \hbar) в єдину константу *omega* і запишемо

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z. \quad (4.67)$$

Причина, через яку з'являється 2 у знаменнику стане ясна найближчим часом.

Наша мета полягає в тому, щоб з'ясувати, як середнє значення спина змінюється з часом, іншими словами, нам необхідно визначити $\langle\sigma_x\rangle$, $\langle\sigma_y\rangle$ і $\langle\sigma_z\rangle$. Щоб зробити це, ми просто повернемося до рівняння (4.63) і підставимо замість \mathbf{L} оператор спина. Тоді ми отримаємо,

$$\begin{aligned} \langle\dot{\sigma}_x\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \langle[\sigma_x, \mathbf{H}]\rangle \\ \langle\dot{\sigma}_y\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \langle[\sigma_y, \mathbf{H}]\rangle \\ \langle\dot{\sigma}_z\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \langle[\sigma_z, \mathbf{H}]\rangle. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Підставляючи $\mathbf{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z$ з (4.67), отримаємо

$$\begin{aligned} \langle\dot{\sigma}_x\rangle &= \frac{-i\omega}{2} \langle[\sigma_x, \sigma_z]\rangle \\ \langle\dot{\sigma}_y\rangle &= \frac{-i\omega}{2} \langle[\sigma_y, \sigma_z]\rangle \\ \langle\dot{\sigma}_z\rangle &= \frac{-i\omega}{2} \langle[\sigma_z, \sigma_z]\rangle. \end{aligned} \quad (4.69)$$

Величини у лівій стороні рівнянь мають бути дійсними числами. Уявна одиниця i у цих рівняннях видається проблемою. На щастя, це не так. Оскільки комутаційні співвідношення між σ_x , σ_y і σ_z самі є уявними і цим рятують дійсно значущість висловів, що розглядаються. Справді, підставляючи вирази для матриць Паулі з рівняння (3.37), легко перевірити, що

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= 2i\sigma_z \\ [\sigma_y, \sigma_z] &= 2i\sigma_x \\ [\sigma_z, \sigma_x] &= 2i\sigma_y. \end{aligned} \tag{4.70}$$

Кожне з цих рівнянь також має множник i , який нейтралізує i в рівняннях (4.69) (i призводить до появи множника $i^2 = -1$). множник 2 також скоротився, приводячи до дуже простих рівнянь:

$$\begin{aligned} \langle \dot{\sigma}_x \rangle &= -\omega \langle \sigma_y \rangle, \\ \langle \dot{\sigma}_y \rangle &= \omega \langle \sigma_x \rangle, \\ \langle \dot{\sigma}_z \rangle &= 0. \end{aligned} \tag{4.71}$$

Чи це знайоме? Якщо ні, зверніться до курсу електромагнетизму, де розглянуто рух класичного ротора в магнітному полі. Рівняння такі самі, крім того, що замість середніх значень, розглядається реальний рух детермінованої системи. І там і тут, результат зводиться до того, що 3-вектор-оператор *vec sigma* (або 3-вектор *vec L* у випадку класичного ротора) прецесує як гіроскоп навколо напрямку магнітного поля. Прецесія є рівномірною, з кутовою швидкістю *omega*.

Ця подібність із класичною механікою дуже приємна, але необхідно також звернути увагу і на різницю. А саме те, що саме прецесує. У класичній механіці це просто x і y компоненти кутового моменту. У квантовій механіці це очікуване значення. При цьому очікуване значення для σ_z не змінюється з часом, але два інші середні значення змінюються, що власне

і сприймається як прецесія навколо осі z . Незважаючи на це, результат окремого виміру кожної компоненти спіна, як і раніше, дає $+1$ або -1 . Але кількість вимірів що дають кожної з цих значень змінюється згодом і призводить до того, що середнє значення (яке, у випадку, добре як від $+1$ і від -1) змінюється згодом.

Вправа 4.4:

- Перевірте співвідношення комутацій у рівнянні (4.70).

4.12. Рішення рівняння Шредінгера

Добре відоме рівняння Шредінгера, яке зображується на футболках, виглядає так:

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

На даний момент, не будемо турбуватися про значення символів. Тільки зазначимо, що це саме те рівняння, яке нагадує, як щось змінюється з часом. ("Щось" є представленням вектора стану частинки.)

Знамените рівняння Шредінгера є окремим випадком більш загального рівняння, яке ми вже зустрічали в рівнянні (4.53). Це рівняння є частково визначенням і принципом квантової механіки. Як принцип, це рівняння свідчить, що вектор стану безперервно змінюється з часом і це відбувається унітарним чином. Як визначення, це рівняння визначає гамільтоніан, і тому спостерігається звану енергією. Рівняння (4.54),

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

іноді називають залежним від часу рівнянням Шредінгера. Оскільки оператор Гамільтона \mathbf{H} представляє енергію, то значення енергії є просто вла-

сними значеннями оператора \mathbf{H} . Назвемо ці власні значення E_j і відповідні власні вектори $|E_j\rangle$. За визначенням, співвідношення між \mathbf{H} , E_j і $|E_j\rangle$ дається рівнянням на власні значення

$$\mathbf{H}|E_j\rangle = E_j|E_j\rangle. \quad (4.72)$$

Це не залежить від часу рівняння Шредінгера і воно використовується двома різними способами.

З одного боку, коли ми працюємо в певному матричному базисі, це рівняння визначає власні вектори \mathbf{H} . Візьмемо певне значення енергії E_j і знайдемо такий кет-вектор $|E_j\rangle$, який є розв'язанням даного рівняння.

З іншого боку, воно є рівнянням, яке визначає власні значення E_j . Якщо ви візьмете довільне значення E_j , воно, взагалі кажучи, не буде рішенням для власного вектора. Давайте розглянемо найпростіший приклад. Припустимо, що гамільтоніан є матрицею $\frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z$. Оскільки σ_z має лише два власні значення, а саме ± 1 , то Гамільтоніан також має тільки два власні значення, $\pm \frac{\hbar\omega}{2}$. Якщо ви спробуєте використати будь-яке інше значення в правій стороні рівняння (4.72), то ви не знайдете жодного рішення. Оскільки оператор \mathbf{H} є енергією, ми часто називаємо E_j власні значення енергії і $|E_j\rangle$ власні вектори енергії системи.

Вправа 4.5:

- Візьміть будь-який 3-вектор \vec{n} і складіть наступний оператор,

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

Знайдіть власні значення енергії і власні вектори шляхом розв'язання Шредінгера, що не залежить від часу рівняння. Нагадаю, що в рівнянні (3.40) наведено скалярне твір $\sigma \cdot \vec{n}$ у компонентах.

Припустимо, що ми знайшли всі власні значення енергії E_j і відповідні власні вектори $|E_j\rangle$. Тепер ми можемо використовувати цю інформацію для того, щоб вирішити рівняння Шредінгера, що залежить від часу. Хитрість полягає в тому, щоб використовувати той факт, що власні вектори утворюють ортонормований базис, а потім розкласти вектор стану цього базису. Позначимо вектор стану $|\Psi(t)\rangle$ і запишемо відповідне розкладання

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

Оскільки вектор стану $|\Psi(t)\rangle$ змінюється з часом, а базисні вектори $|E_j\rangle$ – ні, то звідси випливає, що коефіцієнти α_j також повинні залежати від часу:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(t) |E_j\rangle. \quad (4.73)$$

Тепер підставимо (4.73) у залежне від часу рівняння. Результат буде таким,

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

Далі використовуємо той факт, що $\mathbf{H} |E_j\rangle = E_j |E_j\rangle$ і отримаємо

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

або перегрупуємо доданки

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

Останній крок легко розпізнати. Якщо сума базисних векторів дорівнює

нулю, то кожен коефіцієнт повинен дорівнювати нулю. Отже, для кожного власного значення E_j коефіцієнт $\alpha_j(t)$ повинен задовольняти простому диференціальному рівнянню

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

Це, звичайно ж, є знайомим диференціальним рівнянням для експоненційної функції часу, у нашому випадку з уявним показником. Рішення є

$$\alpha_j(t) = \alpha_j(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_jt}. \quad (4.74)$$

Це рівняння говорить нам, як змінюються з часом α_j . Таке рівняння має досить загальний характер і не обмежується випадком спинів, за умови, що гамільтоніан не залежить явно від часу. Це наш перший приклад, де проявляється глибокий зв'язок між енергією і частотою, зв'язок, який виникає знову і знову у всій квантовій механіці та квантовій теорії поля. Ми зіштовхуватимемося з таким зв'язком досить часто.

У рівнянні (4.74) коефіцієнти $\alpha_j(0)$ є значення коефіцієнтів у нульовий момент часу. Якщо знаємо вектор стану $|\Psi(t)\rangle$ в нульовий момент часу, то коефіцієнти визначаються шляхом проектування $|\Psi(t)\rangle$ на власні вектори. Ми можемо записати це як

$$\alpha_j(0) = \langle E_j|\Psi(0)\rangle. \quad (4.75)$$

Тепер давайте зберемо все це разом і напишемо повне рішення рівняння Шредінгера, що залежить від часу:

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

Коли ми використовуємо (4.75) для того, щоб замінити $\alpha_j(0)$, це рівняння стане

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \langle E_j | \Psi(0) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} |E_j\rangle. \quad (4.76)$$

Це рівняння може бути переписане у більш елегантному вигляді

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j |E_j\rangle \langle E_j | \Psi(0) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t}, \quad (4.77)$$

у якому підкреслюється, що ми підсумовуємо за всіма базовими векторами. Ви можете поставити запитання, звідки ми “знаємо” $|\Psi(0)\rangle$. Відповідь на це питання залежить від обставин, але, як правило, ми припускаємо, що ми можемо використовувати деякі пристрої для підготовки системи у відомому стані в початковий час $t = 0$.

Перш ніж ми продовжимо обговорення цих рівнянь, я хочу просто повторити їх як рецепт. Я припускаю, що ви вже знаєте достатньо про систему та її простір станів, щоб приступити до роботи.

4.13. Рецепт приготування шредінгерового кету

1. Виведіть, знайдіть, вгадайте, запозичіть або вкрадіть оператора Гамільтона \mathbf{H} .
2. Підготуйте початковий стан $|\Psi(0)\rangle$.
3. Визначте власні значення і власні вектори оператора \mathbf{H} за допомогою рішення Шредінгера, що не залежить від часу рівняння,

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

4. Використовуйте початковий вектор стану $|\Psi(0)\rangle$ разом із власними векторами $|E_j\rangle$, які були знайдені на кроці 3, для того, щоб обчислити початкові коефіцієнти розкладання $\alpha_j(0)$:

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

5. Перепишіть $|\Psi(0)\rangle$ використовуючи власні вектори $|E_j\rangle$ і початкові коефіцієнти $\alpha_j(0)$:

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

Те, що ми зробили вже є розкладанням початкового вектора стану $|\Psi(0)\rangle$ за власними векторами $|E_j\rangle$ гамільтоніана \mathbf{H} . Чим цей базис кращий за інших? Тим, що використання цього базису полегшує вирішення задачі про те, як саме стан системи еволюціонує у часі. Оскільки саме оператор Гамільтона \mathbf{H} відповідає за таку еволюцію. Наразі ми скористаємося цим знанням.

6. У наведеному вище рівнянні замініть кожен коефіцієнт $\alpha_j(0)$ на $\alpha_j(t)$ для того, щоб врахувати залежність від часу. В результаті $|\Psi(0)\rangle$ перетвориться на $|\Psi(t)\rangle$:

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

7. Використовуючи рівняння (4.74) замініть кожен коефіцієнт $\alpha_j(t)$ на $\alpha_j(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}$:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t} |E_j\rangle . \quad (4.78)$$

8. Подавайте з гарніром із сезонних продуктів на Ваш смак.

Тепер ми можемо передбачити ймовірності для кожного можливого результату експерименту в залежності від часу, причому не лише для вимірювання енергії. Нехай \mathbf{L} має власні значення λ_j і власні вектори $|\lambda_j\rangle$. Ймовірність того, що буде виміряно значення λ визначається таким виразом:

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

Вправа 4.6:

- Використовуйте рецепт приготування шредінгерівського кету для випадку одиничного спіна. Для цього випадку гамільтоніан є $\mathbf{H} = \frac{\omega\hbar}{2}\sigma_z$ і спостерігається σ_z . Початковим станом вибрано $|u\rangle$ (стан, у якому $\sigma_z = +1$).

Через час t вимірюється величина σ_y . Які можливі результати вимірювання та з якими ймовірностями?

Вітання! Ви зараз вирішили справжнє квантово-механічне завдання у постановці, яке може бути реалізовано у лабораторії. Не соромтеся, можете похвалити себе.

4.14. Колапс

Ми бачили, як вектор стану еволюціонує, починаючи з часу, коли система приготовлена в певному стані, і закінчуючи моментом часу, коли система вступає в контакт з вимірювальним пристроєм і над нею вимірюється. Якби фізика цікавилася б лише векторами стану, можна було б сказати, що квантова механіка є детермінованою теорією. Але експериментальна фізика не є наукою про вимір векторів станів. Йдеться про виміри спостережуваних. Навіть якщо ми знаємо вектор стану, ми не знаємо, результат будь-якого даного виміру. Тим не менш, було б справедливо сказати, що в проміжках між спостереженнями стан системи розвивається цілком певним чином, відповідно до рівняння Шредінгера, що залежить від часу.

Але іноді трапляється щось незрозуміле. Це відбувається тоді, коли відбувається спостереження. Експеримент із виміру \mathbf{L} даватиме непередбачувані результати. Однак, після того, як експеримент виконаний, система залишається в одному з власному стані оператора \mathbf{L} . У якому саме? У тому, що відповідає результату виміру. Але цей результат непередбачуваний. Звідси випливає, що в ході експерименту стан системи непередбачено переходить стрибком в один із власних станів спостережуваної, яка була виміряна. Це називається *колапсом хвильової функції*.

Іншими словами, припустимо, що безпосередньо перед виміром \mathbf{L} вектор стану задається таким розкладанням,

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

Випадковим чином із ймовірністю $|\alpha_j|^2$, пристрій вимірює значення λ_j і залишає систему в одному зі власного стану оператора \mathbf{L} , а саме $|\lambda_j\rangle$. Вся суперпозиція станів замінюється лише одним доданком.

Цей дивний факт, а саме, що система еволюціонує одним способом між вимірами та зовсім іншим способом у процесі виміру, був джерелом розбрату та збентеження протягом багатьох десятиліть. Виникає питання: чи повинен процес вимірювання сам собою описуватися законами квантової механіки?

Відповідь: так. Закони квантової механіки не зупиняються під час вимірювання. Тим не менш, щоб досліджувати процес вимірювання як процес квантово-механічної еволюції, ми повинні розглядати всю експериментальну установку, у тому числі вимірювальний пристрій як частину єдиної квантової системи. Ми обговоримо цю тему, а саме те, як системи об'єднуються в складові системи, в лекції 6. Але спочатку кілька слів про невизначеність.

5. Принцип невизначеності Гайзенберга

Lenny: Good evening, General. Nice to see you again.

The General: Lenny? Is that you? It's been forever. Well, a long time anyway. Who's your friend?

Lenny: His name is Art. Art, shake hands with General Uncertainty.

5.1. Математичний відступ: Повний набір змінних, що комутують

5.1.1. Стани, які залежать від більш ніж однієї фізичної величини

Фізика одиничного спина надзвичайно проста, і саме це робить його таким привабливим як ілюстративний приклад. Але це також означає, що є багато такого, що вона не може показати. Однією з властивостей одного спина є те, що його стан може повністю визначатися власним значенням одного оператора, скажімо, σ_z . Якщо значення σ_z відоме, то ніяка інша спостерігається, скажімо, така як σ_x , не може бути однозначно визначена. Як ми вже бачили, виміри будь-якої з цих величин знищують всю інформацію, яку ми, можливо, мали про іншу величину.

Однак у більш складних системах ми можемо мати кілька спостережуваних, які сумісні; тобто їх значення можуть бути відомі одночасно. Ось два приклади:

- Частинка рухається у тривимірному просторі. Базисні стани цієї системи визначаються положенням частки. Але для цього потрібно встановити значення трьох координат. Таким чином, це є приклад стану, який визначається трьома числами, $|x, y, z\rangle$. Пізніше ми побачимо, що всі три просторові координати частки можуть одночасно бути визначені.
- Система, що складається із двох фізично не залежних спинів: Іншими словами, система із двох кубітів. Пізніше ми побачимо, як об'єднати

системи на формування великих систем. Але зараз ми можемо лише сказати, що система двох спинів може бути описана двома спостережуваними. Зокрема, є стан, у якому обидва спина спрямовані вгору. Або стан, у якому обидва спина спрямовані вниз. Ще один приклад: перший спин спрямований вгору, тоді як другий - вниз. І тому подібне. Висловлюючись коротше, ми можемо характеризувати двоспинову систему двома спостережуваними: z -компонентою першого спина і z -компонентою другого спина. Квантова механіка не забороняє одночасне знання цих двох спостережуваних. Насправді можна вибрати будь-які компоненти одного спина і будь-які компоненти іншого спина. Квантова механіка дозволяє одночасне знання обох.

У таких ситуаціях нам необхідно виконати кілька вимірів, щоби повністю характеризувати стан системи. Наприклад, у нашій двоспиновій системі, ми вимірюємо кожен спин окремо та пов'язуємо ці вимірювання з двома різними операторами. Ми називатимемо ці оператори **L** і **M**.

Вимірювання переводить систему у свій стан (що складається з одного власного вектора), яке відповідає значенню (власному значенню), тому, що було виміряно. Якщо вимірювати обидва спина в двоспиновій системі, то система перекладається в стані, який одночасно є власним вектором **L** і власним вектором **M**. Ми називаємо це спільним власним вектором операторів **L** та **M**.

Приклад двоспинової системи дає щось конкретне, для аналізу. Однак майте на увазі, що наші результати будуть набагато загальнішими, вони будуть застосовні до будь-якої системи, яка характеризується двома різними операторами. І, як ви можете здогадатися, немає нічого магічного серед двох. Ідеї викладені тут узагальнюються і більшими системами, які вимагають більше операторів, щоб охарактеризувати їх.

Для роботи з двома різними сумісними операторами нам знадобляться два набори міток для їх базисних векторів. Ми будемо використовувати теги λ_i і μ_a . Символи λ_i і μ_a мають власні значення операторів **L** і **M**, відповідно. Індеси i та a пробігають усі можливі результати вимірювань величин, що відповідають операторам **L** та **M**. Вважатимемо, що існує базис векторів станів $|\lambda_i, \mu_a\rangle$, які одночасно є власними векторами обох спостережуваних (але з різними власними значеннями). Іншими словами,

$$\mathbf{L} |\lambda_i, \mu_a\rangle = \lambda_i |\lambda_i, \mu_a\rangle$$

$$\mathbf{M} |\lambda_i, \mu_a\rangle = \mu_a |\lambda_i, \mu_a\rangle$$

Для того, щоб ці рівняння було трохи легше читати, я іноді опускаю нижні індекси:

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

$$\mathbf{M} |\lambda, \mu\rangle = \mu |\lambda, \mu\rangle$$

Щоб мати спільний базис власних векторів, оператори \mathbf{L} і \mathbf{M} повинні комутувати. Це легко побачити. Спочатку подіємо на будь-який з базисних векторів таким твором \mathbf{LM} і використаємо той факт, що базисний вектор є власним вектором кожного з цих операторів:

$$\mathbf{LM} |\lambda, \mu\rangle = \mathbf{L}\mu |\lambda, \mu\rangle$$

або

$$\mathbf{LM} |\lambda, \mu\rangle = \lambda\mu |\lambda, \mu\rangle$$

Власні значення λ, μ звичайно, просто числа. Тому немає значення, яке їх з'являється першим, коли ми перемножуємо їх. Таким чином, якщо ми поміняємо порядок операторів, і подіємо оператором \mathbf{ML} на той же базисний вектор, ми отримуємо той же результат:

$$\mathbf{LM} |\lambda, \mu\rangle = \mathbf{ML} |\lambda, \mu\rangle$$

або у більш стислій формі,

$$[\mathbf{L}, \mathbf{M}] |\lambda, \mu\rangle = 0, \quad (5.79)$$

де права частина є нульовим вектором. Цей результат не був би таким корисним, якби він був вірним лише для конкретного базисного вектора. Але міркування, що призводять нас до формуле (5.79), справедливі й у будь-якого іншого базисного вектора. Цього достатньо, щоб переконатися, що оператор $[\mathbf{L}, \mathbf{M}] = 0$. Якщо оператор зануляє кожен базисний вектор, він також повинен занулити і будь-який вектор у векторному просторі. Оператор, який занулює кожен вектор є саме тим, що маємо на увазі під назвою нульовий оператор. Таким чином, доведено, що, якщо є повний базис одночасних власних векторів для двох спостережуваних, ці дві спостережувані повинні комутувати. Виявляється, що зворотне твердження цієї теореми також вірно: Якщо дві спостерігаються комутують, існує повний базис одночасних власних векторів цих двох наблюдаемых. Простіше кажучи,

дві спостерігаються можуть бути виміряні одночасно, якщо вони комутують один з одним.

Як ми вже згадували раніше, ця теорема є більш загальною. Може знадобитися вказати більшу кількість спостережуваних, щоб повністю визначити базис. Незалежно від кількості необхідних спостережуваних, вони повинні комутувати між собою. Ми називаємо цю колекцію повним набором комутуваних спостерігаються.

5.1.2. Хвильові функції

Тепер ми введемо поняття, яке називається *хвильова функція*. На даний момент не звертайте уваги на назву; загалом, квантова хвильова функція може мати нічого спільного з хвилями. Пізніше, коли ми вивчатимемо квантову механіку частинок (лекції 8–10), ми дізнаємося про зв'язок між хвильовими функціями та хвилями.

Припустимо, що ми маємо базис станів для деякої квантової системи. Нехай ортонормований базис векторів позначається як $|a, b, c, \dots\rangle$, де a, b, c, \dots є власні значення деякого повного набору комутують $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \dots$. Тепер розглянемо довільний вектор стану $|\Psi\rangle$. Оскільки вектори a, b, c, \dots складають ортонормований базис, то $|\Psi\rangle$ може бути розкладена за цим базисом:

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b,c,\dots} \psi(a, b, c, \dots) |a, b, c, \dots\rangle.$$

Величини $\psi(a, b, c, \dots)$ є коефіцієнтами, що входять до розкладання. Кожен із цих коефіцієнтів може бути представлений також як скалярний (внутрішній) добуток вектора стану $|\Psi\rangle$ на один із базисних векторів:

$$\psi(a, b, c, \dots) = \langle a, b, c, \dots | \Psi \rangle \quad (5.80)$$

Безліч коефіцієнтів $\psi(a, b, c, \dots)$ називається хвильовою функцією системи в базисі, що задається $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \dots$.

Математичне визначення хвильової функції задається рівнянням (5.80), яке представляється формальним та абстрактним. Проте фізичний сенс хвильової функції дуже глибокий. Відповідно до основного імовірнісного принципу квантової механіки, квадрат величини хвильової функції є ймовірність того, що комутують спостерігаються будуть значення a, b, c, \dots .

$$P(a, b, c, \dots) = \psi^*(a, b, c, \dots) \psi(a, b, c, \dots).$$

Вид хвильової функції залежить від цього, яких саме спостережуваних ми вирішили зосередитися. Це тому, що розрахунки двох різних спостережуваних спираються на різні набори базисних векторів. Наприклад, у разі одиничного спина, скалярні твори

$$\psi(u) = \langle u | \Psi \rangle$$

i

$$\psi(d) = \langle d | \Psi \rangle$$

визначають хвильову функцію в σ_z базисі, тоді як

$$\psi(r) = \langle r | \Psi \rangle$$

i

$$\psi(l) = \langle l | \Psi \rangle$$

визначають хвильову функцію в базі σ_x .

Важлива властивість хвильової функції випливає з того факту, що повна ймовірність повинна дорівнювати одиниці:

$$\sum_{a,b,c,\dots} \psi^*(a,b,c,\dots) \psi(a,b,c,\dots) = 1.$$

5.1.3. Щодо термінології

Термін хвильова функція, що використовується в цій книзі, відноситься до сукупності коефіцієнтів (називається також компонентами), які є множниками при базисних векторах у розкладанні вектора стану за власними функціями. Наприклад, якщо ми розкладаємо вектор стану $|\Psi\rangle$ таким чином,

$$|\Psi\rangle = \sum_j \alpha_j |\psi_j\rangle,$$

де $|\psi_j\rangle$ є ортонормованими власними векторами ермітового оператора, то сукупність коефіцієнтів α_j – те, що ми назвали $\psi(a,b,c,\dots)$ трохи вище,

- це те, що ми маємо на увазі говорячи про хвильову функцію. У ситуаціях, коли вектор стану виражається як інтеграла, а чи не суми, хвильова функція є безперервної, а чи не дискретної функцією своїх аргументів.

До цих пір ми були досить акуратні, щоб було зрозуміло, що хвильова функція та вектор стану $|\psi_j\rangle$ це два різні поняття. І таке розрізнення є загальноживаним. Проте, деякі автори оперують із хвильовими функціями так, ніби вони є векторами станів. Таке неоднозначне використання термінології може призвести до плутанини. Все стає менш заплутаним, коли ви розумієте, що функція хвилі дійсно може представляти вектор стану. Логічно сприймати коефіцієнти α_j як координати векторів станів у конкретному базисі своїх векторів. Це аналогічно тому, що набір декартових координат є певною точкою в 3-х мірному просторі по відношенню до певної системи координат. Щоб уникнути плутанини, намагайтеся бути в курсі того, яка термінологія використовується. У цій книзі ми будемо використовувати в основному великі символи, такі як Ψ , для позначення векторів станів, і малих символів, наприклад ψ , для позначення хвильових функцій.

5.2. Вимірювання

Повернемося до поняття виміру. Припустимо, що ми вимірюємо дві спостережувані \mathbf{L} і \mathbf{M} в одному експерименті, і система (після вимірювання) залишається в стані, який є спільним власним вектором цих двох спостережуваних. Як ми дізналися в розділі 5.1.1, це означає, що \mathbf{L} та \mathbf{M} повинні комутувати.

Але якщо вони не комутують? Тоді, загалом, неможливо знати ці дві величини одночасно. Надалі ми уточнимо кількісно дане твердження у формі принципу невизначеності, окремим випадком якого є принцип невизначеності Гайзенберга.

Повернемося до нашого пробного каменю, проблеми одиничного спина. Будь-яка спостережувана спина може бути представлена ермітова матриця розміру 2×2 . Будь-яка така матриця має такий вигляд

$$\begin{pmatrix} r & w \\ w^* & r' \end{pmatrix},$$

де діагональні елементи є дійсні числа, а чи не діагональні елементи є комплексні числа, причому одне з них є комплексно пов'язане іншого. Сенс у тому, що потрібно рівно чотири дійсні параметри для визначення цієї спостережуваної. Насправді, є відмінний спосіб для написання будь-якої спінової спостережуваної. А саме, її можна виразити через матриці Паулі, σ_x , σ_y і σ_z , і ще однієї матриці, одиничної матриці I . Як ви пам'ятаєте ці матриці виглядають так,

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

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

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

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

Будь-яка 2×2 ермітова матриця \mathbf{L} може бути записана у вигляді суми чотирьох доданків (розкладена за відповідним базисом)

$$\mathbf{L} = a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z + dI,$$

де a, b, c і d - дійсні числа.

Вправа 5.2: Перевірте це твердження.

Підказка: Покажіть, що система чотирьох лінійних рівнянь для чотирьох невідомих, a, b, c і d , має рішення.

Одиничний оператор I формально відповідає спостережуваній, оскільки він є ермітовим, але це дуже нудна спостерігається. Існує лише одне можливе значення, яке може мати ця тривіальна спостерігається, а саме 1,

і кожен вектор стану є власним вектором одиничного оператора. Якщо ми ігноруватимемо I , то найбільш загальна спостерігається (у разі спина) є суперпозицією трьох компонентів спина σ_x , σ_y і σ_z . Чи може будь-яка пара компонентів спина бути одночасно виміряною? Тільки якщо вони кому-тують. Але легко вирахувати комутатори для цих спінових компонентів. Просто використовуйте матричну виставу, щоб помножити їх у різному порядку і потім відняти.

Комутаційні співвідношення, які ми перерахували в рівняннях (4.70),

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$$

$$[\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x$$

$$[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y,$$

кажуть нам безпосередньо, що жодні дві компоненти спина не можуть бути одночасно виміряні, тому що праві частини не дорівнюють нулю. Вірне і загальне твердження про те, що не існує таких двох компонентів спина вздовж будь-яких осей, які можуть бути одночасно виміряні.

5.3. Принцип невизначеності

Невизначеність є однією з відмінних рис квантової механіки. Проте чи завжди результат експерименту є невизначеним. Якщо система знаходиться у власному стані спостерігається, то не існує невизначеності результату вимірювання. Але незалежно від стану, завжди існує невизначеність щодо деяких спостережуваних. Нехай стан є власним вектором одного ермітового оператора, скажімо, це оператор \mathbf{A} . Тоді такий стан не буде власним вектором інших операторів, які не комутують з \mathbf{A} . Таким чином, як правило, якщо \mathbf{A} і \mathbf{B} не комутують, то має бути невизначеність у знанні однієї чи іншої величини (або обох).

Класичним прикладом цієї взаємної невизначеності є принцип невизначеності Гайзенберга, який у своїй початковій формі ставився до положення

та імпульсу частинки. Але ідеї Гайзенберга можна розвинути в набагато загальніший принцип, який застосовується до будь-яких двох не комутуючих спостерігається. Прикладом може бути два компоненти спіна. Тепер ми маємо всі інгредієнти, необхідні для отримання загальної форми принципу невизначеності.

5.4. Сенс невизначеності

Ми повинні бути точні в тому, що ми маємо на увазі невизначеність, якщо ми хочемо оцінити її кількісно. Давайте припустимо, що власні значення \mathbf{A} позначаються a . Тоді для даного стану $|\Psi\rangle$ існує розподіл ймовірностей $P(a)$ зі звичайними властивостями. Очікуване значення \mathbf{A} це звичайне середнє:

$$\langle \Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle = \sum_a a P(a).$$

Грубо кажучи, це означає, що $P(a)$ центрується навколо очікуваного значення. Те, що ми розумітимемо під "невизначеністю \mathbf{A} " є так званим стандартним відхиленням. Для обчислення стандартного відхилення спочатку відніміть з \mathbf{A} його очікувану величину. Отримаємо такий оператор:

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle.$$

Визначаючи $\bar{\mathbf{A}}$ таким чином, ми просто відняли очікуване значення з оператора. При цьому не зовсім зрозуміло, що це означає. Давайте проаналізуємо те, що вийшло. Очікуване значення є дійсним числом. Кожне дійсне число є оператором, а саме оператором, який пропорційний тотожному або одиничному оператору I . Для того, щоб прояснити цей зміст, можна записати $\bar{\mathbf{A}}$ у більш повній формі:

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle I.$$

Розподіл ймовірностей для $\bar{\mathbf{A}}$ визначається так само, як розподіл для \mathbf{A} ,

за винятком того, що середнє значення $\bar{\mathbf{A}}$ дорівнює нулю. Власні вектори $\bar{\mathbf{A}}$ ті ж, що й у \mathbf{A} , а власні значення просто зрушені таким чином, що їхнє середнє значення дорівнює нулю. Іншими словами, власні значення $\bar{\mathbf{A}}$ є

$$\bar{a} = a - \langle \mathbf{A} \rangle.$$

Квадрат невизначеності (або стандартне відхилення) для \mathbf{A} ми позначимо $(\Delta \mathbf{A})^2$ і визначимо так,

$$(\Delta \mathbf{A})^2 = \sum_a \bar{a}^2 P(a), \quad (5.81)$$

або

$$(\Delta \mathbf{A})^2 = \sum_a (a - \langle \mathbf{A} \rangle)^2 P(a). \quad (5.82)$$

Це може бути записано так,

$$(\Delta \mathbf{A})^2 = \langle \Psi | \bar{\mathbf{A}}^2 | \Psi \rangle.$$

Якщо очікуване значення \mathbf{A} дорівнює нулю, то вираз для невизначеності $\Delta \mathbf{A}$ спрощується,

$$(\Delta \mathbf{A})^2 = \langle \Psi | \mathbf{A}^2 | \Psi \rangle.$$

Інакше кажучи, квадрат невизначеності дорівнює середньому значенню квадрата оператора \mathbf{A}^2 .

5.5. Нерівність Коші - Шварца

Принцип невизначеності встановлює нерівність, яка каже нам, що

твір невизначеностей \mathbf{A} і \mathbf{B} більший, ніж певна величина, яка пропорційна їх комутатору.

Основною математичною нерівністю тут є знайома всім нерівність трикутника. Воно каже, що у будь-якому векторному просторі, величина однієї сторони трикутника менше, ніж сума величин двох інших сторін. Для ре-чових векторних просторів ми можемо отримати таку нерівність,

$$|X| |Y| \geq |X \cdot Y| \quad (5.83)$$

виходячи з нерівності трикутника,

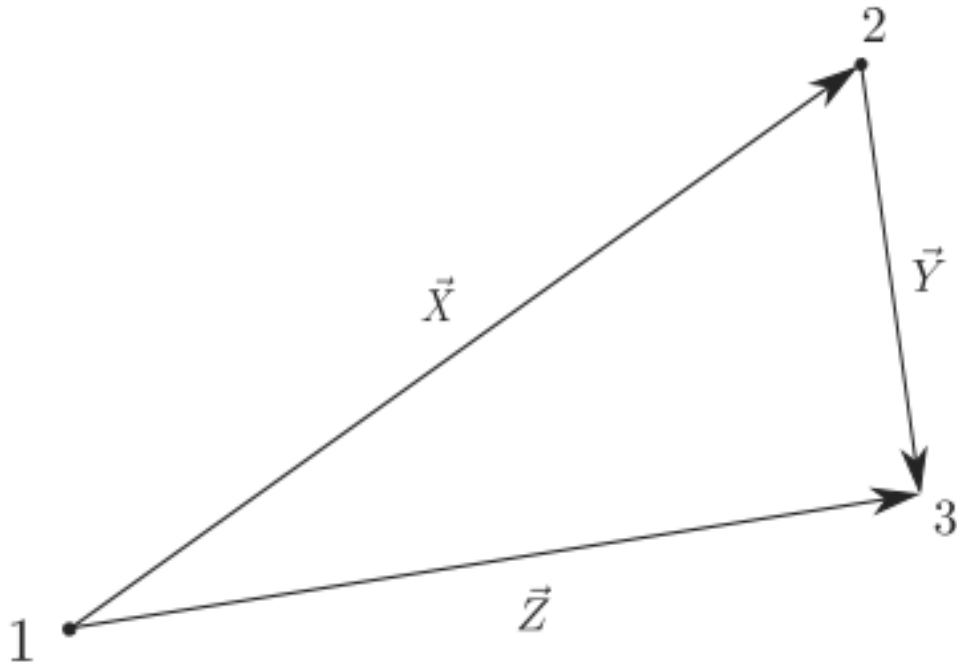
$$|X| + |Y| \geq |X + Y|.$$

5.6. Нерівність трикутника та нерівність Коші - Шварца

Нерівність трикутника для загального векторного простору, яку ми записали вище, навіяна, звичайно, властивостями звичайних трикутників. Але така властивість насправді має набагато загальніший характер і відно-ситься до великого класу векторних просторів. Ви можете зрозуміти основ-ну ідею, дивлячись на рис. 5.1 де сторонами трикутника є звичайні геоме-тричні вектори в площині. Нерівність трикутника є лише твердженням, що сума будь-яких двох сторін більша, ніж третя сторона. Основна ідея тут у тому, що найкоротшим шляхом між двома точками є пряма лінія. Найко-ротший шлях між точками 1 і 3 є стороною Z , а сума двох інших сторін, безумовно, більша.

Нерівність трикутника може бути виражена декількома різними спосо-бами. Почнемо з основного визначення, а потім перетворимо його на форму, яка нам необхідна. Ми знаємо це

$$|X| + |Y| \geq |Z|.$$



Мал. 5.1. Нерівність трикутника: Сума довжин векторів \vec{X} і \vec{Y} більша або дорівнює довжині вектора \vec{Z} . (Найкоротша відстань між двома точками - це пряма лінія.)

Якщо вважати X і Y векторами, які можна складати, можна записати,

$$|\vec{X}| + |\vec{Y}| \geq |\vec{X} + \vec{Y}|.$$

Якщо звести обидві частини цього рівняння квадрат, то отримаємо

$$|\vec{X}|^2 + |\vec{Y}|^2 + 2|\vec{X}||\vec{Y}| \geq |\vec{X} + \vec{Y}|^2.$$

Але права сторона цієї нерівності може бути представлена таким чином,

$$|\vec{X} + \vec{Y}|^2 = |\vec{X}|^2 + |\vec{Y}|^2 + 2(\vec{X} \cdot \vec{Y}).$$

Чому? Тому, що $|\vec{X} + \vec{Y}|^2$ є скалярний твір двох однакових векторів, $(\vec{X} + \vec{Y}) \cdot (\vec{X} + \vec{Y})$.

$(\vec{X} + \vec{Y})$. Збираючи всі разом, отримаємо

$$|\vec{X}|^2 + |\vec{Y}|^2 + 2|\vec{X}||\vec{Y}| \geq |\vec{X}|^2 + |\vec{Y}|^2 + 2(\vec{X} \cdot \vec{Y}).$$

Далі ми просто віднімемо $|\vec{X}|^2 + |\vec{Y}|^2$ з кожної частини рівняння і залишок потім поділимо на 2. В результаті отримаємо,

$$|\vec{X}||\vec{Y}| \geq \vec{X} \cdot \vec{Y}. \quad (5.84)$$

Це ще одна форма нерівності трикутника. Ця нерівність говорить нам, що для будь-яких двох векторів \vec{X} і \vec{Y} , добуток їх довжин, більший або дорівнює їхньому скалярному добутку. Це не дивно, оскільки скалярний твір найчастіше визначається як

$$\vec{X} \cdot \vec{Y} = |\vec{X}||\vec{Y}| \cos \theta,$$

де θ є кут між двома векторами. Але ми знаємо, що косинус кута завжди залишається в діапазоні від -1 до +1, так що вираз праворуч повинен бути меншим або дорівнює $|\vec{X}||\vec{Y}|$. Це співвідношення справедливе і для векторів у двох вимірах, трьох вимірах, або у просторі з довільним числом вимірів. Це правильно навіть для векторів у комплексних векторних просторах. Це загалом вірно для векторів у будь-якому векторному просторі, за умови, що довжина вектора визначається як корінь квадратний із скалярного твору цього вектора із самим собою. Для того, щоб рухатися вперед, нам необхідно використовувати нерівність (5.84) у формі квадрата, тобто,

$$|\vec{X}|^2 |\vec{Y}|^2 \geq (\vec{X} \cdot \vec{Y})^2$$

або

$$|\vec{X}|^2 |\vec{Y}|^2 \geq |\vec{X} \cdot \vec{Y}|^2. \quad (5.85)$$

У такій формі це називається нерівністю Коші - Шварца.

Для комплексних векторних просторів, нерівність трикутника набуває дещо складнішої форми. Нехай $|X\rangle$ і $|Y\rangle$ мають будь-які два вектори в комплексному векторному просторі. Довжини трьох векторів $|X\rangle$, $|Y\rangle$ та $|X\rangle + |Y\rangle$ є

$$|X| = \sqrt{\langle X|X\rangle}$$

$$|Y| = \sqrt{\langle Y|Y\rangle}$$

$$|X + Y| = \sqrt{(\langle X| + \langle Y|)(|X\rangle + |Y\rangle)}. \quad (5.86)$$

Далі ми зробимо так само, як уже робили в разі дійсних векторів: Спочатку запишемо,

$$|X| + |Y| \geq |X + Y|.$$

Потім зведемо це квадрат і спростимо:

$$2|X||Y| \geq |\langle X|Y\rangle + \langle Y|X\rangle|. \quad (5.87)$$

Це форма нерівності Коші-Шварца, що призведе до принципу невизначеності. Але як це пов'язано з двома \mathbf{A} і \mathbf{B} ? Ми дізнаємося про це, коли означимо $|X\rangle$ і $|Y\rangle$.

5.7. Загальний принцип невизначеності

Нехай $|\Psi\rangle$ є довільний кет, і нехай \mathbf{A} і \mathbf{B} будь-які дві спостерігаються. Визначимо тепер $|X\rangle$ і $|Y\rangle$ таким чином:

$$|X\rangle = \mathbf{A}|\Psi\rangle \tag{5.88}$$

$$|Y\rangle = i\mathbf{B}|\Psi\rangle$$

Зверніть увагу на комплексну одиницю i у другому визначенні. Тепер підставимо вираз (5.88) у (5.87), і отримаємо

$$2\sqrt{\langle\mathbf{A}^2\rangle\langle\mathbf{B}^2\rangle} \geq |\langle\Psi|\mathbf{A}\mathbf{B}|\Psi\rangle - \langle\Psi|\mathbf{B}\mathbf{A}|\Psi\rangle|. \tag{5.89}$$

Знак мінус обумовлений фактором i у другому визначенні (5.88). Використовуючи визначення комутатора, ми бачимо, що

$$2\sqrt{\langle\mathbf{A}^2\rangle\langle\mathbf{B}^2\rangle} \geq |\langle\Psi|[\mathbf{A}, \mathbf{B}]|\Psi\rangle|. \tag{5.90}$$

Давайте припустимо на хвилину, що \mathbf{A} і \mathbf{B} мають середнє значення, що дорівнює нулю. У цьому випадку середнє значення $\langle\mathbf{A}^2\rangle$ є просто квадрат невизначеності \mathbf{A} , тобто $(\Delta\mathbf{A})^2$, а $\langle\mathbf{B}^2\rangle$ є просто $(\Delta\mathbf{B})^2$. Таким чином, ми можемо переписати рівняння (5.90), як

$$\Delta\mathbf{A}\Delta\mathbf{B} \geq \frac{1}{2} |\langle\Psi|[\mathbf{A}, \mathbf{B}]|\Psi\rangle|. \tag{5.91}$$

Подумайте про цю математичну нерівність на мить. З лівого боку, бачимо, добуток невизначеностей двох \mathbf{A} і \mathbf{B} для стану Ψ . Нерівність каже, що

цей твір не може бути меншим, ніж те, що стоїть праворуч, яке включає комутатор \mathbf{A} і \mathbf{B} . Зокрема, це говорить нам, що *твір невизначеностей не може бути меншим за половину величини очікуваного значення відповідного комутатора*.

Загальний принцип невизначеності є кількісним виразом чогось, що ми вже підозрювали: якщо комутатор \mathbf{A} і \mathbf{B} не дорівнює нулю, то обидві спостерігаються не можуть одночасно бути відомими з достовірністю.

Але що, якщо очікуване значення \mathbf{A} або \mathbf{B} не дорівнює нулю? У цьому випадку хитрість полягає в тому, щоб перевизначити два нових операторів, у яких середні значення вже віднято:

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle$$

$$\bar{\mathbf{B}} = \mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle.$$

Потім повторіть весь процес, замінюючи \mathbf{A} і \mathbf{B} на $\bar{\mathbf{A}}$ і $\bar{\mathbf{B}}$. Наступна вправа допоможе вам у цьому.

Вправа 5.2:

1. Покажіть, що $\Delta \bar{\mathbf{A}}^2 = \langle \bar{\mathbf{A}}^2 \rangle$ і $\Delta \bar{\mathbf{B}}^2 = \langle \bar{\mathbf{B}}^2 \rangle$.
2. Покажіть, що $[\bar{\mathbf{A}}, \bar{\mathbf{B}}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]$.
3. Використовуючи ці співвідношення, покажіть, що

$$\Delta \bar{\mathbf{A}} \Delta \bar{\mathbf{B}} \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle|.$$

Пізніше, в лекції 8, ми будемо використовувати цей дуже загальний варіант принципу невизначеності, щоб довести початкову форму принципу невизначеності Гайзенберга: Твір невизначеностей положення та імпульсу частинки не може бути меншим за половину постійної Планки.

6. Об'єднані системи: Заплутаність

Art: This is a pretty friendly place after all. Except for Minus One, I don't see too many loners.

Lenny: Mingling is only natural at a place like this. And not just because it's cramped. Just keep track of your wallet and don't get too entangled.

6.1. Математичний відступ: Тензорні твори

6.1.1. Знайомтеся: сестра Оленка та братик Іванко

З'ясування того, як системи об'єднуються, щоб отримати більші системи, є здебільшого те, що ми робимо у фізиці. Чи потрібно говорити вам, що атом є сукупність нуклонів і електронів, кожен із яких може розглядатися як повноправна квантова система.

Коли йдеться про складні системи, легко загрузнути у формальній мові, кажучи “система A ”, “система B ” і т.п. Більшість фізиків воліють більш легку, неформальну мову, і Оленка (в англійській літературі Аліса) та Іванушка (в англійській літературі Боб) стали майже універсальними заміниками для A та B . Ми можемо сприймати Оленку та Іванушку як реальних спостерігачів, яким доступні лише частини системи та які оперують відповідним лабораторним обладнанням, Їхні можливості обмежені лише нашою уявою, і вони із задоволенням вирішують важкі чи небезпечні завдання, такі як, наприклад, стрибки у чорні дірки. Вони справжні супергерої!

Припустимо, що Оленка і Іванка представляють дві підсистеми, підсистема Оленочки і підсистема Іванушки. Підсистема Оленочки, незалежно від її конкретної реалізації, описується простором станів, що позначається як S_A , а підсистема Іванушки описується простором станів, що позначається S_B .

Тепер припустимо, що хочемо об'єднати ці дві підсистеми в єдину складову систему. Перш ніж рухатися вперед, давайте уточнимо, що ми знаємо про підсистеми. Наприклад, підсистема Оленки може бути квантово-

механічною монетою з двома базовими станами H (решка) і T (орел). Звичайно, класична монета може бути або в одному стані або в іншому, але квантова монета може існувати у вигляді суперпозиції:

$$\alpha_H |H\rangle + \alpha_T |T\rangle.$$

Ви помітите, що я використав незвичайне позначення для кет-векторів Оленки. Це щоб відрізнити їх від кетів Іванушки. Нове позначення покликане захистити нас від спроб скласти вектори в просторі Оленочки S_A з векторами в просторі Іванушки S_B . Простір Оленочки S_A є двовимірним векторним простором - воно визначається двома базисними векторами $|H\rangle$ і $|T\rangle$.

Підсистема Іванушки також може бути монетою, але знову ж таки це може бути щось ще. Припустимо, що це квантова гральна кістка. Тоді підпростір станів Іванушки S_B буде шестивимірним, з базисом

$$|1\rangle$$

$$|2\rangle$$

$$|3\rangle$$

$$|4\rangle$$

$$|5\rangle$$

$$|6\rangle$$

відповідним шести граням ігрової кістки. Подібно до монети Оленочки, гральна кістка Іванушки є квантово-механічною і, тому, з цих шести станів можна організувати суперпозицію станів.

6.1.2. Подання комбінованої системи

Тепер уявіть, що є як підсистема Іванушки так і підсистема Олени і вони утворюють єдину складову систему. Перше питання: Як ми можемо побудувати простір станів, назвемо його S_{AB} , для комбінованої системи?

Відповідь це питання полягає у формуванні тензорного твору S_A і S_B . Позначенням цієї операції є

$$S_{AB} = S_A \otimes S_B.$$

Для визначення S_{AB} , достатньо вказати його базисні вектори. Базисні вектор це саме те, що ви могли б очікувати. У верхній половині малюнка 6.1 показано таблицю, стовпці якої відповідають шести базисним векторам Іванушки та чії рядки відповідають двом векторам базису Оленки. Кожен осередок у таблиці позначає вектор базису для системи S_{AB} . Наприклад, блок, позначений значком $H4$ є станом S_{AB} , у якому монета показує “решка”, а гральна кістка показує число 4. У складовій системі є дванадцять базисних векторів.

Існують різні способи позначень цих станів. Ми могли б представляти стан $H4$ за допомогою явних позначень, таких як $|H\rangle \otimes |4\rangle$ або $|H\rangle |4\rangle$. Однак зазвичай зручніше використовувати композитне позначення $|H4\rangle$. Це підкреслює, що ми говоримо про єдиний стан, що характеризується двома параметрами. Ліва половина вказує на параметр, що описує підсистему Оленки, а права половина відноситься до підсистеми Іванушки. Явні та складові позначення обидва мають той самий сенс - вони належать до того ж стану.

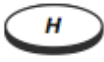
Після того, як базисні вектори вказані, у цьому випадку їх дванадцять, ми можемо об'єднувати їх лінійно для побудови суперпозицій. Таким чином, простір, визначений як тензорний твор, в даному випадку є дванадцятимірним. Суперпозиція двох (можна взяти і більше) із цих базисних векторів може виглядати так

$$\alpha_{H3} |H3\rangle + \alpha_{T4} |T4\rangle.$$


У кожному випадку, перша половина мітки стану описує стан монети Оленки, а друга половина описує стан гральної кістки Іванушки. Іноді нам необхідно буде послатися на довільний базисний вектор у комбінованому просторі S_{AB} . Для цього ми будемо використовувати кет-вектори, які виглядають так,

State-Labels for Combined System S_{AB}

		Bob's state-labels					
		1	2	3	4	5	6
Alice's state-labels	H	H1	H2	H3	H4	H5	H6
	T	T1	T2	T3	T4	T5	T6



Alice's system



Bob's system

Мал. 6.1. Базисні стани складової системи S_{AB} показані у вигляді таблиці. Стовпці відповідають різним станам гральної кістки Іванушки (Bob), а рядки відповідають різним станам монети Оленки (Alice). Позначення станів комбінованої системи (що включає гральну кістку та монету) наведено у клітинах таблиці. Ці позначення складаються з двох символів, що позначають стан гральної кістки та монети відповідно. Наприклад, $H4$ позначає стан, в якому монета Оленки показує H (решка), а гральна кістка Іванушки показує 4.

$$|ab\rangle,$$

або так

$$|a'b'\rangle,$$

У цих позначеннях, a або a' (або що б не стояло в лівій частині позначення) є одним із станів Оленочки, а b або b' являє собою одне із станів Іванушки.

Існує один нетривіальний аспект такого позначення. Навіть хоча наші позначення станів S_{AB} мають подвійне позначення, кет-вектори, такі

як $|ab\rangle$ або $|H3\rangle$, є єдиним станом комбінованої системи. Іншими словами, ми використовуємо подвійний індекс/мітку для позначення єдиного стану. Потрібен певний час, щоб звикнути до цього. Частина позначення, що відноситься до підсистеми Оленки, завжди стоїть ліворуч, а частина, що відповідає підсистемі Іванушки, завжди знаходиться праворуч у складовому позначенні. Мнемонічне правило: Порядок індексів у складовому позначенні такий самий як і алфавітний порядок для імен Оленка та Іванко.

Правила однакові й у більш загальних систем. Єдина відмінність полягає в тому, що два А-стану та шість В-станів будуть замінені N_A та N_B станів відповідно, а тензорний твір матиме розмірність

$$N_{AB} = N_A N_B.$$

Системи з трьома або більшим числом компонентів можуть бути представлені тензорних творів трьох або більше просторів станів, але ми не будемо тут мати справу з такими просторами.

Хоча ми описали окремі підпростори Оленки та Іванушки S_A і S_B , а також об'єднаний простір S_{AB} , нам ще залишилося дещо довізначити, а саме оператори, що діють на систему (або на її частині). Оленка має набір операторів, що позначаються як σ , які діють на її підсистему. Іванко має аналогічний набір для своєї підсистеми, який ми можемо маркувати τ , так щоб не переплутати їх з тими, що використовує Оленка. Оленка може мати кілька операторів σ , і також Іванушка може мати кілька операторів, τ . Тепер ми маємо все необхідне, щоб глибше досліджувати композитні системи. Пізніше, в лекції 7, ми пояснимо, як працювати з операторами, що визначаються за допомогою тензорного твору, у компонентній формі, використовуючи матриці та векторні стовпці.

До теперішнього часу не повинно бути жодних сумнівів у тому, що квантова фізика відрізняється від класичної фізики, аж до її логічного коріння. У цій та наступній лекціях, я збираюся ще більше розвинути цю ідею. Ми обговорюватимемо аспект квантової фізики, який настільки відрізняє її від класичної фізики, що це спантеличувало (і спантеличує) фізиків і філософів з моменту появи квантової теорії і до теперішніх днів. Цей аспект

приводив його першовідкривача, Ейнштейна, до висновку про те, що щось дуже глибоке відсутнє у квантовій механіці (тобто, що квантова механіка неповна), і фізики сперечаються про це досі. Як зрозумів Ейнштейн, приймаючи квантову механіку, ми також приймаємо відповідне уявлення про реальність, яке докорінно відрізняється від класичного уявлення.

6.2. Класичні кореляції

Перш ніж ми перейдемо до квантової заплутаності (entanglement), давайте витратити кілька хвилин на те, що ми могли б назвати класичною заплутаністю. У наступному експерименті, Оленка (А) та Іванушка (В) отримуватимуть деяку допомогу від Баби-яги (в англійській літературі Чарлі) (С).

Баба-яга має дві монети, копійку та п'ятак. Вона перемішує їх і потім бере по одній монеті в кожну руку і дає одну монету Оленці, а іншу - Іванко. Причому ніхто не дивиться на монети і ніхто не знає, де яка монета. Потім Оленка сідає на зореліт до Альфа Центавра, а Іванко залишається в Пало-Альто. Баба-яга зробила свою роботу і більше не має значення (вибачте, Баба-яга).

Перед міжзоряною поїздкою, Оленка та Іванка синхронізували свій годинник - вони виконали всі необхідні розрахунки згідно з теорією відносності, врахували уповільнення часу тощо. Вони домовилися про те, що Оленка подивиться на свою монету за одну або дві секунди до того, як Іванко подивиться на свою.

Все йде за планом, і коли Оленка потрапляє на Альфа Центавра, вона справді дивиться на свою монету. Дивно, в той самий момент, коли вона дивиться на свою монету, вона відразу ж точно знає, яку монету побачить Іванушка, навіть раніше ("перш за все" визначаться по годиннику Іванушки), чим він подивиться. Чи це є ненормальним? Чи вдалося Оленці та Іванкові порушити одне з фундаментальних правил теорії відносності, який свідчить, що інформація не може йти швидше, ніж швидкість світла?

Звичайно, ні. Що порушило б теорію відносності, так це те, якби Оленці вдалося сказати Іванку чого йому чекати. Оленка може знати, яку монету побачить Іванушка, але вона не має жодного способу, щоб сказати

йому про це, без того, щоб не відправити йому реальне повідомлення від Альфа Центавра, на що знадобилося б принаймні чотири роки, якщо таке повідомлення передавалося б за допомогою променя світла.

Давайте проробимо цей експеримент багато разів, або з багатьма парами Оленка-Іванушка або з тією ж парою, але розтягуючи експеримент у часі (поки Оленка повернеться назад за черговою монетою і потім долетить до Альфа Центавра). Щоб описати цей експеримент кількісно, Баба-яга (вона повертається до роботи, вибачившись) малює $\sigma = +1$ кожному копійці і $\sigma = -1$ кожному п'ятаку. Якщо ми припустимо, що Баба-яга дійсно добре переміщує монети так, що те, яка монета дістанеться комусь, є цілком випадковим, то ми прийдемо до наступних фактів:

- В середньому, обидва A і B будуть отримати стільки ж копійок, скільки і п'ятаків. Нехай σ_A буде величиною того, що спостерігав A , а σ_B - що спостерігав B . Тоді математичний запис наведеного вище затвердження буде таким:

$$\langle \sigma_A \rangle = 0 \tag{6.92}$$

$$\langle \sigma_B \rangle = 0.$$

- Якщо A і B запишуть свої спостереження, а потім знову зустрінуться разом у Пало-Альто, щоб порівняти записи, вони знайдуть сильну кореляцію. Для кожного випробування, якщо A спостерігав $\sigma_A = +1$, то B спостерігав $\sigma_B = -1$ і навпаки. Іншими словами, твір $\sigma_A \sigma_B$ завжди дорівнює -1 :

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle = -1.$$

Зверніть увагу, що середнє значення твору (σ_A на σ_B) не дорівнює твору середніх - рівняння (6.92) кажуть нам, що $\langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle$ дорівнює нулю. Математично це записується так,

$$\langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle \neq \langle \sigma_A \sigma_B \rangle,$$

або

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle - \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle \neq 0. \quad (6.93)$$

Це вказує на те, що спостерігаються Оленочки і спостерігаються Іванушки є скорельованими між собою (тобто взаємозалежними). Фактично наступна величина

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle - \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle$$

називається статистичною кореляцією між спостережуваними Іванушками та спостереженнями Оленки. Це називається статистичної кореляції, навіть якщо вона дорівнює нулю. Якщо статистична кореляція не дорівнює нулю, ми говоримо, що спостереження скорреліровані. Джерелом цієї кореляції є той факт, що спочатку Оленка та Іванко були в тому самому місці, і Баба-яга мала по одній з кожного типу монет. Відповідне ставлення залишилося і тоді, коли Оленка полетіла до Альфа Центавра просто тому, що монети не змінилася під час поїздки. В цьому немає нічого дивного, як і в нерівності (6.93). Це досить загальна властивість статистичних розподілів.

Припустимо, у вас є розподіл ймовірності $P(a, b)$ для двох змінних a та b . Якщо змінні абсолютно не корельовані між собою, то ймовірність факторизуватиметься (розпадеться на множники):

$$P(a, b) = P_A(a)P_B(b), \quad (6.94)$$

де $P(a)$ та $P(b)$ є індивідуальні ймовірності для a та b . (Я додав нижній індекс як нагадування, що ці функції можуть відрізнятися.) Легко бачити, що якщо ймовірність факторизувалась таким чином, то немає жодної кореляції; іншими словами, середнє від твору дорівнює твору середніх.

Вправа 6.1: Доведіть, що, якщо $P(a, b)$ факторизується (тобто, може бути представлено у вигляді добутку двох множників, один з яких залежить від a , а інший - від b), то a і b не корельовані.

Дозвольте мені скористатися прикладом, щоб проілюструвати ситуацію, що призводить до факторизованих ймовірностей. Припустимо, що замість однієї Баби-яги є дві Баба-яга-А і Баба-яга-В, які ніколи не спілкувалися один з одним. Баба-яга-В змішує свої дві монети та дає одну Іванушці, а іншу викидає.

Баба-яга-А робить те ж саме, за винятком того, що вона дає монету Оленці. Це і є приклад ситуації, яка призводить до факторизації ймовірностей без будь-якої кореляції.

У класичній фізиці ми використовуємо статистику і теорію ймовірності, коли ми не знаємо про щось, в принципі, пізнаване. Наприклад, після того, як монети перемішані в першому експерименті, Баба-яга могла б зробити непомітне спостереження (кинути швидкий погляд), а потім передати Оленці та Іванці їх монети. Це не вплинуло б на результат. У класичній механіці, розподіл ймовірностей $P(a, b)$ відбиває той факт, що стан системи мало деталізовано. За кадром залишилася якась інформація, яка, в принципі, може бути відома про систему, але з тієї чи іншої причини не відома. У класичній фізиці використання ймовірності завжди пов'язане з неповнотою знання щодо того, що в принципі могло б бути відомо.

До цього стосується той факт, що повне знання системи в класичній фізиці передбачає повне знання кожної частини системи: Безглуздо було б говорити, що Баба-яга знає все, що може бути відомо про систему двох монет, але не знає чогось про окремі монети.

Ці класичні уявлення про ймовірності глибоко вкоренилися у нашому мисленні. Вони є основою нашого інстинктивного розуміння фізичного світу. Дуже важко оминати ці уявлення. Але зробити це нам доведеться, якщо ми хочемо зрозуміти квантовий світ.

6.3. Об'єднуючи квантові системи

Дві монети Баби-яги утворили єдину класичну систему, що складається із двох класичних підсистем. Квантова механіка дозволяє об'єднати системи. Як ми з'ясували в математичному відступі (розділ 6.1), таке об'єднання описується тензорним твором.

Оленка і Іванко люб'язно погодилися надати видозмінений варіант системи монета - гральна кістка, тій, що вони позичали нам для Відступу про тензорні твори. Замість монети та гральної кістки, нова система будуватиметься з двох спинів, а це означає, що ми матимемо можливість скористатися нашими знаннями про одиничні спини.

Як і раніше, ми іноді використовуватимемо незвичайне позначення $|a\rangle$, щоб нагадати нам про те, що вектори стану Оленки належать простору станів, відмінному від того, якому належать вектори стану Іванушки і що ми не можемо складати їх. З іншого боку, пригадаємо, що кожен член ортонормованого базису S_{AB} позначається парою векторів, один з S_A і один з S_B . Ми також часто користуватимемося позначенням $|ab\rangle$ для позначення єдиного базисного вектора комбінованої системи. Різні базисні вектори з подвійною індексацією (як вектори одного і того ж простору) можуть складатися разом, і ми часто це робитимемо.

Як ми вже пояснювали у Відступі, потрібен певний час, щоб звикнути до того, що базисні вектори маркуються парою індексів. Ви повинні думати про пару ab як про єдиний індекс, який зазначає одиничний стан.

Давайте візьмемо приклад. Розглянемо деякий лінійний оператор \mathbf{M} , що діє просторі станів складової системи. Як завжди, він може бути представлений у вигляді матриці. Матричні елементи будуються шляхом дії оператором на один базисний кет-вектор та множення результату скалярно на інший базисний бра-вектор (своєрідний сендвіч утворений даним оператором та двома базисними векторами). Таким чином, матричні елементи \mathbf{M} виражені так,

$$\langle a'b' | \mathbf{M} | ab \rangle = M_{a'b', ab}.$$

Кожен рядок матриці позначається індексом $(a'b')$, а кожен стовпець інде-

ксом (ab) .

Вектори $|ab\rangle$ вважаються ортонормованими, що означає, що скалярний добуток двох таких векторів дорівнює нулю, якщо це не збігаються вектори. Останнє зовсім не означає, що a збігається із b . Але воно означає, що ab збігається з $a'b'$. Ми також можемо висловити це за допомогою Кронекера:

$$\langle ab|a'b'\rangle = \delta_{aa'}\delta_{bb'}.$$

Права частина не дорівнює нулю, якщо $a = a'$ і $b = b'$. Якщо мітки збігаються, то скалярний добуток дорівнює одиниці.

Тепер, коли ми маємо базисні вектори, ми можемо взяти будь-яку лінійну суперпозицію їх і це також буде допустимим вектором у цьому просторі. Таким чином, будь-який стан у складовій системі може бути розкладено так

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b} \psi(a,b) |ab\rangle.$$

6.4. Два спина

Повертаючись до нашого прикладу, давайте уявимо два спини: один спин Оленочки та один спин Іванушки. Для того, щоб зробити це наочнішим, припустимо, що ці спини приєднані до двох частинок і, що дві частинки фіксуються в просторі на двох сусідніх, але різних місцях.

Оленка та Іванка мають власні апарати, звані \mathcal{A} і \mathcal{B} відповідно, які вони можуть використовувати для підготовки стану своїх спинів і вимірювання спинових компонент. Кожен із цих апаратів може бути незалежно один від одного орієнтований уздовж будь-якої осі.

Нам потрібні позначення для двох спинів. Коли у нас був тільки один спин, ми просто називали його σ і у нього було три компоненти вздовж осей x , y , z . Тепер у нас є два спина, і питання полягає в тому, щоб позначити їх так, щоб не захарашувати символи надто великою кількістю підрядкових та нарядкових індексів. Ми могли б назвати їх σ_A і σ_B , а їх компоненти,

σ_x^A, σ_y^B тощо. На мій погляд у цих позначеннях надто багато індексів, щоб устежити за всіма, особливо якщо їх писати на дошці. Натомість я наслідуватиму ту саму домовленість, яку ми використали у Відступі про тензорні твори. Я позначатиму спин Оленочки буквою σ , для спина Іванушки використовуватиму наступну букву в грецькому алфавіті, τ . Повні набори компонентів для спинів Оленочки та Іванки виглядають так,

$$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$$

і

$$\tau_x, \tau_y, \tau_z.$$

Відповідно до викладених раніше принципів, простір станів для двоспінової системи є тензорним твором (двох просторів для одиничного спина). Ми можемо скласти таблицю з чотирьох станів, так само, як ми це робили у Відступі та отримуємо 2×2 квадратну матрицю, що складається з чотирьох базисних станів.

Давайте працювати в такому базисі, в якому визначено z компонент кожного зі спинів. Тоді базисні вектори виглядають так,

$$|uu\rangle, |ud\rangle, |du\rangle, |dd\rangle,$$

де перша частина кожної мітки представляє стан спина Оленочки σ , а друга частина являє собою стан спина Іванушки τ . Наприклад, перший базисний вектор $ketuu$ являє собою стан, в якому обидві спини спрямовані вгору. Вектор $|du\rangle$ це стан, в якому спин Олени спрямований вниз, а спин Іванушки спрямований вгору.

6.5. Пероммножені стани

Найпростіший тип стану для складової (в даному випадку, двоспінової) системи називається *факторизований стан*. Такий стан є результатом

повністю незалежних дій Оленки та Іванушки, при яких кожен використовує свій власний апарат для підготовки стану відповідного одиничного спина. Математично це можна записати в такий спосіб. Припустимо, що Оленка приготувала її спин у наступному стані,

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

та Іванушка приготував відповідний спин у стані

$$\beta_u |u\rangle + \beta_d |d\rangle.$$

Ми припустимо, що кожен із станів нормований,

$$\alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d = 1 \tag{6.95}$$

$$\beta_u^* \beta_u + \beta_d^* \beta_d = 1.$$

Фактично ці роздільні нормування кожної підсистеми грають вирішальну роль визначенні факторизуємого стану. Без цих нормувань ми не отримуємо стан, що факторизується. Для складової системи з двох спинів, що факторизується стан запишеться так,

$$|\text{факторизується стан}\rangle = \{\alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle\} \otimes \{\beta_u |u\rangle + \beta_d |d\rangle\},$$

де перший множник представляє стан спина Олени, а другий множник представляє стан спина Іванушки. Розкриваючи дужки та вводячи складові позначенням, запишемо праву частину вищенаведеного рівняння так,

$$\alpha_u \beta_u |uu\rangle + \alpha_u \beta_d |ud\rangle + \alpha_d \beta_u |du\rangle + \alpha_d \beta_d |dd\rangle. \tag{6.96}$$

Головною особливістю факторизуемого стану є те, що кожна підсистема поводить незалежно один від одного. Якщо Іванко робить щось зі своєю власною підсистемою, то результат буде такий самий, як було б, якби підсистеми Оленки не існувало. Те саме, звичайно, справедливе і для Оленки.

Вправа 6.2: Покажіть, що якщо виконуються дві умови нормування (6.95), то вектор стану рівняння (6.96) також виявляється нормованим. Іншими словами, покажіть, що для цього твору станів нормування загального вектора стану не накладає додаткових обмежень на коефіцієнти α та β .

Я згадаю тут, що тензорний твір (який також називаються простір тензорного твору або просто простір, що факторизується) і факторизований стан це дві різні речі, незважаючи на схожість у назві. Тензорне твір є векторним простором вивчення складних систем. А стан, що факторизується, є вектором стану (у цьому просторі). Це один із багатьох векторів станів, які населяють простір тензорного твору. Як ми побачимо, більшість векторів станів у просторі тензорного твору не є факторизованими станами (а є заплутаними станами).

6.6. Підрахунок параметрів для прямого добутку станів

Розглянемо число параметрів, яке потрібно, щоб повністю визначити стан, що факторизується. Кожен множник вимагає двох комплексних чисел (α_u і α_d для Оленочки, β_u та β_d для Іванушки), а це значить, нам потрібні всього чотири комплексні числа. Це еквівалентно восьми дійсним параметрам. Но нагадаємо, що є також дві умови нормування, наведені в рівняннях (6.95), що зменшує число параметрів на два. Крім того, загальні фази кожного стану не мають фізичного сенсу (ще мінус два параметри). Так що загальна кількість речових параметрів дорівнює чотирьом: $8 - 2 - 2 = 4$. Це не дивно: необхідно два параметри, щоб описати стан одичного спина, так що дві незалежні спини вимагають чотири параметри для свого опису.

6.7. Заплутані стани

Принципи квантової механіки дозволяють скласти базові вектори. І таке додавання, в загальному випадку, дає результат, який не зводиться до того, що ми отримали розглядаючи стан, що факторизується. Найбільш загальний вектор у складовому просторі станів (двох спинів) є

$$\psi_{uu} |uu\rangle + \psi_{ud} |ud\rangle + \psi_{du} |du\rangle + \psi_{dd} |dd\rangle,$$

де ми використовували символи ψ (замість α та β) для представлення комплексних коефіцієнтів. Знову ж таки, ми маємо чотири комплексні числа, але цього разу у нас є лише одна умова нормування,

$$\psi_{uu}^* \psi_{uu} + \psi_{ud}^* \psi_{ud} + \psi_{du}^* \psi_{du} + \psi_{dd}^* \psi_{dd} = 1,$$

і лише одна загальна фаза, яку можна ігнорувати. Результатом є те, що найзагальніший стан двоспінової системи характеризується шістьма дійсними параметрами. Очевидно, що простір станів багатший за ті факторизовані стани, які можуть бути приготовлені незалежно один від одного Іванком і Оленкою. Існує щось ще. І це називається *заплутаність*.

Заплутаність не є все-нічого властивість. Деякі стани є більш заплутаними, ніж інші. Наведений приклад максимально заплутаного стану - стану, яке настільки заплутано наскільки це можливо. Такий стан називається *синглетним* станом, і його можна записати у такому вигляді

$$|\text{синглет}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|ud\rangle - |du\rangle).$$

Синглетний стан не може бути записаний як факторизований стан. Те саме вірно і для триплетних станів,

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|ud\rangle + |du\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|uu\rangle + |dd\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|uu\rangle - |dd\rangle),$$

які також максимально заплутані. Причина, через яку ці стани називаються синглетним і триплетним, буде пояснена пізніше.

Вправа 6.3: Доведіть, що стан |синглет⟩ не може бути записаний як прямий добуток станів.
Підказка: порівняти з виразом (6.96) і спробувати знайти відповідні коефіцієнти.

Що такого є в максимально заплутаних станах, що робить їх такими привабливими? Відповідь можна сформулювати у двох твердженнях:

- Заплутаний стан є повним описом комбінованої системи. Нічого більшого не може бути відомо про таку систему.
- У максимально заплутаному стані нічого не відомо про складові частини.

Як це може бути? Як ми можемо знати стільки, скільки можливо знати про систему Оленка-Іванушка з двох спинів і при цьому нічого не знати про окремі спини, її складові компоненти? Це таємниця заплутаності, і я сподіваюся, що до кінця цієї лекції ви зрозумієте правила гри, навіть якщо глибинна природа заплутаності залишиться парадоксальною.

6.8. Спостережені для Оленочки та для Іванушки

Досі ми обговорювали простір станів двоспінової системи Оленка-Іванушка, але не відповідні спостерігаються. Деякі з таких спостерігаються очевидні, навіть якщо їхнє математичне уявлення немає. Зокрема, з використанням своїх апаратів \mathcal{A} і \mathcal{B} , Оленка та Іванко можуть виміряти компоненти їх спинів:

$$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$$

i

$$\tau_x, \tau_y, \tau_z.$$

Як ці спостерігаються представлені у вигляді ермітових операторів у композитному просторі станів? Відповідь проста. Оператори Іванушки діють на спинових станах Іванушки точно так, як вони б діяли, якби ні Оленка ні її спин ніколи не з'являлися. Те саме стосується і Оленки. Давайте розглянемо, як спінові оператори впливають на стани одиничного спина. По-перше, давайте подивимося на спин Оленки:

$$\begin{aligned}\sigma_z |u\rangle &= |u\rangle \\ \sigma_z |d\rangle &= -|d\rangle \\ \sigma_x |u\rangle &= |d\rangle \\ \sigma_x |d\rangle &= |u\rangle \\ \sigma_y |u\rangle &= i|d\rangle \\ \sigma_y |d\rangle &= -i|u\rangle.\end{aligned}\tag{6.97}$$

Звичайно, установка Іванушки ідентична установці Оленочки, так що ми можемо написати паралельний набір рівнянь, що показує, як компоненти τ діють на стани спини Іванушки:

$$\begin{aligned}\tau_z |u\rangle &= |u\rangle \\ \tau_z |d\rangle &= -|d\rangle \\ \tau_x |u\rangle &= |d\rangle \\ \tau_x |d\rangle &= |u\rangle \\ \tau_y |u\rangle &= i|d\rangle \\ \tau_y |d\rangle &= -i|u\rangle.\end{aligned}\tag{6.98}$$

Тепер давайте розглянемо, як слід визначати оператори, коли вони діють

стану тензорного твору, $|uu\rangle$, $|ud\rangle$, $|du\rangle$ і $|dd\rangle$. Відповідь полягає в тому, що, коли σ діє, то цей оператор просто ігнорує ту половину комбінованого позначення, яке відноситься до станів спина Іванушки. Є багато можливих комбінацій операторів та станів, але я оберу кілька випадковим чином. Ви можете записати інші, або переглянути їх у додатку. Наимер, починаючи з операторів Оленки, знаходимо, що

$$\begin{aligned}
 \sigma_z |uu\rangle &= |uu\rangle \\
 \sigma_z |du\rangle &= -|du\rangle \\
 \sigma_x |ud\rangle &= |dd\rangle \\
 \sigma_x |dd\rangle &= |ud\rangle \\
 \sigma_y |uu\rangle &= i|du\rangle \\
 \sigma_y |du\rangle &= -i|uu\rangle \\
 \tau_z |uu\rangle &= |uu\rangle \\
 \tau_z |du\rangle &= |du\rangle \\
 \tau_x |ud\rangle &= |uu\rangle \\
 \tau_x |du\rangle &= |dd\rangle \\
 \tau_y |uu\rangle &= i|ud\rangle \\
 \tau_y |dd\rangle &= -i|du\rangle.
 \end{aligned} \tag{6.99}$$

Знову ж таки, правило таке, що компоненти оператора спина Оленки діють тільки на ту половину складової системи, яка відноситься до станів спина Оленки. Половина Іванушки залишається пасивним спостерігачем, який не бере жодної участі. З погляду математики, коли σ_x , σ_y або σ_z діє, то половина спиного стану, що відноситься до Іванушки, не змінюється. А коли оператор спина Іванушки τ діє, то половина Оленочки так само пасивна.

Ми звертаємось трохи вільно з нашими позначеннями. Вектори у просторі тензорного твору є нові вектори, побудовані з двох підпространств. Технічно, те саме вірно і для операторів. Якби ми були педантичним, ми наполягали б на написанні σ_z і τ_x як $\sigma_z \otimes I$ і $I \otimes \tau_x$, відповідно, де I є одиничний оператор (що діють на іншу частину системи). Насправді, ми

можемо виділити дві важливі властивості операторів тензорного твору, переписавши рівняння

$$\sigma_z |du\rangle = -|du\rangle \quad (6.100)$$

як

$$\begin{aligned} (\sigma_z \otimes I) (|d\rangle \otimes |u\rangle) &= (\sigma_z |d\rangle \otimes I |u\rangle) \\ &= (-|d\rangle \otimes |u\rangle). \end{aligned} \quad (6.101)$$

Цей запис є громіздким, і ми, як правило, будемо використовувати простішу мову рівняння (6.100). Проте мова рівняння (6.101) дозволяє прояснити дві речі:

1. Складовий оператор $\sigma_z \otimes I$ діє на складовий вектор $|d\rangle \otimes |u\rangle$ і дає новий складовий вектор $-|d\rangle \otimes |u\rangle$.
2. Ліва половина (половина Оленки) складового оператора впливає лише на її половину складового вектора. Крім того, половина Іванушки оператора впливає лише на свою половину вектора.

У наступному розділі нам буде більше сказати про складових операторів. Крім того, в лекції 7, мова рівняння (6.101) допоможе нам зрозуміти, як працювати з тензорними творами у компонентній формі.

Вправа 6.4: Використовуйте матричну форму для операторів σ_z , σ_x та σ_y та вектор-стовпці для $|u\rangle$ та $|d\rangle$ для того, щоб перевірити (6.97). Потім використовуйте (6.97) та (6.98) та запишіть рівняння, які були опущені у (6.99). Використовуйте програму, щоб перевірити ваші відповіді.

Вправа 6.5: Доведіть такі теореми:

- Коли будь-який спиновий оператор Оленочки чи Іванушки діє на прямий добуток станів, то результат залишиться прямим твором (можливо, інших станів).
- Покажіть, що в прямому добутку станів очікуване значення будь-яких компонентів векторів спинів $\vec{\sigma}$ або $\vec{\tau}$ в точності таке саме як воно було б у разі відповідних односпінових станів.

Ця остання вправа показує щось важливе про факторизовані стани. У факторизуємом стані, кожне передбачення щодо однієї половини системи (наприклад, підсистеми Іванушки) точно збігається з передбаченням, яке можна зробити у відповідній односпіновій теорії. Те саме відноситься і до іншої половини системи.

Прикладом цієї властивості станів, що факторизуються, є те, що в лекції 3 я назвав *принцип спінової поляризації*. Цей принцип можна так сформулювати:

Для будь-якого стану одного спина, є якийсь напрямок, для якого спин дорівнює +1.

Як я вже пояснював, це означає, що середні значення компонентів задовольняють рівняння

$$\langle \sigma_x \rangle^2 + \langle \sigma_y \rangle^2 + \langle \sigma_z \rangle^2 = 1, \quad (6.102)$$

яке говорить нам, що не всі середні значення можуть дорівнювати нулю. Цей факт має місце також для будь-яких факторизованих станів.

Тим не менш, це не вірно для заплутаного стану |синглет>. Справді, для |синглет> права частина рівняння (6.102) дорівнює нулю, як ми покажемо далі.

Нагадаємо, що заплутаний стан |синглет> визначається як

$$|\text{синглет}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|ud\rangle - |du\rangle).$$

Давайте обчислимо очікувані значення σ у цьому стані. Ми маємо все необхідне для цього. По-перше, давайте розглянемо σ_z :

$$\langle\sigma_z\rangle = \langle\text{синглет}|\sigma_z|\text{синглет}\rangle = \langle\text{синглет}|\sigma_z\frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle).$$

Ось де нагоді рівняння (6.99) (разом з вправою 6.4, яке завершує відповідний набір рівнянь!). Ці рівняння показують нам, як σ_z діє кожен базисний вектор. Результат є,

$$\langle\text{синглет}|\sigma_z|\text{синглет}\rangle = \langle\text{синглет}|\frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle + |du\rangle).$$

або

$$\langle\sigma_z\rangle = \frac{1}{2} (|ud\rangle - |du\rangle) (|ud\rangle + |du\rangle).$$

Швидкий аналіз показує, що вираз зверху дорівнює нулю. Далі, давайте розглянемо σ_x :

$$\langle\sigma_x\rangle = \langle\text{синглет}|\sigma_x|\text{синглет}\rangle = \langle\text{синглет}|\sigma_x\frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle).$$

або

$$\langle\sigma_x\rangle = \frac{1}{2} (|ud\rangle - |du\rangle) (|dd\rangle - |uu\rangle).$$

Знову цей вираз дає нуль. Нарешті, подивимося на σ_y :

$$\langle \sigma_y \rangle = \langle \text{синглет} | \sigma_y | \text{синглет} \rangle = \frac{1}{2} (|ud\rangle - |du\rangle) (i|dd\rangle + i|uu\rangle).$$

Як ви, можливо, знову здогадалися нуль. Таким чином, ми показали, що для синглетного стану

$$\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle = \langle \sigma_z \rangle = 0,$$

та й взагалі всі очікувані значення σ дорівнюють нулю. Само собою зрозуміло, те саме вірно і для очікуваних значень τ . Ясно, що стан $|\text{синглет}\rangle$ сильно відрізняється від стану, що факторизується. Що це все говорить про виміри, які ми можемо виконати?

Якщо очікуване значення компонент σ дорівнює нулю, це означає, що експериментальний результат однаково ймовірно, буде $+1$ або -1 . Іншими словами, результат абсолютно невизначений. Навіть якщо ми точно знаємо вектор стану, $|\text{синглет}\rangle$, ми все одно нічого не знаємо про результати вимірювання проекції спина на якусь вісь.

Можливо, це означає, що стан $|\text{синглет}\rangle$ в якомусь сенсі не повно, тобто є якісь властивості системи, які ми не виміряли. Зрештою, раніше ми бачили абсолютно класичний приклад, в якому Оленка та Іванко нічого не знали про свої монети, поки вони насправді не подивилися на них. У чому відмінність квантової версії?

У нашому прикладі “класичного переплутування” за участю Оленки, Іванушки та Баби-яги, цілком ясно, що існує інформація про систему, яку ми могли б дізнатися (наприклад, порушуючи правила та піддивившись яка монетка була в якій руці у Баби-яги). При цьому нічого б не змінилося в стані монет (ні їх номінал, ні те, кому дісталася якась монета), тому що класичні виміри можуть бути як завгодно слабкими.

Чи можуть бути так звані приховані змінні у квантовій системі? Відповідь у тому, що відповідно до правил квантової механіки, немає нічого понад те, що закладено у векторі стані системи – у разі у $|\text{синглет}\rangle$. Вектор стану настільки повно описує систему, як це можна зробити. Отже, схоже, що в квантовій механіці ми можемо знати все про складну систему -

все, що можна знати в принципі - і все-таки нічого не знати про її складові частини. Це справжня дивина заплутаності, яка так турбувала Ейнштейна.

6.9. Складові спостережувані

Давайте представимо квантово-механічну установку Оленка - Іванушка - Баба-яга. Роль Баби-яги полягає у підготовці двох спинів у заплутаному стані |синглет⟩. Потім, не дивлячись на спини (пам'ятайте, що квантовий вимір не є слабким і, тому, як правило змінює стан системи), вона дає один спін Оленці та один спін Іванкові. Хоча Оленка та Іванка точно знають, в якому стані перебуває об'єднана система, вони не можуть передбачити нічого про результати вимірювань, виконані з їх підсистемами (поодинокими спинами).

Но, звичайно, знання про стан складної системи має сказати їм щось, навіть якщо стан підсистем сильно заплутаний. І справді це так. Однак, щоб зрозуміти, що саме ми знаємо, ми повинні розглядати більш широке сімейство спостережуваних, ніж ті, які Оленка та Іванко можуть виміряти окремо, використовуючи лише свій власний детектор. Як з'ясовується, є спостерігаються, які можуть бути виміряні лише за допомогою обох детекторів. Результати таких експериментів можуть стати відомі Оленці та Іванці, тільки після того, як вони зберуться разом і звірять результати своїх вимірювань.

Спочатку розглянемо питання про те, чи можуть Оленка та Іванка одночасно виміряти свої власні спостережувані. Ми бачили, що є величини, які можуть бути одночасно виміряні. Зокрема, дві спостережувані, які не комутують, не можуть бути одночасно виміряні, без того, щоб такі вимірювання не інтерферували один з одним (наприклад, результат таких вимірювань може залежати від порядку, в якому проводяться вимірювання). Але у випадку з Оленкою та Іванком, як легко бачити, кожна компонента σ комутує з кожною компонентою τ . Це загальний факт про тензорні твори. Оператори, що діють окремо на кожен множник, комутують один з одним. Таким чином, Оленка може робити будь-які виміри з її спином, а Іванко може робити будь-який вимір з його спином, без того, щоб впливати на експеримент іншого.

Припустимо, що Оленка вимірює σ_z , а Іванушки вимірює τ_z , а потім вони перемножують результати. Інакше кажучи, вони домовилися виміряти твір $\tau_z\sigma_z$.

Такий твір є спостерігається, який, з точки зору математики діє так: Спочатку оператор σ_z діє на вектор стану, а потім τ_z діє на результат. Майте на увазі, що це лише математичні операції, які визначають новий оператор: вони відрізняються від фактичного виконання фізичних вимірів. Вам не потрібний пристрій для множення двох операторів; вам просто потрібен олівець та папір. Давайте подивимося, що станеться, якщо ми використовуємо твір $\tau_z\sigma_z$ до синглетного стану $|\text{синглет}\rangle$:

$$\tau_z\sigma_z \frac{1}{\sqrt{2}} (|ud\rangle - |du\rangle).$$

Спершу, використовуючи таблицю з (6.99), подіємо на цей стан оператором σ_z :

$$\tau_z\sigma_z \frac{1}{\sqrt{2}} (|ud\rangle - |du\rangle) = \tau_z \frac{1}{\sqrt{2}} (|ud\rangle + |du\rangle).$$

Далі діємо оператором τ_z і отримуємо

$$\tau_z\sigma_z \frac{1}{\sqrt{2}} (|ud\rangle - |du\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (-|ud\rangle + |du\rangle).$$

Зверніть увагу, що кінцевий результат звівся просто до зміни знака $|\text{синглет}\rangle$:

$$\tau_z\sigma_z |\text{синглет}\rangle = -|\text{синглет}\rangle.$$

Очевидно, що $|\text{синглет}\rangle$ є власним вектором $\tau_z\sigma_z$ з власним значенням -1 . Давайте розглянемо значення цього результату. Оленка вимірює σ_z , а Іванушки вимірює τ_z ; коли вони збираються разом і зрівняють результати, вони виявлять, що вони виміряли протилежні значення. Іноді, Іванко вимірює $+1$, а Оленка -1 . Інший раз Оленка вимірює $+1$, а Іванушки -1 . Но добуток цих двох вимірів завжди -1 .

Не повинно бути нічого дивного в цьому результаті. Вектор стану $|\text{синглет}\rangle$ є суперпозицією двох векторів, $|ud\rangle$ і $|du\rangle$, обидва з яких складаються з двох спинів з протилежними z компонентами. Ситуація загалом аналогічна класичному прикладу з участю Баби-яги та її двох монет.

Але зараз ми перейдемо до чогось, що не має класичного аналога. Припустимо, що замість того, щоб вимірювати z компоненти спинів, Оленка та Іванко вимірюють x компоненти. Щоб з'ясувати, як їх результати корелюють, ми повинні вивчити $\tau_x\sigma_x$.

Давайте подіємо цим твором на стан $|\text{синглет}\rangle$. Ось відповідні кроки:

$$\begin{aligned}\tau_x\sigma_x |\text{синглет}\rangle &= \tau_x\sigma_x \frac{1}{\sqrt{2}} (|ud\rangle - |du\rangle) \\ &= \tau_x \frac{1}{\sqrt{2}} (|dd\rangle - |uu\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|du\rangle - |ud\rangle)\end{aligned}$$

або просто

$$\tau_x\sigma_x |\text{синглет}\rangle = -|\text{синглет}\rangle.$$

Тепер це трохи дивно: $|\text{синглет}\rangle$ також є власним вектором твору $\tau_x\sigma_x$ з тим самим значенням -1 . Набагато менш очевидним є з простого погляду на $|\text{синглет}\rangle$, що x компоненти двох спинів завжди протилежні. Проте щоразу, коли Оленка та Іванушки вимірюють їх, вони знаходять, що σ_x і τ_x мають протилежні значення. Зараз вже ви, ймовірно, не будете здивовані, дізнавшись, що те саме вірно і для y компонентів.

Вправа 6.6: Припустимо, що Баба-яга приготував два спини в синглетному стані. Цього разу, Іванко вимірює τ_y , а Оленка вимірює σ_x . Чому одно очікуване значення $\sigma_x\tau_y$?

Що отриманий результат говорить про кореляцію між результатами цих

двох вимірів? Підказка: Порівняти з очікуваним значенням окремо кожного оператора, σ_x і τ_y , у цьому ж синглетному стані.

Вправа 6.7: Баба-яга підготувала спини в іншому стані, званому $|T_1\rangle$, де

$$|T_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|ud\rangle + |du\rangle).$$

У цьому прикладі T використовується для позначення *триплету*. Такі триплетні стани зовсім відрізняються від станів у випадку з орлом та решкою. Чому рівні очікувані значення операторів $\sigma_z\tau_z$, $\sigma_x\tau_x$ і $\sigma_y\tau_y$?

Вправа 6.8: Зробіть те саме для інших заплутаних триплетних станів,

$$|T_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|uu\rangle + |dd\rangle)$$

$$|T_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|uu\rangle - |dd\rangle),$$

та поясніть результат.

І, нарешті, давайте розглянемо ще одну спостережувану. Вона не може бути виміряна за допомогою незалежних вимірів, які можуть виконати окремо Оленка та Іванка з їхніми індивідуальними апаратами, навіть якщо вони потім зберуться разом і звірять результати. Тим не менш, квантова механіка стверджує, що якийсь апарат може бути побудований для вимірювання такої спостережуваної. Ноблюдаемую, яку я маю на увазі, можна розглядати як звичайне скалярне твір вектор-операторів $\vec{\sigma}$ і $\vec{\tau}$:

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} = \sigma_x\tau_x + \sigma_y\tau_y + \sigma_z\tau_z,$$

Можна було б подумати, що значення цієї спостережуваної можна знайти, якщо Іванко вимірює всі компоненти τ , у той час як Оленка вимірює всі компоненти σ ; тоді вони могли б помножити компоненти та скласти результати. Проблема полягає в тому, що Іванко не може одночасно виміряти окремі компоненти τ , тому що вони не комутують. Так само, Оленка не може виміряти більше однієї компоненти σ за раз. Для вимірювання скалярного твору $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$, повинен бути побудований новий вид пристрою, а саме такий, який вимірює $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$ без вимірювання окремих компонентів. Не зовсім очевидна, як це може бути зроблено. Ось конкретний приклад того, як такий вимір може бути виконано: деякі атоми мають спини, які описуються таким же чином, як і спини електронів. Коли два з цих атомів близькі один до одного - наприклад, два сусідні атоми в кристалічній решітці - гамільтоніан залежатиме від спинів. У деяких ситуаціях внесок у гамільтоніан буде пропорційний скалярному твору сусідніх спинів, $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$. Якщо це так, то вимір $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$ є еквівалентним виміру енергії пари атомів. Вимірювання цієї енергії є одиничним виміром складеного оператора і не тягне за собою вимір окремих компонентів спинів атомів.

Вправа 6.9: Доведіть, що чотири вектори $|\text{синглет}\rangle$, $|T_1\rangle$, $|T_2\rangle$ і $|T_3\rangle$ є власними векторами твору $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$. Чому рівні відповідні власні значення?

Проаналізуйте результати цієї останньої вправи. Ви тепер розумієте, чому один із цих векторів станів називається синглет, а решта трьох називається триплет? Причина полягає в тому, що, якщо ви подивитеся на їхнє ставлення до оператора $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$, то побачите, що синглет є власним вектором з одним власним значенням, а три вектори триплету також є власними векторами, але із загальним власним значенням, тобто з виродженим власним значенням.

Ось гарна вправа, яка поєднує в собі концепцію заплутаності з поняттями часу та зміни з лекції. З його допомогою можна проаналізувати ідеї унітарної еволюції у часі та значення гамільтоніану.

Вправа 6.10: Система двох спинів описується таким гамільтоном:

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

Чому рівні можливі значення енергії системи та які власні вектори стану системи?

Припустимо, початковий стан системи $|uu\rangle$. Який буде стан у наступні моменти часу? Дайте відповідь на те саме питання у разі наступних початкових станів: $|ud\rangle$, $|du\rangle$ и $|dd\rangle$.

7. Ще про заплутаність

Hilbert's Place, summer 1935:

Two scruffy regulars come through the swinging doors, in the midst of an intense conversation. The one with the wild grayish hair and frayed sweater says, "No, I will not accept your theory unless you can tell me what the elements of physical reality are."

The other one looks around, throws up his hands in obvious frustration, and says to Art and Lenny, "There he goes again. Elements of physical reality, EPRs, EPRs, that's all he ever thinks about. Albert, stop being obsessive and just accept the facts."

"Never! I cannot accept that one can know everything there is to know about a thing, and still know nothing about its parts. That's utter nonsense, Niels."

"Sorry, Albert. That's just the way it is. Here, let me buy you a beer."

У цій лекції ми розглянемо заплутаність докладніше. Для цього нам знадобляться деякі додаткові математичні інструменти. По-перше, ми дізнаємося, як працювати з тензорними творами в компонентній формі. Потім ми дізнаємося про нового оператора, який називається матрицею густини. Ці інструменти не за своєю природою важко освоюються, але вони вимагають деякого терпіння та деякої кількості індексів для роботи.

7.1. Математичний відступ: Компоненти тензорного твору

У лекції 6, ми пояснили, як сформуванати тензорний твір двох векторних просторів за допомогою абстрактних позначень бра, кетів та оператор подібно до σ_z . Як це все уявити у вигляді стовпців, рядків та матриць?

Побудова тензорних творів із матриць та векторів-стовпців не є складною. Правила прості, як побачимо нижче. Хитрість полягає в розумінні того, чому ці правила працюють, чому вони дозволяють нам будувати

матриці та вектор-стовпці, які мають властивості, які нам необхідні. Ми вирішуватимемо це питання двома різними способами. По-перше, ми будуватимемо складові оператори, використовуючи перевірений і правильний метод, який ми розробили в лекції 3. Потім ми покажемо вам, як будувати складові оператори безпосередньо з їхніх складників (операторів).

7.1.1. Побудова матриці тензорного твору з перших принципів

Повернемося до лекції 3, де було показано, як написати будь-яку \mathbf{M} у матричній формі, по відношенню до конкретного базису. Знайдіть час і погляньте на рівняння від (3.18) до (3.21). У тому розділі ми розраховували чисельні значення m_{jk} матричних елементів оператора \mathbf{M} за допомогою виразу

$$m_{jk} = \langle j | \mathbf{M} | k \rangle, \quad (7.103)$$

де $|j\rangle$ і $|k\rangle$ є базисні вектори. Кожна $|j\rangle$, $|k\rangle$ комбінація породжує матричний елемент.

Наш план полягає в тому, щоб застосувати цю формулу до деяких операторів, які отримують як тензорний твір двох інших операторів. Для стислості ми будемо такий оператор називати *оператор типу тензорного твору*. Побачимо, що в нас вийде. В силу прийнятих двох-індексних позначень базису тензорного твору, “сендвіч” в отриманих рівняннях трохи відрізнятиметься від того, що у формулі (7.103). На кожному кінці “сендвіча”, ми перебиратимемо базисні вектори $|uu\rangle$, $|ud\rangle$, $|du\rangle$ і $|dd\rangle$. Для простоти ми будемо використовувати оператор $\sigma_z \otimes I$ як приклад, де I одиничний оператор. Як ми вже бачили, $\sigma_z \otimes I$ діє на половину вектора стану Оленки оператором σ_z і абсолютно нічого не робить з половиною Іванушки. Оскільки ми працюємо в 4-мірному векторному просторі, матриця буде 4×4 . Опускаючи знак множення \otimes , ми можемо записати матрицю так:

$$\sigma_z \otimes I = \begin{pmatrix} \langle uu | \sigma_z I | uu \rangle & \langle uu | \sigma_z I | ud \rangle & \langle uu | \sigma_z I | du \rangle & \langle uu | \sigma_z I | dd \rangle \\ \langle ud | \sigma_z I | uu \rangle & \langle ud | \sigma_z I | ud \rangle & \langle ud | \sigma_z I | du \rangle & \langle ud | \sigma_z I | dd \rangle \\ \langle du | \sigma_z I | uu \rangle & \langle du | \sigma_z I | ud \rangle & \langle du | \sigma_z I | du \rangle & \langle du | \sigma_z I | dd \rangle \\ \langle dd | \sigma_z I | uu \rangle & \langle dd | \sigma_z I | ud \rangle & \langle dd | \sigma_z I | du \rangle & \langle dd | \sigma_z I | dd \rangle \end{pmatrix} \quad (7.104)$$

Для обчислення цих матричних елементів, ми могли б дозволити оператору σ_z і оператору I діяти або ліворуч або праворуч. Давайте припустимо, що σ_z діє ліворуч, а I діє праворуч. Оскільки I нічого не робить, то все, що нас цікавить це як діє оператор σ_z на відповідний бра вектор ліворуч від нього. Причому, у цьому бра вектор σ_z діє тільки на крайню ліву мітку стану (тобто на підпростір станів Оленки). Використовуючи правила, які ми вже наводили (див. формули (6.97) та (6.98)), ми можемо виконати всі ці дії оператором σ_z і отримати матрицю скалярних творів:

$$\sigma_z \otimes I = \begin{pmatrix} \langle uu | uu \rangle & \langle uu | ud \rangle & \langle uu | du \rangle & \langle uu | dd \rangle \\ \langle ud | uu \rangle & \langle ud | ud \rangle & \langle ud | du \rangle & \langle ud | dd \rangle \\ -\langle du | uu \rangle & -\langle du | ud \rangle & -\langle du | du \rangle & -\langle du | dd \rangle \\ -\langle dd | uu \rangle & -\langle dd | ud \rangle & -\langle dd | du \rangle & -\langle dd | dd \rangle \end{pmatrix}. \quad (7.105)$$

Оскільки ці власні вектори ортонормовані, то ця матриця зводиться до наступного:

$$\sigma_z \otimes I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.106)$$

Як ми можемо записати власні вектори $|uu\rangle$, $|ud\rangle$, $|du\rangle$ та $|dd\rangle$ у вигляді векторних стовпців? На даний момент я просто скажу вам, що ми представитимемо $|uu\rangle$ і $|du\rangle$ так

$$|uu\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |du\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7.107)$$

Давайте подивимося, що станеться, коли складовий оператор $\sigma_z \otimes I$ подіє на ці векторні стовпці. Помножуючи матрицю (7.106) на стовпець $|uu\rangle$ отримаємо

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

Іншими словами,

$$(\sigma_z \otimes I) |uu\rangle = |uu\rangle,$$

точно як ми і очікували. А що, якщо ми застосуємо ту саму матрицю до векторного стовпця $|du\rangle$ з рівняння (7.107)? Результат матричного множення буде $-|du\rangle$ як це має бути.

7.1.2. Побудова матриці тензорного твору з компонентів матриць співмножників

Описаний вище спосіб обчислення матричних елементів є досить загальним - він працює всім спостерігаються. Якщо нам потрібно побудувати тензорний твір двох операторів, і ми вже знаємо матричні елементи кожного з цих операторів окремо, ми можемо об'єднати їх безпосередньо. Ось правило для об'єднання 2×2 матриць для формування 4×4 матриці:

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11}B & A_{12}B \\ A_{21}B & A_{22}B \end{pmatrix} \quad (7.108)$$

або

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & A_{12}B_{11} & A_{12}B_{12} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & A_{12}B_{21} & A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & A_{22}B_{11} & A_{22}B_{12} \\ A_{21}B_{21} & A_{21}B_{22} & A_{22}B_{21} & A_{22}B_{22} \end{pmatrix}. \quad (7.109)$$

Те саме правило працює і для матриць довільного розміру. Цей вид матричного множення іноді називають твором Кронекера, термін, який стоується лише матриць - це матрична версія тензорного твору. Кронекера для двох матриць розміром 2×2 кожна, є матрицею розміру 4×4 і аналогічно для матриць довільного розміру. В цілому, твором Кронекера двох матриць розміром $m \times n$ і $p \times q$ буде матриця розміром $mp \times nq$.

Все це безпосередньо відноситься і до вектор-стовпчиків і векторів-рядків, які являють собою лише окремі випадки матриць. Тензорний добуток двох векторів-стовпчиків розміром 2×1 є вектор-стовпець розміром 4×1 . Якщо a і b є вектор-стовпці розміром 2×1 , їх тензорний твір виглядає так:

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} \\ a_{11}b_{21} \\ a_{21}b_{11} \\ a_{21}b_{21} \end{pmatrix}. \quad (7.110)$$

Давайте подивимося, як це допоможе Оленці та Іванці. По-перше, ми побудуємо чотири базові вектори для складового простору, тобто для простору тензорного твір, використовуючи базисні вектори підпросторів, $|u\rangle$ і $|d\rangle$ як будівельні блоки. Нагадаємо формули (2.16) (2.17) з лекції 2,

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

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

Якщо ми підставимо відповідні комбінації $|u\rangle$ і $|d\rangle$ у рівняння (7.110), то наші чотири вектор-стовпці розміром 4×1 набудуть такого вигляду,

$$\begin{aligned}
 |uu\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 |ud\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 |du\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 |dd\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{7.111}$$

Далі, ми використовуємо правило рівняння (7.109) для того, щоб об'єднати оператори σ_z і τ_x . З використанням формул (3.37) для матриць σ_z і τ_x це правило дає матрицю тензорного твору

$$\sigma_z \otimes \tau_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Давайте порівняємо отриманий результат із твором σ_x і τ_z ,

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

Зверніть увагу, що $\sigma_x \otimes \tau_z$ не те саме, що $\sigma_z \otimes \tau_x$. Це природно, тому що ці два складові оператори є різними спостережуваними.

Все поки що йде нормально. Але далі, ми побачимо щось цікавіше. За допомогою кількох вправ, ми постараємося переконати вас, що твір Кронекера дійсно є тензорним твором матриць, іншими словами, що половина матриці, яка відноситься до підпростору Оленки, впливає тільки на її половину вектор-стовпця, і аналогічно для Іванушки. Це не дуже очевидно через те, як саме твір Кронекер змішує елементи своїх будівельних блоків.

Як приклад, давайте подивимося, як складовий оператор $\sigma_z \otimes \tau_x$ діє на базовий вектор простору тензорного твору $|ud\rangle$. Переводячи абстрактні позначення в матричні позначення, отримаємо

$$\sigma_z \otimes \tau_x |ud\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Але вектор-стовпець у правій стороні відповідає базовому вектору $|uu\rangle$ у рівняннях (7.111). Переводячи назад в абстрактний запис, маємо

$$(\sigma_z \otimes \tau_x) |ud\rangle = |uu\rangle.$$

Це саме те, що ми хочемо - матричне уявлення наших абстрактних операторів та векторів станів, яке точно відображає їхню поведінку (властивості).

Наступна вправа допоможе викристалізувати ідею про те, що σ -половина тензорного твору $\sigma \otimes \tau$ зачіпає лише половину вектора стану, що відноситься до підпростору Оленочки і що τ -половина впливає тільки на Іванка. Далі йде вправа, яка розвиває практику роботи з матричними елементами оператора, якщо припустити, що ми вже знаємо, як оператор діє на базисні вектори.

Вправа 7.1: Запишіть тензорний твір $I \otimes \tau_x$ у матричному вигляді та застосуйте отриману матрицю до кожного з наступних векторів стовпців $|uu\rangle$, $|ud\rangle$, $|du\rangle$ і $|dd\rangle$. Покажіть, що та половина векторів стану, яка доступна Оленці, не змінюється у всіх розглянутих випадках. Нагадаю, що $I \in 2 \times 2$ одиничною матрицею.

Вправа 7.2: Обчисліть матричні елементи для тензорного твору $\sigma_z \otimes \tau_x$ шляхом складання скалярних творів, як ми робили в рівнянні (7.104).

Третя вправа трохи втомлює, але насправді вона допомагає все розставити на свої місця. Розглянемо рівняння

$$(A \otimes B)(a \otimes b) = (Aa \otimes Bb). \quad (7.112)$$

Як і в рівняннях (7.109) і (7.110), A і $B \in 2 \times 2$ матриці (або оператори), а a і b являють собою 2×1 вектор-стовпці. Вправа полягає в тому, щоб уявити дане рівняння в матричному вигляді та показати, що ліва сторона відповідає правій стороні.

Вправа 7.3:

1. Перепишіть матричне рівняння (7.112) у вигляді компонентів, замінюючи A , B , a і b відповідними матрицями та вектор-стовпцями з рівнянь (7.109) та (7.110).
2. Виконайте матричне множення Aa на Bb у правій стороні рівняння (7.112). Переконайтеся, що результат є матрицею розмірності 4×1 .
3. Розкрийте всі три твори Кронекера.

4. Перевірте кількість рядків та стовпців у кожному творі Кронекера:

$$\bullet A \otimes B : 4 \times 4$$

$$\bullet a \otimes b : 4 \times 1$$

$$\bullet Aa \otimes Bb : 4 \times 4$$

5. Виконайте матричне множення в лівій стороні рівняння (7.112), що дасть 4×1 вектор-стовпець. У кожному рядку має вийти сума чотирьох доданків.

6. І, нарешті, переконайтеся, що результуючі векторні стовпці ліворуч і праворуч у рівнянні (7.112) ідентичні один одному.

7.2. Математичний відступ: Зовнішній твір

Маючи бра $\langle \phi |$ і кет $|\psi\rangle$ вектори, ми можемо утворити скалярне твір $\langle \phi | \psi \rangle$. Як ми бачили, скалярне твір є комплексне число. Тим не менш, є ще один вид твору, який називається зовнішнім твором, який записується так

$$|\psi\rangle \langle \phi|.$$

Зовнішній твір не є числом; це лінійний оператор. Давайте розглянемо, що відбувається, коли $|\psi\rangle \langle \phi|$ діє на інший кет $|A\rangle$:

$$|\psi\rangle \langle \phi| |A\rangle.$$

У цьому прикладі ми використовуємо інтервал замість дужок, щоб показати групування операцій. Пам'ятайте, що всі операції з бра, кет та лінійними операторами є асоціативними, що означає, що ми можемо згрупувати їх так

як нам подобається, доки ми зберігаємо початковий порядок зліва направо. Дія зовнішнього твору дуже проста і може бути визначена так

$$|\psi\rangle\langle\phi| |A\rangle \equiv |\psi\rangle \langle\phi|A\rangle.$$

Іншими словами, ми беремо скалярне твір $\langle\phi|$ з $|A\rangle$ (результат є комплексним числом) і множимо його на кет $|\psi\rangle$. Бракет позначення настільки зручні, що вони буквально змушують нас правильно виконувати дії. У цьому (і не лише) втілюється геній Поля Дірака. Легко довести, що зовнішній твір може також діяти на бра:

$$\langle B| |\psi\rangle\langle\phi| \equiv \langle B|\psi\rangle \langle\phi|.$$

Особливий випадок є зовнішнім продуктом кет з відповідним йому бра, $|\psi\rangle\langle\psi|$. За умови, що $|\psi\rangle$ нормований, цей оператор називається *оператором проектування* або просто *проектором*. Ось як він діє:

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

Зверніть увагу, що результат завжди є пропорційним $|\psi\rangle$. Проектор, так би мовити, проектує заданий вектор на напрямок, який визначається вектором $|\psi\rangle$. Ось деякі властивості проектора, які можна легко довести (пам'ятайте, що вектор стану $|\psi\rangle$ нормований на 1):

- Проектори є ермітовими операторами.
- Вектор $|\psi\rangle$ є власним вектором відповідного проектора з власним значенням 1:

$$|\psi\rangle\langle\psi| |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

- Будь-який вектор, ортогональний $|\psi\rangle$ є власним вектором із нульовим власним значенням. Таким чином, власні значення $|\psi\rangle \langle\psi|$ усі рівні 0 або 1, і існує лише один власний вектор із одиничним власним значенням. Цей власний вектор є $|\psi\rangle$.
- Квадрат проектора дорівнює проектору:

$$|\psi\rangle \langle\psi|^2 = |\psi\rangle \langle\psi|.$$

- Слід оператора (або будь-якої квадратної матриці) визначається як сума його (її) діагональних елементів. Використовуючи символ Tr для позначення сліду, ми можемо визначити слід оператора \mathbf{L} так,

$$Tr \mathbf{L} = \sum_i \langle i | \mathbf{L} | i \rangle,$$

що є сума діагональних елементів відповідної матриці. Слід проектора дорівнює 1. Це випливає з того, що слід ермітового оператора дорівнює сумі його власних значень.

- Якщо скласти всі проектори, відповідні базовим векторам, то вийде тотожний оператор (одиниця):

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = I. \tag{7.113}$$

І, нарешті, є дуже важлива теорема про проектор і очікувані значення. Середнє значення будь-якої \mathbf{L} у стані $|\psi\rangle$ дорівнює

$$\langle\psi| \mathbf{L} |\psi\rangle = Tr |\psi\rangle \langle\psi| \mathbf{L}. \tag{7.114}$$

Ось кроки довести цю теорему. Виберіть будь-який базис $|i\rangle$. Потім, використовуючи визначення сліду, напишіть

$$\text{Tr } |\psi\rangle \langle\psi| \mathbf{L} = \sum_i \langle i|\psi\rangle \langle\psi| \mathbf{L} |i\rangle.$$

Два множники у виразі під знаком суми це просто числа, так що ми можемо їх переставити (змінити порядок, в якому вони перемножуються),

$$\text{Tr } |\psi\rangle \langle\psi| \mathbf{L} = \sum_i \langle\psi| \mathbf{L} |i\rangle \langle i|\psi\rangle.$$

Виконуючи підсумовування та використовуючи властивість проєкторів на базисні вектори, $\sum_i |i\rangle \langle i| = I$ ми отримуємо

$$\text{Tr } |\psi\rangle \langle\psi| \mathbf{L} = \langle\psi| \mathbf{L} |\psi\rangle.$$

Права сторона є очікуване значення для спостережуваної, яка описується оператором \mathbf{L} .

7.3. Матриця щільності: Новий інструмент

Досі ми навчилися робити прогнози про систему, якщо ми знаємо точний квантовий стан системи. Але найчастіше ми не маємо повного уявлення про стан системи. Наприклад, припустимо, що Оленка приготувала спин з використанням пристрою, орієнтованого вздовж деякої осі. Вона дає спин Іванушці, але не каже йому що це була за вісь, уздовж якої був зорієнтований її апарат. Можливо, вона дала йому деяку часткову інформацію, наприклад, що вісь була або вздовж осі z або вздовж осі x , але вона відмовляється сказати йому більше, ніж це. Що залишається робити Іванкові? Як він може використати цю інформацію, щоб робити прогнози?

Іванко розмірковує так: Якщо Оленка підготувала спин у стані $|\psi\rangle$, то середнє значення будь-якої \mathbf{L} є

$$\text{Tr } |\psi\rangle \langle\psi| \mathbf{L} = \langle\psi| \mathbf{L} |\psi\rangle.$$

З іншого боку, якщо Оленка підготувала спина в стані $|\phi\rangle$, то середнє значення \mathbf{L} вже інше, а саме

$$\text{Tr } |\phi\rangle \langle\phi| \mathbf{L} = \langle\phi| \mathbf{L} |\phi\rangle.$$

Але що робити, якщо є можливість 50%, що вона приготувала стан $|\psi\rangle$ і можливість 50%, що вона приготувала стан $|\phi\rangle$? Очевидно, що очікуване значення буде

$$\langle\mathbf{L}\rangle = \frac{1}{2}\text{Tr } |\psi\rangle \langle\psi| \mathbf{L} + \frac{1}{2}\text{Tr } |\phi\rangle \langle\phi| \mathbf{L}.$$

Все, що ми робимо, це усереднюємо за "незнанням" Іванком того, що саме приготовлено Оленкою.

Але тепер ми можемо об'єднати всі члени в єдиний вираз, визначивши матрицю щільності ρ , яка кодує (не) знання Іванка. У цьому випадку матриця щільності є просто наполовину оператором проектування на $|\phi\rangle$ плюс половина оператора проектування на $|\psi\rangle$,

$$\rho = \frac{1}{2} |\psi\rangle \langle\psi| + \frac{1}{2} |\phi\rangle \langle\phi|.$$

Ми тепер закодували все (не) знання Іванушки про систему в єдиний оператор ρ . При цьому правило для обчислення середніх значень стає дуже простим:

$$\langle\mathbf{A}\rangle = \text{Tr } \rho \mathbf{L}. \quad (7.115)$$

Ми можемо узагальнити це правило. Припустимо, що Оленка каже Іванушці, що вона підготувала один із кількох станів - назовемо їх $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$, $|\phi_3\rangle$

і так далі. Крім того, вона вказує ймовірності P_1, P_2, P_3, \dots для кожного з цих станів. Іванко все ще може запакувати всі ці знання в матрицю щільності:

$$\rho = P_1 |\phi_1\rangle \langle \phi_1| + P_2 |\phi_2\rangle \langle \phi_2| + P_3 |\phi_3\rangle \langle \phi_3| + \dots$$

Крім того, він може використовувати вже відоме правило (7.115), щоб обчислити очікувані значення.

Коли матриця щільності відповідає одиничному стану, вона просто дорівнює проектору, який проектує цей стан. У цьому випадку ми говоримо, що стан є чистим. Чистий стан висловлює максимально можливе знання, яке Іванко може мати про квантову систему. Але більш загальному випадку, матриця щільності є сумішшю з кількох проекційних операторів. Тоді ми говоритимемо, що матриця щільності визначає *змішаний стан*.

Я використовував термін *матриця густини*, хоча, строго кажучи, ρ є оператором. Він стає матрицею лише, коли вибрано базис. Припустимо, що ми вибрали базис $|a\rangle$. Матриця щільності це не що інше як матричне уявлення оператора ρ у вибраному базисі:

$$\rho_{aa'} = \langle a | \rho | a' \rangle.$$

Якщо матричне уявлення оператора $\mathbf{L} \in L_{a',a}$, то рівняння (7.115) набуває такого вигляду,

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_{a,a'} L_{a',a} \rho_{a,a'}. \quad (7.116)$$

7.4. Заплутаність та матриця щільності

Класична фізика також має своє поняття чистих та змішаних станів, хоча вони не називаються цими іменами. Як ілюстрація, давайте розгля-

немо систему з двох частинок, що рухаються вздовж лінії. Відповідно до правил класичної механіки, ми можемо обчислити орбіти частинок, якщо відомі їх положення (x_1 і x_2) та імпульси (p_1 і p_2) у певний момент часу. Стан системи, таким чином, визначається чотирма числами: x_1 , x_2 , p_1 та p_2 . Якщо ми знаємо ці чотири числа, ми маємо настільки повний опис системи двох частинок наскільки це можливо. Ми можемо назвати такий стан чистим класичним станом.

Часто, однак, ми не знаємо точний стан, але маємо лише деяку ймовірну інформацію. Ця інформація може бути закодована в щільності ймовірності

$$\rho(x_1, x_2, p_1, p_2).$$

Класичний чистий стан є лише окремим випадком щільності ймовірності, в якій ρ відмінна від нуля лише в одній точці. Але в загальному плані, ρ буде розмиватись, і в цьому випадку ми могли б назвати це класичним змішаним станом. Коли ρ розмазується, це означає, що наші знання про стан системи є неповним. Чим більше розмивається ρ , тим більше наше незнання.

Одне має бути цілком очевидним із цього прикладу: якщо ви знаєте чистий стан для комбінованої системи двох частинок, то ви знаєте все про кожну частинку. Іншими словами, чистий стан для двох класичних частинок передбачає чистий стан для кожної з окремих частинок.

Але це саме те, що не справедливо у квантовій механіці, коли система заплутана. Стан складної квантової системи може бути абсолютно чистим, але кожна з його складових частин повинна бути описана як у змішаному стані. Іншими словами, знання про стан частини системи може не бути повним - у квантово-механічному сенсі - навіть тоді, коли знання про повну систему є повним.

Давайте візьмемо систему, що складається із двох частин A та B . Це може бути два спини або будь-яка інша складова система.

В цьому випадку ми будемо вважати, що Оленка має повне уявлення про стан комбінованої системи. Іншими словами, вона знає хвильову функцію

$$\Psi(a, b).$$

Немає нічого такого, чого б вона не знала про комбіновану систему. Але нехай Оленці зовсім не цікавий стан підсистеми B . Вона просто хоче знати якнайбільше про підсистему A так, щоб взагалі не стежити за станом підсистеми B . Вона вибирає \mathbf{L} , яка характеризує підсистему A , але ніяк не діє на підсистему B . Правило для обчислення середнього значення \mathbf{L} виглядає так,

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_{ab, a', b'} \Psi^*(a'b') L_{a'b', ab} \Psi(ab). \quad (7.117)$$

Це визначення правильне для довільного оператора. Однак, якщо оператор \mathbf{L} діє тільки на підсистему A , то він фактично не діє на b -індекс і ми можемо записати очікуване значення так:

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_{ab, a'} \Psi^*(a'b) L_{a', a} \Psi(ab). \quad (7.118)$$

Тепер Оленка може зібрати всі її знання, принаймні, з метою вивчення підсистеми A , у матриці ρ :

$$\rho_{aa'} = \sum_b \Psi^*(a'b) \Psi(ab). \quad (7.119)$$

Дивно, але рівняння (7.118) має такий самий вигляд, як і рівняння (7.116) для очікуваного значення у разі змішаного стану. Дійсно, тільки в особливому випадку, коли стан повної (складової) системи описується як стан, що факторизується, оператор ρ буде мати вигляд проєкційного оператора. Іншими словами, у загальному випадку, незважаючи на те, що складова система описується ідеально чистим станом, підсистема A має бути описана змішаним станом.

Звернемо увагу на дуже тонкий момент пов'язаний з позначеннями, які ми використовуємо для матриці щільності: у формулі (7.119) правий індекс ρ , тобто a' , відповідає комплексно сполученому вектору стану $\Psi^*(a'b)$ під знаком суми. Це є наслідком наступного правила

$$L_{aa'} = \langle a | \mathbf{L} | a' \rangle$$

для позначення матричних елементів оператора \mathbf{L} . Застосування цього правила до оператора матриці щільності

$$\rho = |\Psi\rangle \langle\Psi|$$

дає

$$\rho_{aa'} = \langle a | \Psi \rangle \langle \Psi | a' \rangle,$$

або

$$\rho_{aa'} = \Psi(a)\Psi^*(a').$$

7.5. Заплутаність двох спинів

Перш ніж вести вас у світ заплутаності, я дам вам просте визначення і вправу для швидкої розминки. Якщо Оленка має тільки один спин у відомому стані, її матриця щільності визначається так,

$$\rho_{aa'} = \psi^*(a')\psi(a).$$

Це рівняння говорить вам, як обчислити елемент матриці щільності Оленки. Якщо ми будемо використовувати відомий нам вже базис, пов'язаний з σ_z , то кожен індекс a і a' прийматиме значення “вгору” і “вниз”, так що Оленка має матрицю щільності 2×2 .

Вправа 7.4: Обчисліть матрицю щільності для наступного стану

$$|\Psi\rangle = \alpha |u\rangle + \beta |d\rangle.$$

Відповідь:

$$\psi(u) = \alpha; \quad \psi^*(u) = \alpha^*$$

$$\psi(d) = \beta; \quad \psi^*(d) = \beta^*$$

$$\rho_{a'a} = \begin{pmatrix} \alpha^* \alpha & \alpha^* \beta \\ \beta^* \alpha & \beta^* \beta \end{pmatrix}.$$

А тепер спробуйте підставити будь-які числа замість α і β . Не забудьте про нормування. Наприклад, візьміть $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $\beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Цей простий приклад є добрим способом зрозуміти властивості матриці щільності. Ви можете повернутися до нього, коли ми розглядатимемо складніший приклад заплутаного стану.

Припустимо, що ми знаємо хвильову функцію складової системи, наприклад,

$$\psi(a, b),$$

але ми цікавимося лише підсистемою Оленки. Іншими словами, ми хочемо стежити за всім, що Оленка може колись виміряти. Чи повинні знати всю хвильову функцію? Чи є якийсь спосіб, щоб позбавитись змінних Іванушки? Відповідь на останнє запитання позитивна. Так, ми можемо уявити повний опис того, що Оленка може виміряти, за допомогою матриці щільності ρ .

Розглянемо спостерігається \mathbf{L} підсистеми Оленки. Як і будь-яке інше спостерігається, ця, звичайно, може бути представлена у вигляді матриці:

$$L_{a'b',ab} = \langle a'b' | \mathbf{L} | ab \rangle.$$

Пам'ятайте, що для складової системи, пара ab , насправді є єдиним індексом, що використовується для позначення базисного вектора.

Коли ми говоримо, “ \mathbf{L} є спостережуваною Оленкою”, то це означає, що \mathbf{L} ніяк не діє на ту частину індексу, яка відноситься до Іванушки. Це накладає деякі обмеження на вигляд \mathbf{L} . Ідея полягає в тому, щоб відкинути будь-який матричний елемент, який змінює індекс села. Іншими словами, \mathbf{L} має спеціальний вигляд

$$L_{a'b',ab} = L_{a'a}\delta_{b'b}. \quad (7.120)$$

Цей просте на вигляд рівняння вимагає деякого пояснення, і ви, можливо, захочете переглянути матеріал про тензорні твори у компонентній формі, що викладено у Відступі про тензорні твори (розділ 6.1). Ліва частина рівняння є елементом матриці 4×4 . Кожен із двох індексів може приймати чотири різні значення: ui , ud , di , або dd . Що можна сказати про правий бік? Матричний елемент $L_{a'a}$ також має два індекси, але кожен з них може набувати лише двох різних значень: u або d . Насправді, той самий символ L відноситься до двох абсолютно різних матриць в кожній стороні рівняння (7.120).

На перший погляд, здається, ніби ми прирівняли матрицю 4×4 з матрицею 2×2 , але насправді це було б проблемою. Тим не менш, наявність множника $\delta_{b'b}$ виправляє цю невідповідність. Член $L_{a'a}\delta_{b'b}$ є елементом тензорного твору двох 2×2 матриць, і такий тензорний твір є 4×4 матрицю. Ось рецепт, як правильно прочитати рівняння (7.120):

4×4 матриця $L_{a'b',ab}$ може бути представлена як тензорний твір двох 2×2 матриць $L_{a'a}$ і $\delta_{b'b}$, де $\delta_{b'b}$ еквівалентна одиничній 2×2 матриці.

Тепер обчислимо очікуване значення \mathbf{L} (4×4 версії) з використанням повного апарату для складової системи:

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Psi \rangle = \sum_{a,b,a',b'} \psi^*(a',b') L_{a'b',ab} \psi(a,b).$$

Як я вже попереджав, з'явилося багато індексів. Але все простіше, якщо ми використовуємо спеціальну форму матриці L . Множник $\delta_{b'b}$ у рівнянні (7.120) - символ Кронекера - відфільтровує будь-які елементи, які змінюють половину мітки, що відноситься до Іванка, і залишає інші елементи недоторканими. Фактично символ Кронекера каже нам, що треба покласти $b = b'$. В результаті отримуємо,

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Psi \rangle = \sum_{a', b, a} \psi^*(a', b) L_{a', a} \psi(a, b). \quad (7.121)$$

Тимчасово, давайте не звертати уваги на суми a і a' , а замість цього сконцентруємося на суму b , яка визначає таку величину

$$\rho_{a'a} = \sum_b \psi^*(a, b) \psi(a', b). \quad (7.122)$$

Ця 2×2 матриця $\rho_{a'a}$ є не що інше як матриця щільності Оленки. Зверніть увагу, що $\rho_{a'a}$ не залежить від будь-якого b -індексу, оскільки вона вже підсумована по всіх b . Це функція виключно Альонушкіних змінних a і a' . Насправді ми зберегли b у рівнянні лише для того, щоб легше було зрозуміти приклад з наступного розділу.

Можна спростити рівняння (7.121), підставивши $\rho_{a'a}$ з рівняння (7.122). Очікуване значення \mathbf{L} (версія 2×2), визначається так,

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_{a'a} \rho_{a'a} L_{a, a'}. \quad (7.123)$$

Підсумовування b перетворило матрицю 4×4 на матрицю 2×2 . Це має сенс. Оскільки ми очікуємо, що оператор, який діє у просторі складової системи, представляється матрицею 4×4 , а оператор, який діє у просторі Оленки, є матрицею 2×2 .

Зверніть увагу, що права частина рівняння (7.123) є сумою діагональних матричних елементів. Іншими словами, це слід матриці $\rho\mathbf{L}$, який можна записати в такому вигляді,

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \text{Tr} \rho \mathbf{L}.$$

Урок полягає в наступному: Для того, щоб обчислити матрицю щільності Оленочки ρ , нам потрібно знати повну хвильову функцію, у тому числі її залежність від змінних Іванушки. Але як тільки ми знаємо ρ , ми можемо забути, звідки вона взялася, і використовувати її для розрахунку очікуваних результатів спостереження Оленки. Як простий приклад, ми можемо використовувати ρ і обчислити ймовірність $P(a)$ того, що система Оленки опиниться в стані a після виконання вимірювання. Для визначення $P(a)$ ми починаємо з $P(a, b)$, ймовірності того, що комбінована система перебуває у стані $|ab\rangle$. Це дається таким виразом

$$P(a, b) = \psi^*(a, b)\psi(a, b).$$

За стандартними правилами ймовірності, якщо підсумовувати b , то ми отримуємо ймовірність для a :

$$P(a) = \sum_b \psi^*(a, b)\psi(a, b).$$

Це не що інше, як діагональний елемент матриці щільності:

$$P(a) = \rho_{aa}. \tag{7.124}$$

Нижче наведено деякі властивості матриці щільності:

- Матриця щільності є ермітовою:

$$\rho_{aa'} = \rho_{a'a}^*.$$

- Слід матриці щільності дорівнює одиниці:

$$\text{Tr}(\rho) = 1.$$

Рівняння (7.124) прояснює цю властивість, оскільки його ліва сторона є ймовірністю. Таким чином, дана властивість зводиться до твердження, що сума ймовірностей всіх можливих результатів дорівнює одиниці, як і має бути.

- Власними значеннями матриці щільності є всі позитивні числа, що лежать між 0 і 1. Звідси випливає, що якщо якесь власне значення дорівнює 1, то решта дорівнює 0. Як можна інтерпретувати цей результат?

- Для чистого стану:

$$\begin{aligned}\rho^2 &= \rho \\ \text{Tr}(\rho^2) &= 1\end{aligned}$$

- Для змішаного чи заплутаного стану:

$$\begin{aligned}\rho^2 &\neq \rho \\ \text{Tr}(\rho^2) &< 1.\end{aligned}$$

Останні дві властивості дають нам ясний математичний спосіб, як можна відрізнити чистий стан від змішаних станів. Підсистема заплутаного стану (наприклад, половина Оленочки із синглетного стану) вважається змішаним станом.

Необхідно уважніше поставитися до цих двох властивостей. Для простоти ми будемо припускати, що ρ є діагональною матрицею, іншими словами, всі його недіагональні елементи дорівнюють нулю. Це спрощення не впливає на спільність подальшого розгляду, оскільки ρ є ермітовою матрицею, а для будь-якої ермітової матриці можна знайти такий базис, в якому вона діагоналізується. Звести до квадрата діагональну матрицю дуже просто: все, що нам потрібно зробити, це звести у квадрат кожен окремий

елемент. Оскільки ρ представляє змішаний стан, а діагональні елементи ρ у сумі дають одиницю, то жоден з діагональних елементів ρ не може дорівнювати 1. В іншому випадку, ρ буде чистим станом. Отже, ρ повинна мати принаймні два позитивні діагональні елементи, кожен з яких менше 1. Зведення цих елементів квадрат, дає нову матрицю ρ^2 , елементи якої ще менше. Це пояснює обидві властивості ρ у разі змішаного стану.

Перед тим, як ви спробуєте виконати такі вправи, я згадаю ще одну річ про слід. Виявляється, що слід має багато цікавих математичних властивостей. Однією з найбільш корисних властивостей і те, що слід твори двох матриць залежить від порядку множення. Іншими словами,

$$\text{Tr}AB = \text{Tr}BA,$$

якщо, навіть

$$AB \neq BA.$$

Я говорю про це, тому що ви іноді бачитимете слід матриці щільності, записаний як $\text{Tr}\mathbf{L}\rho$, замість $\text{Tr}\rho\mathbf{L}$. Ці два вирази еквівалентні.

Вправа 7.5:

1. Покажіть, що

$$\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & b^2 \end{pmatrix}.$$

2. Для

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} \end{pmatrix},$$

Обчисліть

$$\rho^2$$

$$\begin{aligned} & \text{Tr}(\rho) \\ & \text{Tr}(\rho^2). \end{aligned}$$

3. Якщо ρ є матрицею щільності, чи відповідає вона чистому чи змішаному стану?

Вправа 7.6: Використовуйте рівняння (7.124) і покажіть, що якщо ρ є матрицею щільності, то

$$\text{Tr}(\rho) = 1.$$

7.6. Окремий приклад: Обчислення матриці щільності Оленки

Досі обговорення матриці щільності, можливо, було трохи абстрактним з погляду деяких читачів. Давайте розглянемо конкретний приклад, який має допомогти чіткішому уявленню про матрицю щільності. Нагадаємо визначення матриці щільності Оленочки з рівняння (7.122):

$$\rho_{a'a} = \sum_b \psi^*(a, b) \psi(a', b). \quad (7.125)$$

Зараз розглянемо вектор стану, розкладання якого за базовими векторами має такий вигляд,

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|ud\rangle + |du\rangle).$$

Зверніть увагу, що два базисних вектори мають коефіцієнт $\frac{1}{\sqrt{2}}$, тоді як два інші мають коефіцієнти нуль (тобто не входять у вираз для обраного

вектора стану - ця частина мала б наступний вигляд $0 \times (\langle uu| + \langle dd|)$. Стан нормований, оскільки сума квадратів коефіцієнтів дорівнює 1. Крім того, всі чотири коефіцієнти виявляються дійсними (не комплексними) числами, що спрощує процес комплексного сполучення.

Давайте обчислимо матрицю щільності Оленки для цього стану. По-перше, випишемо значення хвильової функції $\psi(a, b)$ для всіх можливих значень a та b . Нагадаємо, що це всього лише множники при базисних векторах:

$$\begin{aligned}\psi(u, u) &= 0 \\ \psi(u, d) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \psi(d, u) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \psi(d, d) &= 0.\end{aligned}$$

Далі, ми використовуємо ці чотири рівняння для розрахунку кожного елемента матриці щільності Оленочки шляхом явного підсумовування рівняння (7.125). Зауважимо, що у кожному доданку виду $\psi^*(a, b)\psi(a', b)$ індекс Іванушки однакова для обох співмножників. Ось що виходить:

$$\begin{aligned}\rho_{uu} &= \psi^*(u, u)\psi(u, u) + \psi^*(u, d)\psi(u, d) = \frac{1}{2} \\ \rho_{ud} &= \psi^*(u, u)\psi(d, u) + \psi^*(u, d)\psi(d, d) = 0 \\ \rho_{du} &= \psi^*(d, u)\psi(u, u) + \psi^*(d, d)\psi(u, d) = 0 \\ \rho_{dd} &= \psi^*(d, u)\psi(d, u) + \psi^*(d, d)\psi(d, d) = \frac{1}{2}.\end{aligned}$$

Ці значення є елементами матриці 2×2 :

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.126)$$

Слід нашої матриці дорівнює одиниці. Ось ми і знайшли матрицю щільності для випадку, що розглядається.

Вправа 7.7: Використовуйте рівняння (7.126) і обчисліть ρ^2 . Як цей результат показує, що ρ відповідає заплутаному стану? Далі ми покажемо, що існують і інші способи з'ясувати, чи є цей стан заплутаним чи ні.

Вправа 7.8: Розгляньте такі стани:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2} (|uu\rangle + |ud\rangle + |du\rangle + |dd\rangle)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|uu\rangle + |dd\rangle)$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{5} (3|uu\rangle + 4|ud\rangle).$$

Для кожного з них обчисліть матрицю щільності Оленочки та матрицю щільності Іванки. Перевірте їх властивості.

7.7. Критерії заплутаності

Припустимо, що я дав Вам функцію хвилі

$$\psi(a, b)$$

складової системи S_{AB} . Чи можете Ви сказати, чи є відповідний стан заплутаним чи ні? Я не маю на увазі експериментальну перевірку, а лише математичну процедуру. Крім того, можна запитати про те, чи існують

різні ступені заплутаності чи ні. Якщо так, як можна було б кількісно оцінити їх?

Заплутаність є квантово-механічним узагальненням кореляції. Іншими словами, це вказує на те, що Оленка може дізнатися щось про половину системи Іванушки шляхом вимірювання її власної підсистеми. У класичному прикладі попередньої лекції я проілюстрував ідею кореляції з використанням монет. Якщо Оленка виявила монету, яку Баба-яга дала їй, то вона не тільки знає, що її власна монета – це копійка чи п'ятак, але вона також знає, яка монета в Іванушки. Це — експериментальна картина. Математичне визначення кореляції зводиться до того, що функція ймовірності $P(a, b)$ не факторизується (тобто вона не виглядає як рівняння (6.94)). Щоразу, коли розподіл ймовірностей не факторизується, існують відмінні від нуля кореляції, як я описав у нерівності (6.93).

7.7.1. Демонстрація заплутаності за допомогою кореляцій

Припустимо, що \mathbf{A} є спостережуваною Оленкою, а \mathbf{B} є спостережуваною Іванкою. Співвідношення між ними визначається в термінах середніх значень (також відомих як очікувані значення) окремих спостережуваних та їх твори. Припустимо, що

$$\langle \mathbf{A} \rangle$$

$$\langle \mathbf{B} \rangle$$

$$\langle \mathbf{AB} \rangle$$

Існують відповідні середні значення. Корелятор $C(A, B)$ для станів \mathbf{A} і \mathbf{B} визначається наступним чином

$$C(A, B) = \langle \mathbf{AB} \rangle - \langle \mathbf{A} \rangle \langle \mathbf{B} \rangle .$$

Вправа 7.9: Для будь-якої спостережуваної величини Оленочки **A** і спостережуваної величини Іванушки **B** покажіть, що для станів, що факторизуються (тобто такого стану складової системи, яке представимо у вигляді добутку станів підсистем), кореляція $C(A, B)$ дорівнює нулю.

З цієї вправи ми можемо дізнатися щось про заплутаність. Якщо система знаходиться в такому стані, в якому можна знайти дві **A** і **B**, які скорельовані, тобто, $C(A, B) \neq 0$, то такий стан є заплутаним. Корелятор визначаються так, щоб мати значення в діапазоні від -1 до $+1$. Ці крайні значення є максимально можливими негативними і позитивними кореляціями. Чим більша величина $C(A, B)$, тим заплутанішим є стан. Якщо $C(A, B) = 0$, то немає жодної кореляції (і ніякої заплутаності) взагалі.

7.7.2. Демонстрація заплутаності за допомогою матриці щільності

Для обчислення кореляцій необхідно знати дещо, як про частину Іванушки так і про частину Оленки, поряд зі знанням власне хвильової функції системи. Проте існує такий тест для заплутаності, яка вимагає знання лише матриці щільності Оленки (або Іванушки). Припустимо, що стан складової системи $|\Psi\rangle$ виражається у вигляді твору співмножника Іванушки $|\phi\rangle$ і співмножника Оленочки $|\psi\rangle$, тобто це стан, що факторизується. Це означає, що хвильова функція складової системи теж виражається у вигляді твору множника Іванушки та множника Оленки:

$$\psi(a, b) = \psi(a)\psi(b).$$

Тепер давайте обчислимо матрицю щільності Оленки. Використовуємо визначення (7.122) та отримуємо

$$\rho_{a'a} = \psi^*(a)\psi(a') \sum_b \phi^*(b)\phi(b).$$

У разі, коли стани Іванушки нормалізовані, маємо

$$\sum_b \phi^*(b)\phi(b) = 1,$$

що спрощує матрицю щільності Оленки:

$$\rho_{a'a} = \psi^*(a)\psi(a'). \quad (7.127)$$

Це залежить тільки від змінних Оленочки. Все, що нам потрібно знати про систему Оленки міститься в хвильовій функції Оленки.

Тепер, я збираюся довести ключову теорему про власні значення матриці щільності Оленки, у тому випадку, коли стан складової системи факторизується. Ця теорема правильна лише не заплутаних станів і служить їхньої ідентифікації. Теорема стверджує, що для будь-якого факторизуемого стану, матриця щільності Оленки (або Іванушки) має точно одне не нульове власне значення, і це власне значення точно 1. Почнемо теорему, записавши рівняння на власні значення для матриці ρ :

$$\sum_{a'} \rho_{a'a} \alpha_{a'} = \lambda \alpha_a.$$

Іншими словами, матриця ρ , що діє на вектор-стовпець α повертає той же вектор, помножений на число λ , яке називається власним значенням (а такий вектор називається власним вектором). Використовуючи простий вигляд ρ з рівняння (7.127), ми можемо написати

$$\psi(a') \sum_a \psi^*(a) \alpha_a = \lambda \alpha_{a'}. \quad (7.128)$$

Ви можете побачити кілька корисних речей. По-перше, наступна величина

$$\sum_a \psi^*(a) \alpha_a$$

має структуру скалярного твору. Якщо вектор-стовпець α є ортогональним до ψ , то ліва частина рівняння (7.128) дорівнює нулю. Такий вектор є власним вектором матриці щільності ρ з власним нульовим значенням.

Якщо розмірність простору станів Оленки є N_A , то існують $N_A - 1$ векторів, ортогональних до ψ . Кожен із них є власним вектором ρ із власним значенням 0. Таким чином, залишається лише один можливий напрямок для власного вектора з не нульовим власним значенням, а саме вектор $\rho\psi(a)$. Насправді, якщо ми підставимо $\alpha_a = \psi(a)$, ми дійсно переконаємося, що такий вектор є власним вектором ρ із власним значенням 1.

Підсумовуючи теорему: Якщо складова система Оленка-Іванушка перебуває у факторизуємому стані, то матриця щільності Оленки (або Іванушки) має одне і тільки одне власне значення, рівне 1, а всі інші дорівнюють нулю. Крім того, власний вектор з не нульовим власним значенням не що інше, як хвильова функція підсистеми Оленки.

У цій ситуації підсистема Оленки перебуває у чистому стані. Всі спостереження Оленки описуються так, як якщо б Іванка і його підсистема ніколи не існував і підсистема Оленки була б ізольованою системою, що описується хвильовою функцією $\psi(a')$.

Крайньою протилежністю до чистого стану є *максимально заплутаний* стан. Максимально заплутаний стан - це стан такої складової системи, для якої нічого не відомо ні про яку з її підсистем, тоді як усі (що допускається квантовою механікою) відомо про саму складову систему. Стан |синглет⟩ є максимально заплутаним станом.

Коли Оленка обчислює свою матрицю щільності в максимально заплутаному стані, вона знаходить щось дуже невтішне: матриця щільності пропорційна поодинокій матриці. Усі власні значення рівні, і, враховуючи, що їхня сума повинна дорівнювати одиниці, кожне власне значення дорівнює $1/N_A$. Іншими словами (для максимально заплутаного стану),

$$\rho_{a'a} = \frac{1}{N_A} \delta_{a'a}. \quad (7.129)$$

Чому розчарована Оленка? Щоб відповісти на це питання, поверніться до

рівняння (7.124). Це рівняння свідчить, що можливість виявити конкретний стан визначається відповідним діагональним елементом ρ . Проте рівняння (7.129) говорить нам, що всі ймовірності рівні. Що може бути менш інформативним, ніж такий безструктурний розподіл ймовірностей, за якого кожен можливий результат рівноймовірний?

Максимальна заплутаність передбачає повну відсутність інформацією про підсистему Оленки для експериментів, які виконуються тільки з однією підсистемою (підсистемою Оленки). З іншого боку, це означає велику кореляцію між вимірами Оленочки та вимірами Іванушки. Для синглетного стану, якщо Оленка вимірює будь-яку складову її спина, вона автоматично знає результат, який би отримав Іванушка, якби він вимірював ту саму складову, але для свого спина. Це саме той вид знання, який відсутній у станах, що факторизуються.

Таким чином, у кожному типі станів деякі речі є передбачуваними, а інші ні. У факторизуємом стані, ми можемо зробити статистичні передбачення про виміри, виконані в кожній окремій підсистемі, при цьому виміри Оленки не говорять їй нічого про систему Іванушки. З іншого боку, в максимально заплутаному стані, Оленка не може передбачити нічого про свої власні виміри, але вона знає багато про зв'язок між результатами її вимірювань та результатами вимірювань Іванушки.

7.8. Процес вимірювання

Ми бачили, що квантові системи еволюціонують декількома різними способами. І ці методи непримиренно різні. З одного боку, це унітарна еволюція між вимірами. З іншого боку, це колапс хвильової функції, коли виміри відбуваються. Ця обставина призвела до спекотних суперечок щодо так званої реальності. Я триматимусь осторонь цих дискусій і дотримуватимусь фактів. Після того, як ви дізнаєтеся, як працює квантова механіка, ви можете вирішити для себе бачите ви тут проблему чи ні.

Давайте почнемо з зауваження, що кожен вимір включає систему і вимірювальний пристрій. Але якщо квантова механіка є послідовною теорією, то вона повинна забезпечити можливість об'єднати систему та пристрій у єдину більшу систему. Для простоти давайте як систему візьмемо одини-

чний спіт. Прилад А це той самий прилад, що ми використовували у першій лекції. Віконце в приладі може показувати три значення. Перше значення “порожньо” (надалі будемо його позначати буквою “ b ” - від англійського blank), коли віконце нічого не показує, представляє нейтральний стан апарата перед тим, як він вступає в контакт зі спином. Два інших значення це $+1$ і -1 , які показують два можливі результати виміру.

Якщо пристрій є квантовою системою (звичайно, це має бути так), то воно описується простором станів. У найпростішому описі, пристрій має три стани: порожній стан і два стани результату. Таким чином, базовими векторами для пристрою є

$$\begin{aligned} &|b\rangle \\ &|+1\rangle \\ &|-1\rangle. \end{aligned}$$

Як базові стани спина можна взяти звичайні стани “вгору” і “вниз”:

$$\begin{aligned} &|u\rangle \\ &|d\rangle. \end{aligned}$$

З цих двох наборів базисних векторів ми можемо побудувати складовий простір станів (тензорний твір), який має шість базисних векторів

$$\begin{aligned} &|u, b\rangle \\ &|u, +1\rangle \\ &|u, -1\rangle \\ &|d, b\rangle \\ &|d, +1\rangle \\ &|d, -1\rangle. \end{aligned}$$

Детальний механізм того, що відбувається, коли система взаємодіє з пристроєм може бути складним, але ми можемо зробити деякі припущення про те, як сукупна система еволюціонує. Припустимо, що початковий стан апарату “порожньо”, а початковий стан спина “вгору” (u). Після того, як апарат взаємодіє зі спином, кінцевим станом (за припущенням) є

$$|u, +1\rangle.$$

Інакше кажучи, взаємодія залишає спін незмінним, але переводить вимірювальний пристрій у стан $+1$. Запишемо це як

$$|u, b\rangle \rightarrow |u, +1\rangle. \quad (7.130)$$

Так само ми можемо зажадати, щоб, якщо спін знаходиться в стані "вниз" (d), то прилад переводиться в стан -1 :

$$|d, b\rangle \rightarrow |d, -1\rangle. \quad (7.131)$$

Так що, дивлячись на апарат після того, як він провзаємодіє зі спином, ви можете сказати, в якому стані спін був спочатку. Тепер, давайте припустимо, що початковий стан спина є більш загальним, а саме:

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

Якщо ми включимо вимірювальний апарат як частину системи, то початковий стан буде таким,

$$\alpha_u |u, b\rangle + \alpha_d |d, b\rangle. \quad (7.132)$$

Цей початковий стан є станом, що факторизується, а саме, воно є твір початкового спинового стану і стану апарату “порожньо”. Ви можете перевірити, що такий стан зовсім не заплутаний.

Вправа 7.10: Перевірте, що вектор стану (7.132) відповідає абсолютно не заплутаному стану.

Оскільки ми знаємо з рівнянь (7.130) і (7.131) як окремі члени (7.132) еволюціонують, ми можемо легко визначити кінцевий стан:

$$\alpha_u |u, b\rangle + \alpha_d |d, b\rangle \rightarrow \alpha_u |u, +1\rangle + \alpha_d |d, -1\rangle .$$

Цей кінцевий стан є заплутаним станом. Більше того, якщо $\alpha_u = -\alpha_d$, це буде максимально заплутаний синглетний стан. Справді, можна подивитися на апарат і відразу сказати, який стан у спина: якщо пристрій показує $+1$, то спин знаходиться в стані "вгору і якщо воно показує -1 , то спин - вниз". Крім того, ймовірність того, що апарат показує $+1$ є

$$\alpha_u^* \alpha_u .$$

Це число є ймовірність - точно таку ж як і вихідна ймовірність того, що спин був у стані "вгору". У такому описі вимірювання ніякого колапсу хвильової функції не відбувається. Натомість, у результаті унітарної еволюції вектора стану складової системи (спин та вимірювальний пристрій) виникає заплутаність між станом вимірювального пристрою та системою (спином), яка вимірюється.

Єдина проблема у тому, що, у певному сенсі, ми просто відстрочила труднощі. Не цілком задовільним є твердження, що вимірювальний прилад знає в якому стані знаходиться спин, доки експериментатор, скажімо Оленка, не глянула на віконце і не побачила показання приладу. Хіба не правда те, що після того, як вона глянула на віконце, то стався колапс

хвильової функції складової системи? І так і ні. З погляду Оленки відповідь, так; вона зробить висновок, що як апарат, так і спин, знаходяться в одному з двох можливих станів і діятиме відповідним чином. Тобто, з її точки зору стався колапс хвильової функції, в стан, що описується одним з членів суми (відповідному тому, що Оленка побачила у віконці, $+1$ або -1).

Але тепер давайте залучимо Івана. Досі він не взаємодіяв ні зі спином, ні з влаштуванням, ні з Оленкою. На його думку, всі три підсистеми, а саме, спин, пристрій і Оленка, утворюють єдину квантову систему і ніякого колапсу хвильової функції не відбувається, коли Оленка дивиться на апарат. Натомість, Іванко каже, що Оленка виявилася заплутаною з двома іншими частинами складової системи.

Все це чудово, але що відбувається, коли Іванко дивиться на Оленку? Для своїх цілей, він колапсує хвильову функцію трикомпонентної системи (спин, вимірювальний пристрій, Оленка). Але на цей випадок є стара добра Баба-яга, яка скаже, що всі чотири підсистеми, а саме, спин, пристрій, Оленка та Іванка утворюють єдину квантову систему і ніякого колапсу хвильової функції не відбувається, коли Іванко дивиться на Оленку. І так можна продовжувати до нескінченності, включаючи все нових і нових спостерігачів до складу квантової системи, що все більше і більше збільшується, поки ... ми не включимо весь всесвіт. А потім що робити? Ось про це і сперечаються вчені і філософи і кінця краю цій суперечці не видно.. як, втім, і особливого сенсу в такій суперечці.

Питання в тому, чи колапсує новий учасник хвильову функцію системи, на яку він дивиться, чи стає заплутаною частиною цієї системи? Чи є абсолютний сторонній спостерігач? Я не намагатимуся відповісти на ці питання, але я підкреслю те, що має бути очевидним. А саме, що квантова механіка є послідовним обчисленням ймовірностей для певного виду експерименту за участю системи та устрою. Ми використовуємо цю теорію і вона працює. Але коли ми намагаємося ставити питання про фундамент, на якому стоїть квантова теорія, ми опиняємось у безвиході.

7.9. Заплутаність та локальність

Чи порушує квантова механіка локальність? Деякі люди думають, що так. Ейнштейн виступав проти "примарної дії на відстані яка, за його твердженням, притаманна квантовій механіці. А Джон Белл став майже культовою фігурою, довівши, що квантова механіка є нелокальною.

З іншого боку, більшість фізиків-теоретиків, особливо тих, хто вивчає квантову теорію поля, пронизану заплутаністю, стверджують протилежне: квантова механіка правильно відображає (описує, передає) локальність.

Проблема, звісно, у тому, що ці дві групи людей розуміють локальність по-різному. Почнемо з того, що розуміють під локальністю теоретики, що займаються квантовою теорією поля. З їхньої точки зору, локальність має тільки одне значення: не можна надіслати сигнал швидше, ніж швидкість світла. Я покажу вам, як квантова механіка забезпечує дотримання цього правила.

Спершу, дозвольте мені уточнити визначення системи Оленки та системи Іванушки. Досі я використовував термін система Оленки для позначення такої системи, яку Оленка може переносити з собою і над якою вона може виконувати ті чи інші вимірювання. У цьому ж розділі, я буду використовувати цей термін, щоб позначити щось інше, а саме: система Оленка складається не тільки з якоїсь системи, яку Оленка має, але й сама Оленка є частиною системи. І вимірювальний прилад, який може використовувати Оленка, теж є частиною того, що я в цьому розділі розумітиму під терміном система Оленка. Звичайно, все це стосується і системи Іванушки. Базисні кет-вектори

$$|a\rangle$$

описують все те, що доступне Оленці. Аналогічно, кет-вектора

$$|b\rangle$$

описують усе, що є Іванушці. І, нарешті, тензорний витвір станів

$$|ab\rangle$$

визначає об'єднання те, що доступне Оленці та Іванці.

Вважатимемо, що Оленка та Іванка, можливо, були досить близькі, щоб взаємодіяти колись у минулому, але нині Оленка знаходиться на Альфі Центавра, а Іванушки знаходиться в Пало-Альто. Хвильова функція для системи Оленка-Іванушка є

$$\psi(ab),$$

і вона може бути заплутаною. Повний опис Оленкою її системи, її апарату, і її самої міститься в її матриці щільності ρ :

$$\rho_{aa'} = \sum_b \psi^*(a'b)\psi(ab). \quad (7.133)$$

Розглянемо таке запитання: Чи може Іванко, зі свого боку, зробити щось, щоб миттєво змінити матрицю щільності Оленки? Майте на увазі, що Іванко може робити тільки те, що дозволяють закони квантової механіки. Зокрема, еволюція Іванушки, незалежно від її причини, має бути унітарною. Іншими словами, така еволюція має описуватися унітарною матрицею

$$\mathbf{U}_{bb'}.$$

Матриця \mathbf{U} є все, що може статися або відбувається із системою Іванушки, незалежно від того чи виконує Іванушка експеримент чи ні. Ця унітарна матриця діє на хвильову функцію і результатом є також хвильова функція (така чи інша). Будемо називати її "кінцевою" хвильовою функцією:

$$\psi_{final}(ab) = \sum_{b'} \mathbf{U}_{bb'}\psi(ab').$$

Запишемо також комплексно сполучене вираз:

$$\psi_{final}^*(a'b) = \sum_{b''} \psi^*(a'b'') \mathbf{U}_{b''b}^\dagger.$$

Зверніть увагу, що ми додали штрихи до деяких символів, щоб уникнути плутанини на наступному кроці. Тепер давайте обчислимо нову матрицю щільності Оленки. Ми будемо використовувати рівняння (7.134), в якому використовуємо кінцеву функцію хвилі:

$$\rho_{aa'} = \sum_{b,b',b''} \psi^*(a'b'') \mathbf{U}_{b''b}^\dagger \mathbf{U}_{bb'} \psi(ab').$$

Знову тут багато індексів, але математика не така складна, як це виглядає. Насправді, матриці \mathbf{U} входять до наступної комбінації

$$\mathbf{U}_{b''b}^\dagger \mathbf{U}_{bb'}.$$

Ця комбінація ні що інше як твір матриць $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U}$. Але нагадаємо, що \mathbf{U} є унітарною матрицею. Це говорить про те, що твір $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U}$ є просто одинична матриця $\delta_{b''b'}$. Як і раніше, це лише зводиться до інструкції, щоб використовувати тільки такі доданки, в яких виконана умова $b'' = b'$, і ігнорувати всі інші. За допомогою цього спрощення ми отримуємо

$$\rho_{aa'} = \sum_b \psi^*(a'b) \psi(ab).$$

описують усі ті, що доступні Оленці. Аналогічно, кет-вектора

$$|b\rangle$$

описують усе, що є Іванушці. І, нарешті, тензорний витвір станів

$$|ab\rangle$$

визначає об'єднання те, що доступне Оленці та Іванці.

Слід вважати, що Оленка та Іванка, можливо, були досить близькі, щоб взаємодіяти колись у минулому, але нині Оленка знаходиться на Альфі Центавра, а Іванушки знаходиться у Пало-Альто. Хвильова функція для системи Оленка-Іванушка є

$$\psi(ab),$$

і вона може бути заплутаною. Оленкою її системи, її апарату, і її самої міститься в її матриці щільності ρ :

$$\rho_{aa'} = \sum_b \psi^*(a'b)\psi(ab). \quad (7.134)$$

Розглянемо таке запитання: Чи може Іванко, зі свого боку, зробити щось, щоб миттєво змінити матрицю щільності Оленки? Майте на увазі, що Іванко може робити лише ті, що дозволяють закони квантової механіки. Зокрема, еволюція Іванушки, незалежно від її причини, має бути унітарною. Іншими словами, така еволюція має описуватися унітарною матрицею.

$$\mathbf{U}_{bb'}.$$

Матриця \mathbf{U} є все, що може статися або відбувається із системою Іванушки, незалежно від того чи виконує Іванушка експеримент чи ні. Ця унітарна матриця діє на хвильову функцію і результатом є також хвильова функція (така чи інша). Будемо називати її "кінцевою" хвильовою функцією:

$$\psi_{final}(ab) = \sum_{b'} \mathbf{U}_{bb'}\psi(ab').$$

Запишемо також комплексно спільне вираз:

$$\psi_{final}^*(a'b) = \sum_{b''} \psi^*(a'b'') \mathbf{U}_{b''b}^\dagger.$$

Зверніть увагу, що ми додали штрихи до деяких символів, щоб уникнути плутанини на наступному кроку. Тепер давайте обчислимо нову матрицю щільності Оленки. Ми будемо використовувати рівняння (7.134), в якому використовуємо кінцеву функцію хвилі:

$$\rho_{aa'} = \sum_{b,b',b''} \psi^*(a'b'') \mathbf{U}_{b''b}^\dagger \mathbf{U}_{bb'} \psi(ab').$$

Знову тут багато індексів, але математика не така складна, як це виглядає. Насправді, матриці \mathbf{U} входять до наступної комбінації

$$\mathbf{U}_{b''b}^\dagger \mathbf{U}_{bb'}.$$

Ця комбінація ні що інше як твір матриць $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U}$. Але нагадаємо, що \mathbf{U} є унітарною матрицею. Це говорити про те, що твір $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U}$ є просто одинична матриця $\delta_{b''b'}$. Як і раніше, це лише зводиться до інструкції, щоб використовувати тільки такі додатки, в яких виконана умова $b'' = b'$, і ігнорувати всі інші. За допомогою цього упрощення ми отримуємо

Останнім елементом програми є генератор випадкових чисел, який видає результат виміру $+1$ або -1 з ймовірностями $\alpha_u^* \alpha_u$ і $\alpha_d^* \alpha_d$, відповідно. Майте на увазі, що генератори випадкових чисел є насправді генераторами випадкових чисел; вони є симуляторами випадкових чисел. Вони засновані на класичних детермінованих механізмах, використовуючи такі речі, як, наприклад, цифри числа π для генерування чисел. Тим не менш, вони досить хороші, щоб ввести вас в оману.

Гра починається, і комп'ютер постійно оновлює значення α_u та α_d . Ви чекаєте до певного часу, а потім натискаєте кнопку M . Потім за допомогою генератора випадкових чисел гра видає результат, який відображається на екрані. Грунтуючись на цьому результаті, комп'ютер оновлює стан спина шляхом колапсу хвильової функції у стан, який відповідає результату вимірювання, тобто показанню вікна апарата. Якщо результат дорівнює $+1$, то

значення α_d обнулюється, а значення α_u стає рівним одиниці. Якщо результат вимірювання дорівнює -1 , то значення α_d скидається на одиницю, а значення α_u скидається в нуль. Потім рівняння Шредінгера знову починає роботу, поки Ви знову не натиснете кнопку М.

Будучи хорошим експериментатором, ви виконуєте багато випробувань і набираєте переконливу статистику, яку ви порівнюєте із прогнозами квантової механіки. Якщо все працює правильно, ви робите висновок, що квантова механіка є правильним описом того, щоб не було в комп'ютері. Звичайно, комп'ютер все ще повністю класичний, але він імітує квантовий спин без особливих труднощів.

Тепер давайте спробуємо те саме з двома комп'ютерами, А і В, імітуючи два квантові спини. Якщо спини починають у факторизованому стані і ніколи не взаємодіють між собою, ми можемо просто грати в гру на кожному з двох комп'ютерів, без будь-якого взаємного впливу. Але тепер, Оленка, Іванко, і Баба-яга повертаються, щоб допомогти нам. Баба-яга, звичайно ж, хоче створити заплутану пару (спинів). Вона починає з того, що з'єднує два комп'ютери за допомогою кабелю для формування одного комп'ютера, і ми припускаємо, що кабель може надсилати миттєві сигнали. У своїй пам'яті комбінований комп'ютер тепер зберігає чотири комплексні числа,

$$\alpha_{uu}, \alpha_{ud}, \alpha_{du}, \alpha_{dd},$$

та оновлює ці числа, використовуючи рівняння Шредінгера (для двох спинів). Екран кожного комп'ютера відображає відповідний пристрій. Екран комп'ютера Оленки показує апарат А, а екран Іванушки показує апарат В. Кожен віртуальний апарат то, можливо орієнтований незалежно друг від друга і кожен із новачків може бути незалежно активований власної кнопкою М. Коли натискається будь-яка з цих кнопок М, сумісна пам'ять (за допомогою генератора випадкових чисел) посилає сигнал на відповідний апарат і видає результат.

Чи може цей пристрій насправді імітувати квантову механіку дво-спинової системи? Так, воно може, але до тих пір, поки кабель з'єднує комп'ютери не відключається, і до тих пір, поки він може надсилати пові-

домлення миттєво. Але якщо стан системи не факторизується, то роз'єднання комп'ютерів зруйнує моделювання.

Чи можемо ми довести це? Знову ж таки, відповідь так - і в цьому полягає істота теореми Белла. Будь-яке класичне імітування квантової механіки, у тому випадку, коли підсистеми Оленки та Іванки просторово розділені, може бути успішним лише тоді, коли є кабель (здатний миттєво передавати сигнал), що з'єднує окремі комп'ютери та центральну пам'ять, що зберігає та оновлює вектор стану всієї системи.

Але хіба це не означає, що інформація, що порушує локальність, може передаватися через такий кабель? Так, саме це воно й означало б, якби Оленка, Іванко, і Баба-яга могли б робити все те, що нерелятивістська класична механіка дозволяє їм робити. Однак, якщо операції, які дозволені, імітують квантові операції, то відповіді немає. Як ми вже бачили, квантова механіка не дозволяє матриці щільності Оленки бути порушеною будь-якою дією Іванушки.

Ця проблема не є проблемою власне квантової механіки. Це проблема моделювання квантової механіки за допомогою класичного комп'ютера (заснованого на класичній Булевій логіці). У цьому полягає (загалом) зміст теореми Белла: Класичні комп'ютери мають бути з'єднані миттєвим кабелем у тому, щоб моделювати заплутані стану.

7.10. Заплутаність: Підбиття підсумків

Зі всіх суперечливих здоровому глузду ідей, які квантова механіка обрушує на нас, заплутаність, мабуть, є ідеєю, яку найважче прийняти. Не існує жодного класичного аналога системи, чиє повне опис не містить жодної інформації про її окремі частини. Нелокальність напрочуд важко піддається визначенню (тобто важко сформулювати, що таке нелокальність). Найкращий спосіб прийти у згоду з цими важкими питаннями, так це просто засвоїти математику та застосовувати її. Нижче наведено стилій виклад того, що ми дізналися про заплутаність. Зокрема, ми спробували намітити різницю між заплутаним, не заплутаним і частково заплутаним станами шляхом створення "Підсумкових листів" для трьох конкретних прикладів - синглетного стану, факторизуємого стан, і "майже

синглетного "стану. Ми сподіваємось, що це допоможе прояснити математичні подібності та відмінності. Будь ласка, витратите деякий час, щоб розглянути цей матеріал та виконати вправи, перш ніж рухатися далі.

Вектор стану. Підсумковий лист 1

Назва: Факторизуємо станів (Немає заплутаності)

Необхідно для: Надмірна локальність, уособлення класичних систем

Опис: Кожна підсистема може бути повністю описана. Немає кореляцій між підсистемами Оленки та Іванушки.

Вектор стану:

$$\alpha_u \beta_u |uu\rangle + \alpha_u \beta_d |ud\rangle + \alpha_d \beta_u |du\rangle + \alpha_d \beta_d |dd\rangle$$

Нормування:

$$\alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d = 1,$$

$$\beta_u^* \beta_u + \beta_d^* \beta_d = 1$$

Матриця щільності: матриця щільності Оленки має рівно одне ненульове власне значення, яке дорівнює 1. Тоді власним вектором із цим ненульовим власним значенням є хвильова функція підсистеми Оленки. Те саме стосується і Іванушки.

Хвильова функція: Факторизується

$$\psi(a)\phi(b)$$

Очікувані значення:

$$\langle \sigma_x \rangle^2 + \langle \sigma_y \rangle^2 + \langle \sigma_z \rangle^2 = 1$$

$$\langle \tau_x \rangle^2 + \langle \tau_y \rangle^2 + \langle \tau_z \rangle^2 = 1$$

Кореляція:

$$\langle \sigma_z \tau_z \rangle - \langle \sigma_z \rangle \langle \tau_z \rangle = 0$$

Вектор стану. Підсумковий лист 2**Назва :** Синглетний стан (Максимально заплутаний)**Необхідно для:** Нелокальності, повної квантової таємничості**Опис:** Складова система як ціле може бути описана. Однак ні підсистема Оленочки ні підсистема Іванушки окремо не можуть бути описані.**Вектор стану:**

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|ud\rangle - |du\rangle)$$

Нормування:

$$\psi_{uu}^* \psi_{uu} + \psi_{ud}^* \psi_{ud} + \psi_{du}^* \psi_{du} + \psi_{dd}^* \psi_{dd} = 1$$

Матриця щільності:Для складової системи: $\rho^2 = \rho$ і $Tr(\rho^2) = 1$.Підсистема Оленочки: Матриця щільності пропорційна поодинокій матриці і має однакові власні значення, які в сумі дають одиницю. Звідси випливає, що кожен (можливий) результат виміру має рівну ймовірність. $\rho^2 \neq \rho$, і $Tr(\rho^2) < 1$.**Хвильова функція:** Не факторизована, $\psi(a, b)$ **Очікуване значення:**

$$\langle \sigma_z \rangle, \langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle = 0$$

$$\langle \tau_z \rangle, \langle \tau_x \rangle, \langle \tau_y \rangle = 0$$

$$\langle \tau_z \sigma_z \rangle, \langle \tau_x \sigma_x \rangle, \langle \tau_y \sigma_y \rangle = -1$$

Кореляція:

$$\langle \sigma_z \tau_z \rangle - \langle \sigma_z \rangle \langle \tau_z \rangle = -1$$

Вектор стану. Підсумковий лист 3

Назва : “Майже синглет” (Часткова заплутаність)

Необхідно для : Нерішучості, Розмитості, Труднощів із розрізненням стану “вгору” від стану “вниз”.

Опис : Є часткова інформація про всю систему та часткова інформація про її частини. Неповнота у кожному з випадків.

Вектор стану:

$$\sqrt{0.6} |ud\rangle - \sqrt{0.4} |du\rangle$$

Нормування:

$$\psi_{uu}^* \psi_{uu} + \psi_{ud}^* \psi_{ud} + \psi_{du}^* \psi_{du} + \psi_{dd}^* \psi_{dd} = 1$$

Матриця щільності:

Вся система: $\rho^2 \neq \rho$ і $Tr(\rho^2) < 1$.

Підсистема Оленочки: $\rho^2 \neq \rho$, і $Tr(\rho^2) < 1$.

Хвильова функція: Не факторизована: $\psi(a, b)$

Очікуване значення:

$$\langle \sigma_z \rangle = 0.2$$

$$\langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle = 0; \langle \tau_z \rangle = -0.2$$

$$\langle \tau_x \rangle, \langle \tau_y \rangle = 0$$

$$\langle \tau_z \sigma_z \rangle = -1$$

$$\langle \tau_x \sigma_x \rangle = -2\sqrt{0.24}$$

Кореляція:

$$\langle \sigma_z \tau_z \rangle - \langle \sigma_z \rangle \langle \tau_z \rangle = -0.96$$

Вправа 7.11: Обчисліть матрицю щільності Оленки для σ_z у разі майже синглетного стану.

Вправа 7.12: Перевірте чисельні множники у всіх підсумкових аркушах.

8. Частинки та хвилі

Art and Lenny have had enough entanglement for now. They're ready for something simpler.

Lenny: Hey Hilbert, do you have anything in one dimension?

Hilbert: Let me check. Single dimensions are very popular lately. Sometimes we run out.

Art: I'd settle for something classical, if that's all you have.

Hilbert: Not here, friend. We'd lose our license.

Art: Good point.

Для людини з вулиці квантова механіка це наука про те, що світло - це частинки, а електрони - це хвилі. Але досі я майже не згадував про частинки, і єдина згадка про хвилі була хвильова функція, яка досі не мала нічого спільного з хвилями. Тому виникає питання, коли ж ми приступимо до "справжньої" квантової механіки?

Відповідь на це питання, звичайно, полягає в тому, що справжня квантова механіка не стільки про частинки і хвилі, скільки про класичні логічні принципи, які регулюють поведінку цих самих хвиль і частинок. Дуалізм хвиля - частка природним чином впливає з того, що ми вже вивчили в попередніх лекціях. І ми в цьому переконуємось у справжній лекції. Але перш ніж ми приступимо до фізики, я хочу нагадати трохи математики, трохи з того, що ми вже стосувалися попередніх лекцій і трохи нового.

8.1. Математичний відступ: Робота з функціями безперервних (не дискретних) змінних

8.1.1. Хвильова функція: Короткий огляд

Ми будемо використовувати мову хвильових функцій у цій лекції, тому давайте спочатку повторимо те, що ми вже знаємо, перш ніж рухатися

далі. У лекції 5 ми обговорювали хвильові функції як абстрактні об'єкти, не пояснюючи, яке вони стосуються хвиль чи функцій. Перед тим, як виправити цей недогляд, я розгляну, що ми вже обговорювали раніше.

Почнемо з вибору \mathbf{L} , що має власні значення λ і власні вектори $|\lambda\rangle$. Нехай $|\Psi\rangle$ буде вектором стану. Оскільки власні вектори ермітового оператора утворюють повний ортонормований базис, то вектор $|\Psi\rangle$ можна розкласти за цим базисом,

$$|\Psi\rangle = \sum_{\lambda} \psi(\lambda) |\lambda\rangle. \quad (8.135)$$

Як ви пам'ятаєте з розділів 5.1.2 та 5.1.3, величини

$$\psi(\lambda)$$

називаються хвильовою функцією системи. Але зверніть увагу: конкретний вид $\psi(\lambda)$ залежить від конкретної \mathbf{L} , яку ми спочатку вибрали. Якщо ми виберемо іншу спостерігається, то хвильова функція (поряд з іншими базисними векторами та власними значеннями) буде іншою, незважаючи на те, що ми все ще говоримо про той самий стан. Таким чином, ми повинні пояснити, що $\psi(\lambda)$ є хвильовою функцією, пов'язаною зі станом $|\Psi\rangle$. Слід сказати, що $\psi(\lambda)$ є хвильовою функцією в \mathbf{L} -базисі. Якщо ми використовуємо властивості ортонормованості базисних векторів,

$$\langle \lambda_i | \lambda_j \rangle = \delta_{ij},$$

то хвильова функція в \mathbf{L} -базисі також може бути визначена за допомогою скалярного твору або проекції вектора стану $|\Psi\rangle$ на власні вектори $|\lambda\rangle$:

$$\psi(\lambda) = \langle \lambda | \Psi \rangle.$$

Ви можете приймати хвильову функцію подвійно. Насамперед,

хвильова функція це сукупність компонент вектора стану у тому чи іншому базисі.

Ці компоненти зручно зібрати у вигляді векторного стовпця:

$$\begin{pmatrix} \psi(\lambda_1) \\ \psi(\lambda_2) \\ \psi(\lambda_3) \\ \psi(\lambda_4) \\ \psi(\lambda_5) \end{pmatrix}$$

З іншого боку,

хвильову функцію можна розглядати просто як звичайну функцію змінної λ .

Для кожного допустимого значення λ , функція $\psi(\lambda)$ видає результат - комплексне число. Тому можна сказати, що

$$\psi(\lambda)$$

є комплексною функцією дискретної змінної λ . Якщо міркувати так, лінійні оператори стають операціями, які застосовуються до функцій і результатом яких є нові функції.

Остання нагадування: ймовірність того, що експеримент дасть результат λ визначається як

$$P(\lambda) = \psi^*(\lambda)\psi(\lambda).$$

8.1.2. Функції як вектори

До цих пір системи, які ми вивчали мали кінцеві векторні стани. Наприклад, одиничний спин описується у двовимірному просторі станів. З цієї причини, що спостерігалися, мали лише кінцеве число можливих значень. Але є складніші спостерігаються, які можуть мати нескінченну кількість значень. Прикладом є частка. Координати частки є спостережуваними, але, на відміну спина, координати мають нескінченне число можливих значень. Наприклад, частинку, яка рухається вздовж осі x , можна знайти у будь-якій точці x . Іншими словами, x є безперервною змінною, на відміну від проєкції спина, наприклад σ_z , яка є дискретною змінною. Коли спостережувані даною системою є безперервними, хвильова функція дійсно стає функцією безперервної змінної. Щоб застосувати квантову механіку до такої системи, ми повинні розширити поняття вектора для того, щоб включити в розгляд і функції.

Функції є функціями, а вектори є векторами - вони як здається, досить різні речі. Тоді у сенсі функції можуть бути векторами? Якщо ви думаєте про вектор як про стрілку в тривимірному просторі, то вони не є такими ж, як функції. Але якщо використовувати ширше поняття векторів як сукупності математичних об'єктів, що задовольняють певним постулатам, функції можуть справді утворювати векторний простір. Такий векторний простір найчастіше називається гільбертовим простором на честь математика Давида Гільберта.

Розглянемо безліч комплексних функцій $\psi(x)$ однієї речовинної змінної x . Термін комплексна функція означає, що для кожного x , $\psi(x)$ є комплексним числом. З іншого боку, незалежна змінна x є звичайною дійсною змінною. Вона може приймати значення з інтервалу від $-\infty$ до $+\infty$.

Тепер, давайте остаточно визначимо, що ми маємо на увазі, коли говоримо “функція є вектором”. Цей вислів не є поганою аналогією чи метафорою. Навпаки, за наявності відповідних обмежень (до яких ми ще повернемося), функції подібні до $\psi(x)$, задовольняють усім математичним аксіомам, які визначають векторний простір. Ми вже згадували про це миттєво у розділі 1.9.2, і тепер ми скористаємося цим повною мірою. Оглядаючись на аксіоми, які визначають комплексний векторний простір (у розділі 1.9.1), ми можемо бачити, що комплексні функції задовольняють усім їм:

1. Сума будь-яких двох функцій є функцією.
2. Додавання функцій комутативно (від перестановки доданків сума не змінюється).
3. Додавання функцій асоціативно (від перегрупування доданків сума не змінюється).
4. Існує єдина нульова функція, складання якої із заданою функцією не змінює цю саму задану функцію.
5. Для будь-якої довільної функції $\psi(x)$ існує єдина функція $-\psi(x)$, така, що $\psi(x) + (-\psi(x)) = 0$.
6. Розмноження функції на комплексне число дає функцію. Таке множення має властивість лінійності.
7. Виконується властивість дистрибутивності, тобто

$$z [\psi(x) + \phi(x)] = z\psi(x) + z\phi(x)$$

$$[z + w] \psi(x) = z\psi(x) + w\psi(x),$$

де z та w комплексні числа.

Все це означає, що ми можемо ототожнити функції $\psi(x)$ з кет-векторами $|\Psi\rangle$ в абстрактному векторному просторі. Не дивно, що ми можемо також визначити бра-вектори. Бра-вектор $\langle\Psi|$, що відповідає кет-вектору $|\Psi\rangle$, ототожнюється з комплексно пов'язаною функцією $\psi^*(x)$.

Для того, щоб ефективно використовувати цю ідею, ми повинні узагальнити деякі пункти в нашому математичному наборі інструментів. У ранніх лекціях, мітки (індекси), якими були забезпечені хвильові функції, належали деякому кінцевому дискретному безлічі, наприклад, власні значення деяких спостережуваних. Але тепер незалежна змінна безперервна. Окрім іншого, це означає, що ми не можемо підсумувати за такою змінною (наприклад, за умови нормування), використовуючи звичайні суми. Хоча,

я думаю, ви знаєте, що робити у цьому випадку (застосувати операцію інтегрування). Нижче наведені функціонально орієнтовані заміни для трьох концепцій (які широко використовуємо), заснованих на понятті вектора, дві з яких ви легко дізнаєтеся:

- Інтеграл замінюють суми.
- Щільності ймовірності замінюють ймовірність.
- Дельта-функція Дірака замінює дельта символ Кронекера.

Давайте розглянемо ці правила докладніше:

Інтеграл замінює суму: Щоб визначити цю процедуру заміни математично суворо, ми повинні спочатку замінити вісь x дискретним безліччю точок, розділених дуже малою відстанню ϵ , а потім перейдемо до межі $\epsilon \rightarrow 0$. Для обґрунтування кожного кроку нам знадобилося б кілька сторінок. Але ми можемо уникнути цієї проблеми за допомогою кількох інтуїтивно зрозумілих визначень, як-от заміна суми на інтеграл. Схематично, це може бути записано у такому вигляді

$$\sum_i \rightarrow \int dx.$$

Наприклад, якщо ми хочемо обчислити площу під кривою, ми розділимо вісь x на дрібні сегменти, а потім складемо площі великої кількості прямокутників, точно так, як ми робимо в курсі математичного аналізу. Коли стискаємо сегменти до нульового розміру, сума стає інтегралом.

Розглянемо бра $\langle \Psi |$ і кет $|\Phi \rangle$ і визначимо їх скалярне твір. Очевидний спосіб зробити це, полягає в тому, щоб замінити підсумовування у формулі (ref0102) на інтегрування. Отже, скалярний твір визначається так

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \phi(x) dx. \tag{8.136}$$

Щільність ймовірності замінює ймовірність: Пізніше ми визначимо

$$P(x) = \psi^*(x)\psi(x)$$

як щільність ймовірності для змінної x . Чому густина ймовірності, а не просто ймовірність? Якщо x є безперервна змінна, то ймовірність того, що вона матиме будь-яке точне значення, як правило, дорівнює нулю. Більш осмисленим є питання: Якою є ймовірність того, що x лежить між двома значеннями, $x = a$ і $x = b$? Щільність ймовірності визначається так, що ця ймовірність надається інтегралом:

$$P(a, b) = \int_a^b P(x)dx = \int_a^b \psi^*(x)\psi(x)dx.$$

Оскільки повна ймовірність має бути 1, ми визначимо нормований вектор як такий, який задовольняє таку умову

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1. \quad (8.137)$$

Дельта-функція Дірака замінює дельта символ Кронекера:

Досі процедури заміни повинні бути добре знайомі. Однак, дельта-функція, можливо, не дуже відома. Функція дельта є аналогом символу Кронекера, δ_{ij} . Символ Кронекера дорівнює 0 для $i \neq j$ і дорівнює 1 для $i = j$. Але його також можна визначити інакше. Для цього розглянемо будь-який вектор F_i у кінцевому просторі. Легко бачити, що символ Кронекера задовольняє таке рівняння

$$\sum_j \delta_{ij}F_j = F_i.$$

Це оскільки єдиний не нульовий член у сумі є той, котрим $j = i$. При підсумовуванні, символ Кронекера відфільтровує всі F , крім F_i . Очевидне узагальнення у тому, щоб визначити нову функцію, що має аналогічні

властивості фільтрації під час використання під знаком інтеграла (замість знака суми). Іншими словами, ми хочемо, щоб новий об'єкт

$$\delta(x - x')$$

мав таку властивість, що для будь-якої функції $F(x)$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') F(x') dx' = F(x). \quad (8.138)$$

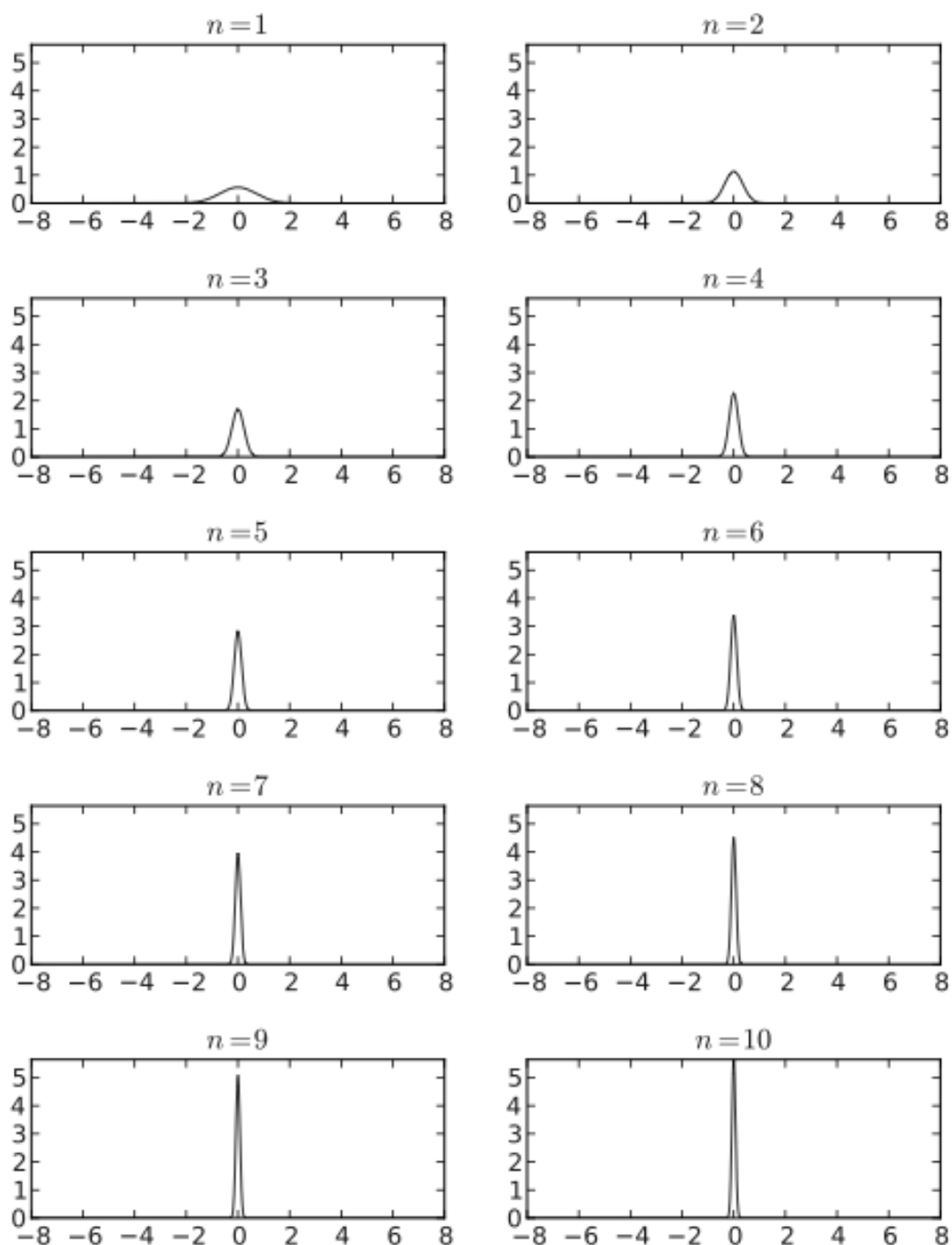
Рівняння (8.138) визначає цей новий об'єкт, званий дельта-функція Дірака, який виявляється важливим інструментом у квантовій механіці. Але, незважаючи на назву, цей об'єкт насправді не є функцією в звичайному сенсі. Він дорівнює нулю, коли $x \neq x'$, але за $x = x'$ він звертається в нескінченність. Ця нескінченність настільки нескінченна, наскільки це необхідно, щоб площа під $\delta(x)$ дорівнювала б 1. Грубо кажучи, дельта-функція Дірака це така функція, яка відмінна від нуля в нескінченно малому інтервалі ϵ , і на цьому відрізку вона має значення $1/\epsilon$. Таким чином, його площа дорівнює 1, і, що важливіше, вона відповідає рівнянню (8.138). Функція

$$\frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-(nx)^2}$$

наближається до дельта-функції досить добре, коли n спрямовується до нескінченності. На малюнку 8.1 показано кілька таких функцій для кількох значень n . Навіть якщо ми зупинимося на $n = 10$, що не таке велике, ми побачимо, що графік функції вже перетворився на дуже вузький і високий пік.

8.1.3. Інтегрування частинами

Перш ніж обговорювати лінійні оператори, ми зробимо невеликий гачок, щоб нагадати вам про техніку, яка називається інтегрування частинами. Це досить просто, але необхідно для наших цілей. Ми будемо викори-



Мал. 8.1. Наближена вистава дельта функції Дірака. Наведено графіки залежності функції $\frac{n}{\sqrt{\pi}}e^{-(nx)^2}$ від змінної x для наростаючих значень параметра n .

стовувати його знову і знову. Припустимо, що маємо дві функції, F і G , і розглянемо диференціал їх твору FG . Ми можемо написати

$$d(FG) = FdG + GdF$$

або

$$d(FG) - GdF = FdG.$$

Обчислення певного інтегралу дає нам

$$\int_a^b d(FG) - \int_a^b GdF = \int_a^b FdG$$

або

$$(FG)\Big|_a^b - \int_a^b GdF = \int_a^b FdG.$$

Це стандартна формула, яку ви пам'ятаєте з математичного аналізу. Але в квантовій механіці межі інтегрування, як правило, охоплюють всю вісь, а наші хвильові функції повинні звернутися в нуль на нескінченності, щоб бути належним чином нормованими. Таким чином, перший член цього виразу завжди дорівнюватиме нулю. Маючи це на увазі, ми можемо використовувати спрощену версію інтегрування частинами:

$$\int_{-\infty}^{\infty} F \frac{dG}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dF}{dx} G dx.$$

Ця форма є правильною до тих пір, поки F і G відповідним чином прагнуть нуля на нескінченності, так що граничний член стає рівним нулю. Буде дуже корисно просто запам'ятати такий шаблон: Перекиньте похідну від одного множника у підінтегральному вираженні до іншого та змініть знак на протилежний.

8.1.4. Лінійні оператори

Бра та кети є лише половиною справи в квантовій механіці; інша половина включає поняття лінійних операторів та, зокрема, ермітових операторів. У зв'язку з цим виникає два питання:

- Який сенс вкладається у поняття лінійного оператора на просторі функцій?
- За якої умови лінійний оператор називається ермітовим?

Поняття лінійного оператора досить простий: це машина, що діє на одну функцію і дає іншу функцію. Коли лінійний оператор діє у сумі двох функцій, то дає суму окремих результатів. Коли він діє на функцію, помножену на комплексне число, то результат буде таким самим, як, якщо ми подіємо цим оператором на вихідну функцію і результат помножимо на дане комплексне число. Інакше кажучи, цей оператор (сюрприз!) лінійний.

Давайте розглянемо деякі приклади. Проста операція, яку ми можемо виконати з функцією $\psi(x)$, це помножити на x . В результаті ми отримаємо нову функцію $x\psi(x)$ і ви можете легко перевірити, що така дія є лінійною. Ми позначимо оператор "помножити на x " символом \mathbf{X} . За визначенням,

$$\mathbf{X}\psi(x) = x\psi(x). \quad (8.139)$$

Інший приклад. Визначимо \mathbf{D} як оператор диференціювання:

$$\mathbf{D}\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (8.140)$$

Вправа 8.1: Доведіть, що \mathbf{X} та \mathbf{D} є лінійними операторами.

Це, звичайно, лише мізерне підмножина можливих лінійних операторів, які можуть бути побудовані, але ми незабаром побачимо, що \mathbf{X} і \mathbf{D} відіграють дуже важливу роль у квантовій механіці частинок.

Тепер давайте розглянемо властивість ермітності. Зручним способом визначити ерміт оператор, є визначити властивості його матричних елементів, які виходять, коли даний оператор, так би мовити, поміщений між бра-і кет- векторами. Ви можете помістити оператор \mathbf{L} двома різними способами:

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Phi \rangle$$

або

$$\langle \Phi | \mathbf{L} | \Psi \rangle .$$

Загалом не існує простого зв'язку між цими двома бутербродами. Але у випадку ермітового оператора (для якого, за визначенням, $\mathbf{L}^\dagger = \mathbf{L}$) такий зв'язок існує: два такі "бутерброди" комплексно пов'язані один з одним:

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

Давайте подивимося чи є оператори \mathbf{X} і \mathbf{D} ермітовими. Нагадаємо, що

$$\mathbf{X}\psi(x) = x\psi(x),$$

і використовуючи формулу (8.136) для скалярного твору, запишемо

$$\langle \Psi | \mathbf{X} | \Phi \rangle = \int \psi^*(x)x\psi(x)dx$$

і

$$\langle \Phi | \mathbf{X} | \Psi \rangle = \int \phi^*(x) x \psi(x) dx.$$

Оскільки x є дійсне число, то легко бачити, що ці два інтеграли комплексно пов'язані один з одним, і, отже, що \mathbf{X} є ермітовим.

Як щодо оператора \mathbf{D} ? У цьому випадку двома "бутербродами" є

$$\langle \Psi | \mathbf{D} | \Phi \rangle = \int \psi^*(x) \frac{d\phi(x)}{dx} dx \quad (8.141)$$

і

$$\langle \Phi | \mathbf{D} | \Psi \rangle = \int \phi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx. \quad (8.142)$$

Для того, щоб визначити, чи є \mathbf{D} ермітів, нам потрібно порівняти ці два інтеграли та подивитися, чи вони є комплексно пов'язаними один одного чи ні. У тій формі, в якій вони записані, важко сказати. Хитрість полягає в тому, щоб взяти другий інтеграл частинами. Як ми вже пояснювали, інтегрування частинами дозволяє перекинути похідну від одного множника в підінтегральному вираженні до іншого, якщо, звичайно, ви при цьому змініте загальний знак. Тому інтеграл у рівнянні (8.142) можна переписати у такому вигляді

$$\langle \Phi | \mathbf{D} | \Psi \rangle = - \int \psi(x) \frac{d\phi^*(x)}{dx} dx. \quad (8.143)$$

Тепер нам просто потрібно порівняти два вирази у формулах (8.141) та (8.143), що виявляється вже не так важко. Через зайвий знак мінус ясно, що ці вирази не є комплексно пов'язаними. Співвідношення між ними виглядає так

$$\langle \Psi | \mathbf{D} | \Phi \rangle = - \langle \Phi | \mathbf{D} | \Psi \rangle^* .$$

що є діаметральною протилежністю того, що ми хотіли. На відміну від оператора \mathbf{X} , \mathbf{D} не є ермітовим. Натомість такий оператор задовольняє наступній умові

$$\mathbf{D}^\dagger = -\mathbf{D}$$

Оператор з цією властивістю називається антиермітом.

Хоча антиермітові та ермітові оператори протилежні, дуже легко перейти від одного до іншого. Все, що вам потрібно зробити, це помножити на уявне число i або $-i$. Тому ми можемо використовувати \mathbf{D} і побудувати ермітів оператор, а саме

$$-i\hbar\mathbf{D}.$$

Якщо ми подивимося як діє цей новий ерміт оператор на хвильову функцію, ми знайдемо,

$$-i\hbar\mathbf{D}\psi(x) = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (8.144)$$

Запам'ятайте цю формулу. Вона скоро гратиме провідну роль визначенні дуже важливої властивості частки, саме її імпульсу.

8.2. Стан частинки

У класичній механіці

“стан системи” означає все те, що вам потрібно знати, щоб передбачити майбутнє системи, зважаючи на сили, що діють на неї.

Це, звичайно, включає знання положень всіх частинок, що становлять систему, а також імпульсів цих частинок. З класичної точки зору, миттєві положення та імпульси повністю незалежні змінні. Наприклад, для частки маси m , що рухається по одновірній осі x , миттєвий стан системи описується парою (x, p) . Координата x вказує на розташування частинки, а $p = m\dot{x}$ вказує її імпульс. Взяті разом ці дві змінні визначають фазовий простір системи. Якщо ми також знаємо силу, що діє на частинку залежно від її положення, то рівняння Гамільтона дозволяють нам обчислити положення та імпульс частки у всі моменти часу. Ці рівняння визначають потік через фазовий простір.

За аналогією, можна було б припустити, що простір квантових станів частинки задається базовими станами, що маркуються двома індексами, а саме, положенням та імпульсом частинки:

$$|x, p\rangle.$$

Тоді хвильова функція була б функцією двох змінних:

$$\psi(x, p) = \langle x, p | \Psi \rangle.$$

Однак таке припущення неправильне. Ми вже бачили, що величини, які могли бути одночасно відомі у класичній фізиці, у квантовій механіці такими не є. Різні проекції спина, скажімо, σ_z і σ_x є одним з таких прикладів. Не можна знати обидві ці проекції одночасно. Тому, немає станів, у яких обидві зазначені проекції мають певне значення. Те саме справедливо і для x і p : не вимагайте від квантової механіки передбачити точне значення обох цих значень - для неї це занадто. Якщо ми говоримо про спини (σ_z, σ_x) або про положення та імпульс (x, p) , то їхня взаємна несумісність, зрештою, є результатом досвіду.

Що ж тоді ми можемо знати про частку на осі x , якщо не x і p ? Відповідь така: ми можемо знати x **або** p ; згідно з математичними властивостями операторів координати та імпульсу, вони не комутують один з одним. Але я підкреслюю, цю властивість неможливо передбачити заздалегідь; це квінтесенція багатьох десятиліть експериментальних спостережень.

Якщо положення частки є спостережуваною, то має бути ерміт оператор, пов'язаний з нею. Очевидним кандидатом є оператор \mathbf{X} . Перший крок у розумінні цього фундаментального зв'язку між інтуїтивним поняттям становища та математичним оператором \mathbf{X} є обчислення власних векторів та власних значень оператора \mathbf{X} . Власні значення являють собою значення положення, які можна спостерігати, а власні вектори являють собою стани з певним положенням (частки).

8.2.1. Власні значення та власні вектори координати

Очевидним є таке питання: Які можливі результати вимірювання \mathbf{X} , і які стани, в якому ця спостерігається має певне (передбачуване) значення? Іншими словами, які його власні значення та власні вектори? Почнемо з \mathbf{X} . Рівняння на власні значення для \mathbf{X} є,

$$\mathbf{X}|\Psi\rangle = x_0|\Psi\rangle,$$

де власне значення позначено x_0 . Використовуючи хвильову функцію, запишемо це рівняння як

$$x\psi(x) = x_0\psi(x). \tag{8.145}$$

Останнє рівняння видається дивним. Як функція, помножена на x , може бути пропорційна собі? На перший погляд це здається неможливим. Але давайте продовжимо. Ми можемо переписати рівняння (8.145) у такому вигляді

$$(x - x_0)\psi(x) = 0.$$

Звичайно, якщо добуток дорівнює нулю, то, принаймні, одним із співмножників, повинен дорівнювати нулю. Але інші співмножники можуть бути відмінними від нуля. Отже, якщо $x \neq x_0$, то обов'язково $\psi(x) = 0$. Це

дуже сильна умова. Воно говорить, що для заданого власного значення x_0 , функція $\psi(x)$ може бути відмінна від нуля тільки в одній точці, а саме

$$x = x_0.$$

Для звичайної безперервної функції ця умова була б смертельною: жодна розумна функція не може дорівнювати нулю всюди, крім однієї точки, і бути відмінною від нуля тільки в цій точці. Але це точно властивість дельта-функції Дірака

$$\delta(x - x_0)$$

Очевидно, що будь-яке речовинне число $x_0 \in \mathbf{X}$, і відповідні власні вектори є функціями (ми також називатимемо їх *власні функції*), які зосереджені тільки в точці $x = x_0$. Сенс цього зрозумілий: хвильові функції

$$\psi(x) = \delta(x - x_0)$$

являють собою стани, в яких частка знаходиться саме в точці x_0 на осі x .

Звичайно, звичайно, що хвильова функція, що є частинкою, про яку відомо, що вона знаходиться в точці x_0 , дорівнює нулю усюди, крім x_0 . Як може бути інакше? Але приємно бачити, що математика підтверджує це інтуїтивне судження.

Розглянемо скалярне твір стану $|\Psi\rangle$ і власного стану $|x_0\rangle$ оператора координати :

$$\langle x_0 | \Psi \rangle .$$

Використовуючи (8.136), отримаємо

$$\langle x_0 | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) \psi(x) dx.$$

За визначенням дельта-функції, даному в рівнянні (8.138), цей інтеграл дорівнює

$$\langle x_0 | \Psi \rangle = \psi(x_0). \quad (8.146)$$

Оскільки це вірно для будь-якого x_0 , ми можемо опустити індекс “0” і написати загальне рівняння

$$\langle x | \Psi \rangle = \psi(x). \quad (8.147)$$

Іншими словами, хвильова функція, $\psi(x)$, частинки, що рухається вздовж осі x є проекцією вектора стану $|\Psi\rangle$ на власні вектори оператора положення. Ми також називатимемо $\psi(x)$ хвильовою функцією в координатному поданні.

8.2.2. Імпульс та його власні вектори

Координата частки цілком інтуїтивно зрозуміла; імпульс - менш зрозумілий, зокрема, у квантовій механіці. Тільки пізніше ми зможемо побачити зв'язок між оператором, який назвемо оператором імпульсу, і звичним, класичним поняттям імпульсу, що визначається як добуток маси частки на її швидкість. Але я запевняю, що ми покажемо наявність такого зв'язку.

На даний момент, обмежимося абстрактною математикою. Оператор імпульсу в квантовій механіці називається \mathbf{P} , і визначається через оператор диференціювання як $-i\mathbf{D}$:

$$-i\mathbf{D} = -i \frac{d}{dx}.$$

Як ми бачили раніше в рівнянні (8.144), нам потрібен множник $-i$, щоб зробити цей оператор ермітовим.

Ми могли б просто залишити це визначення оператора імпульсу, але, якби ми зробили так, то ми зіткнулися б із проблемою пізніше, коли ми б спробували знайти зв'язок з визначенням імпульсу в класичній фізиці. Проблема полягає у невідповідності розмірностей. У класичній фізиці, розмірність імпульсу є розмірність маси помножити на розмірність швидкості, тобто маса помножити на довжину і розділити на час (кг · м / сек). Але оператор диференціювання \mathbf{D} має розмірність 1/м. Те, що вирішує проблему з розмірністю, є постійна Планка \hbar , розмірність якої кг · м²/сек. Таким чином, правильне співвідношення між \mathbf{P} і \mathbf{D} виглядає так,

$$\mathbf{P} = -i\hbar\mathbf{D} \quad (8.148)$$

або, дію на хвильову функцію,

$$\mathbf{P}\psi(x) = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (8.149)$$

Ті, хто займаються квантовою фізикою (квантові фізики), часто використовують одиниці, в яких \hbar рівно одиниці, і таким чином спрощують запис рівнянь. Як не принадно, ми так не робитимемо тут (щоб ви мали можливість більше стикатися з квантовими величинами, а я, у свою чергу, не зловживав формулами). Давайте знайдемо власні вектори та власні значення \mathbf{P} . Рівняння на власні значення абстрактних векторних позначеннях записується так,

$$\mathbf{P}|\Psi\rangle = p|\Psi\rangle, \quad (8.150)$$

де символ p є власним значенням \mathbf{P} . Рівняння (8.150) також можна переписати з використанням хвильової функції. Використовуючи співвідношення

$$\mathbf{P} = -i\hbar\frac{d}{dx},$$

ми можемо записати рівняння на власні значення так,

$$-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = p\psi(x)$$

або

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{ip}{\hbar}\psi(x).$$

З цим типом рівняння ми вже стикалися і раніше. Рішення має вигляд експоненти:

$$\psi_p(x) = Ae^{\frac{ipx}{\hbar}}.$$

Індекс p просто нагадує, що $\psi_p(x)$ є власним вектором оператора \mathbf{P} з власним значенням p . Ця хвильова функція є функцією x , але вона позначена (нижнім індексом) власним значенням \mathbf{P} .

Константа не визначається рівнянням на власні значення. У цьому нічого нового; рівняння на власні значення ніколи не дають нам загального нормування хвильової функції. Як правило, ми визначаємо константу, вимагаючи, щоб хвильова функція була нормована на одиничну ймовірність (але можливі інші типи нормування). Приклад з розділу 2.3: власний вектор x -проекції спина:

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

Множник $\frac{1}{\sqrt{2}}$ вибраний так, щоб повна ймовірність дорівнювала 1.

Нормування власні векторів \mathbf{P} є більш тонкою операцією, але результат все одно простий. Множина лише трохи складніше, ніж у випадку спина. Щоб заощадити час, я запишу відповідь і залишу її доказ. Правильний коефіцієнт є $= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Таким чином,

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}. \quad (8.151)$$

Цікавий висновок випливає з рівнянь (8.147) та (8.151). Скалярне твір власного вектора координати $|x\rangle$ і власного вектора імпульсу $|p\rangle$ має дуже простий і симетричний вигляд:

$$\begin{aligned} \langle x|p\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \\ \langle p|x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (8.152)$$

Друге рівняння є комплексно пов'язане першому. Ці результати легко перевірити, якщо ви згадаєте, що $|x\rangle$ представлена дельта-функцією. Я хотів би відзначити два важливі моменти, перш ніж рухатися далі:

1. Рівняння (8.151) є власною функцією оператора імпульсу в координатному поданні. Іншими словами, вона є функція від x , а не від p , хоча i є власним станом оператора імпульсу. Значення p у рівнянні (8.151) фіксоване.
2. Ми використовуємо той самий символ ψ для обох власних станів як координати так і імпульсу. Математик може не схвалити використання одного і того ж символу для двох різних функцій, але фізики роблять це весь час. $\psi(x)$ лише загальний символ для будь-якої хвильової функції, яку ми обговорюємо. Аргумент вказує на уявлення, в якому записана дана хвильова функція, координатне уявлення (x -подання) в даному випадку.

На цьому етапі вже починає потроху прояснитися те, чому хвильова функція називається хвильовою функцією. Ви повинні були звернути увагу на те, що власні функції (хвильові функції, що представляють власні вектори) оператора імпульсу мають вигляд хвиль - синусоїд та косінусоїд.

Тепер ми вже можемо побачити один із самих фундаментальних аспектів квантової механіки, а саме дуалізм хвиля-частка. Довжина хвилі наступної функції

$$e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

визначається як

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

тому, що значення функції не зміниться, якщо ми додамо $2\pi\hbar/p$ до змінної x :

$$e^{\frac{ip\left(x + \frac{2\pi\hbar}{p}\right)}{\hbar}} = e^{\frac{ipx}{\hbar}} e^{2\pi i} = e^{\frac{ipx}{\hbar}}.$$

Давайте зупинимося на хвилину, щоб обговорити важливість зв'язку між імпульсом і довжиною хвилі. Це не просто важливо: у багатьох відношеннях цей зв'язок якраз і визначив фізику двадцятого століття. Протягом останніх ста років фізики, переважно, займалися вивченням законів мікросвіту. Це означає, зокрема, з'ясування того, як об'єкти побудовані з дрібніших частин. Приклади очевидні: молекули виготовлені з атомів; атоми з електронів та ядер; ядра з протонів та нейтронів. Ці суб'ядерні частинки, у свою чергу, побудовані з кварків та глюонів. І гра з пошуку все більш дрібних і прихованих сутностей триває досі.

Всі ці об'єкти надто малі, щоб побачити їх у кращий оптичний мікроскоп, не кажучи вже про неозброєне око. Причина не лише в тому, що наші очі є недостатньо чутливими. Більш важливим фактом є те, що очі та оптичні мікроскопи чутливіші до видимої частини спектру, який включає довжини хвиль, які щонайменше у кілька тисяч разів більше, ніж розмір атома. Як правило, ви не можете дозволити об'єкти набагато менше, ніж довжина хвилі, яку ви використовуєте, щоб переглянути ці об'єкти. З цієї причини історія фізики двадцятого століття була значною мірою пов'язана з пошуком менших і менших довжин хвиль світла або інших видів хвиль.

У лекції 10, ми виявимо, що світло певної довжини хвилі складається з фотонів, імпульс якого пов'язаний з довжиною хвилі в точності таким самим співвідношенням, як було написано вище:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Сенс у тому, що у тому, щоб досліджувати об'єкти менших розмірів необхідні фотони (чи інші об'єкти) з дедалі більшими імпульсами. Великий імпульс неминуче означає велику енергію. Саме з цієї причини, відкриття мікроскопічних властивостей матерії потрібно дедалі потужніших прискорювачів частинок.

8.3. Перетворення Фур'є та імпульсне уявлення

Хвильова функція $\psi(x)$ відіграє важливу роль у визначенні ймовірності знаходження частки у точці простору з координатою x . Така ймовірність визначається таким чином,

$$P(x) = \psi^*(x)\psi(x).$$

Як побачимо, жоден експеримент неспроможна визначити, як становище і імпульс частки одночасно. Але якщо ми утримаємося від вимірювання положення частинки, то імпульс може бути виміряний точно. Ситуація абсолютно аналогічна σ_x і σ_z компонентам спина. Будь-яке з цих значень може бути виміряне, але не обидва одночасно.

Якою є ймовірність того, що частка має імпульс p , якщо ми вирішимо виміряти його? Відповідь це питання є безпосереднім узагальненням принципів, викладених у лекції 3. Ймовірність того, що вимірювання імпульсу дасть значення p визначається так,

$$P(p) = |\langle P|\Psi\rangle|^2. \tag{8.153}$$

Об'єкт $\langle \mathbf{P} | \Psi \rangle$ називається хвильовою функцією стану $|\Psi\rangle$ в імпульсному поданні. Природно, що така функція хвиль є функцією імпульсу p і позначається новим символом:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle P | \Psi \rangle. \quad (8.154)$$

Тепер ясно, що існує (принаймні) два способи для представлення стану вектора. Один із способів це координатне уявлення, а інший спосіб це імпульсне уявлення. Обидві хвильові функції – координатна хвильова функція $\psi(x)$ і імпульсна хвильова функція $\tilde{\psi}(p)$ – являють собою той самий вектор стану, $|\Psi\rangle$. Звідси випливає, що має бути деяке перетворення між цими двома уявленнями так, що якщо ви знаєте $\psi(x)$, то перетворення вам дасть $\tilde{\psi}(p)$, і навпаки. Насправді ці два уявлення є Фур'є перетвореннями один одного.

8.3.1. Розкладання одиниці

Ми маємо намір продемонструвати міць дираківських бра-кет позначень у спрощенні складних обчислень. По-перше, давайте згадаємо важливу ідею з попередніх лекцій. Припустимо, що ми визначили ортонормований базис станів використовуючи власні вектори деякого ермітового оператора (оператора деякої спостережуваної). Позначимо базові вектори $|i\rangle$. У лекції 7, я пояснив дуже корисний трюк, і тепер ми переконаємося, наскільки він корисний. Цей трюк називається *розкладання одиниці*. Трюк наведений у рівнянні (7.113) і полягає в тому, щоб записати одиничний оператор I (оператор, який діє на будь-який вектор, і повертає той самий вектор) у такому вигляді

$$\mathbf{I} = \sum_i |i\rangle \langle i|.$$

Оскільки оператор імпульсу і оператор обидва положення є ермітовими операторами, то кожна з множин векторів $|x\rangle$ і $\langle p|$ визначають вектори допу-

стимого базису. Замінюючи підсумовування інтегруванням, ми отримуємо два різні розкладання одиниці:

$$\mathbf{I} = \int dx |x\rangle \langle x| \quad (8.155)$$

і

$$\mathbf{I} = \int dp |p\rangle \langle p|. \quad (8.156)$$

Давайте припустимо, що ми знаємо хвильову функцію абстрактного вектора $|\Psi\rangle$ в координатному поданні. За визначенням, така хвильова функція дорівнює

$$\psi(x) = \langle x|\Psi\rangle. \quad (8.157)$$

Тепер припустимо, що ми хочемо знати, хвильову функцію *tilde psi* (p) того ж стану, але в імпульсному уявленні. Ось кроки, які вирішують це завдання:

- Перше, використовуйте визначення хвильової функції в імпульсному поданні:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\Psi\rangle.$$

- Потім, вставте одиничний оператор між бра-і кет- векторами, у формі даної (8.155):

$$\tilde{\psi}(p) = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\Psi\rangle.$$

- Вираз $\langle x|\Psi\rangle$ є просто хвильова функція $\psi(x)$, а $\langle p|x\rangle$ визначається другим рівнянням (8.152):

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}.$$

- Збираючи все це разом, отримаємо

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x). \quad (8.158)$$

Це рівняння показує нам точно, як перетворити хвильову функцію, задану в координатному уявленні, в хвильову функції в імпульсному представленні. Навіщо це може стати в нагоді? Припустимо, ми знаємо координатну хвильову функцію для деякої частинки. Проте в експерименті хочемо виміряти імпульс частинки. Тому хочемо знати ймовірність спостереження імпульсу p . Для цього нам необхідно спочатку обчислити $\tilde{\psi}(p)$ за допомогою формули (8.158), а потім обчислити ймовірність,

$$P(p) = \tilde{\psi}^*(p)\tilde{\psi}(p).$$

Зворотний шлях такий самий легкий. Припустимо, що ми знаємо $\tilde{\psi}(p)$ і хочемо відновити $\psi(x)$. У цьому випадку ми використовуємо розкладання одиниці з рівняння (8.156). Ось кроки для перетворення (зверніть увагу, що ця процедура виглядають підозріло схожою на ту, що ми розібрали раніше):

- Перше, використовуйте визначення хвильової функції в координатному поданні:

$$\psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$$

- Потім, вставте одиничний оператор між бра-і кет- векторами, у формі даної (8.156):

$$\psi(x) = \int \frac{dp}{h} \langle x|p\rangle \langle p|\Psi\rangle.$$

- Вираз $\langle p|\Psi\rangle$ є просто хвильова функція $\tilde{\psi}(p)$, і $\langle x|p\rangle$ визначається першим рівнянням в (8.152):

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}.$$

- Збираючи все це разом, отримаємо

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{dp}{h} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \tilde{\psi}(p).$$

Давайте ще раз поглянемо на рівняння для перетворень з координатного в імпульсне уявлення та назад. Зверніть увагу на те, як симетричні вони. Єдина асиметрія і те, що одне рівняння містить $e^{\frac{ipx}{\hbar}}$, а інше містить $e^{\frac{-ipx}{\hbar}}$:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x) \\ \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{dp}{h} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \tilde{\psi}(p). \end{aligned} \quad (8.159)$$

Співвідношення між координатним та імпульсним уявленнями, узагальнене у формулах (8.159), показує, що вони є взаємним Фур'є перетворенням один одного. Насправді це центральні рівняння в області аналізу Фур'є. Я хочу, щоб ви звернули увагу, як легко було вивести ці рівняння, використовуючи елегантні позначення Дірака.

8.4. Комутатори та дужки Пуассона

Раніше, в лекції 4, ми сформулювали два важливі принципи про комутатори. Перший принцип має відношення до зв'язку між класичною механікою та квантовою механікою, а другий - пов'язаний із невизначеністю.

Зараз я закінчу цю дуже довгу лекцію, показавши вам, як ці принципи працюють у випадку з такими, що спостерігаються як координата \mathbf{X} і імпульс \mathbf{P} .

Почнемо із зв'язку між комутаторами та класичною фізикою. Як ви пам'ятаєте, ми виявили, що комутатори мають велику схожість із дужками Пуассона. Відношення між ними представлено у явному вигляді у рівнянні (4.65). Якщо підставити символи операторів \mathbf{L} і \mathbf{M} , які ми використовували у цій лекції, отримаємо

$$[\mathbf{L}, \mathbf{M}] \Leftrightarrow i\hbar \{L, M\}, \quad (8.160)$$

що говорить нам про те, що квантові рівняння руху дуже нагадують їх класичні еквіваленти. Ця аналогія наштовхує нас на думку про те, що ми можемо дізнатися щось цікаве, обчислюючи комутатор \mathbf{X} і \mathbf{P} . На щастя, це легко зробити.

По-перше, давайте подивимося, як діє твір \mathbf{XP} на довільну хвильову функцію $\psi(x)$. Враховуючи рівняння (8.139) та (8.149), ми можемо написати

$$\begin{aligned} \mathbf{X}\psi(x) &= x\psi(x) \\ \mathbf{P}\psi(x) &= -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}. \end{aligned}$$

Обидва ці висловлювання разом кажуть нам як саме твір \mathbf{XP} діє на хвильову функцію $\psi(x)$:

$$\mathbf{XP}\psi(x) = -i\hbar x \frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (8.161)$$

Далі давайте зробимо те саме, але з цими операторами, розташованими в іншому порядку:

$$\mathbf{P}\mathbf{X}\psi(x) = -i\hbar \frac{d(x\psi(x))}{dx}.$$

Щоб обчислити останній вираз, ми просто використовуємо стандартне правило диференціювання твору $x\psi(x)$. Використовуючи це правило, легко бачити, що

$$\mathbf{P}\mathbf{X}\psi(x) = -i\hbar x \frac{d\psi(x)}{dx} - i\hbar\psi(x). \quad (8.162)$$

Тепер ми віднімемо рівняння (8.162) із рівняння (8.161), щоб знайти, як комутатор діє на хвильову функцію:

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}]\psi(x) = \mathbf{X}\mathbf{P}\psi(x) - \mathbf{P}\mathbf{X}\psi(x)$$

або

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}]\psi(x) = i\hbar\psi(x).$$

Інакше кажучи, коли комутатор $[\mathbf{X}, \mathbf{P}]$ діє на довільну хвильову функцію $\psi(x)$, то все, що він робить так це множить $\psi(x)$ на число $i\hbar$. Ми можемо висловити це так

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar. \quad (8.163)$$

Це саме собою є надзвичайно важливим. Той факт, що \mathbf{X} і \mathbf{P} не комутують є ключем до розуміння того, чому вони не є одночасно вимірними. Але все стає ще цікавішим, коли ми порівняємо це рівняння із співвідношенням (8.160), яке пов'язує комутатори та класичні дужки Пуассона. Справді, рівняння (8.163) передбачає, що відповідні класичні дужки Пуассона повинні дорівнювати

$$\{x, p\} = 1,$$

що точно так і є (дивись будь-який курс з класичної механіки, наприклад, Ланлау, Ліфшиц, курс Теоретична фізика, Том 1). Зрештою, саме це співвідношення пояснює, чому квантова концепція імпульсу пов'язана з класичним поняттям імпульсу.

Використовуючи загальний принцип невизначеності з лекції 5, ми можемо розглянути окремий випадок,

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar,$$

і

$$\Delta\mathbf{X}\Delta\mathbf{P} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Ми зробимо це у наступному розділі.

Але спочатку давайте згадаємо другий принцип за участю комутаторів. У лекції 4, ми виявили, що дві спостерігаються \mathbf{L} і \mathbf{M} не можуть бути визначені одночасно, якщо вони не комутують. Якщо вони не комутують, ви не можете виміряти \mathbf{L} без того, щоб вплинути на вимір \mathbf{M} . Інакше кажучи, неможливо знайти власні вектори одночасно двох некоммутируючих спостерігаються. Це спричинило загальний принцип невизначеності.

8.5. Принцип невизначеності Гайзенберга

А тепер, пані та панове, ось те, що ви всі чекали. Нарешті: *принцип невизначеності Гейзенберга*.

Принцип невизначеності Гейзенберга є одним із найвідоміших результатів квантової механіки: він не тільки стверджує, що положення та імпульс частинки не можуть бути відомі одночасно, але він також оцінює точну квантову межу для їхньої взаємної невизначеності. У цьому місці я пропоную вам ще раз повернутися до лекції, де я пояснив загальний

принцип невизначеності. Ми зробили все необхідне там і тепер ми можемо пожинати плоди.

Як ми вже бачили, загальний принцип невизначеності накладає кількісне обмеження на одночасні невизначеності двох \mathbf{A} і \mathbf{B} . Ця ідея була виражена в нерівності (5.91):

$$\Delta\mathbf{A}\Delta\mathbf{B} \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle|.$$

Тепер давайте застосуємо цей принцип безпосередньо до операторів координати \mathbf{X} та імпульсу \mathbf{P} . І тут комутатор просто число, та її очікуване значення дорівнює йому самому. Замінюючи \mathbf{A} і \mathbf{B} на \mathbf{X} і \mathbf{P} , отримаємо

$$\Delta\mathbf{X}\Delta\mathbf{P} \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [\mathbf{X}, \mathbf{P}] | \Psi \rangle|.$$

і, нарешті, заміна комутатора $[\mathbf{X}, \mathbf{P}]$ його значенням $i\hbar$ дає

$$\Delta\mathbf{X}\Delta\mathbf{P} \geq \frac{1}{2} |i\hbar \langle \Psi | \Psi \rangle|.$$

Але $\langle \Psi | \Psi \rangle$ дорівнює 1, тому, остаточно маємо

$$\Delta\mathbf{X}\Delta\mathbf{P} \geq \frac{1}{2}\hbar.$$

Жоден експеримент ніколи не може оминати це обмеження. Ви можете зробити все можливе, щоб одночасно визначити імпульс і положення частинки відтворюваним способом, але незалежно від того, наскільки ретельно ви виконуватимете вимірювання, невизначеність координати помножена на невизначеність імпульсу ніколи не буде меншою, ніж $\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar$.

Як ми бачили в розділі 8.2.1, хвильова функція для свого стану оператора координати \mathbf{X} сильно сконцентрована при деякій точці x_0 ; у цьому власному стані, ймовірність також ідеально локалізована (біля тієї ж точки). З іншого боку, можливість $P(x)$ для хвильової функції свого стану оператора імпульсу поступово розподілена по всій осі x . Щоб переконатися

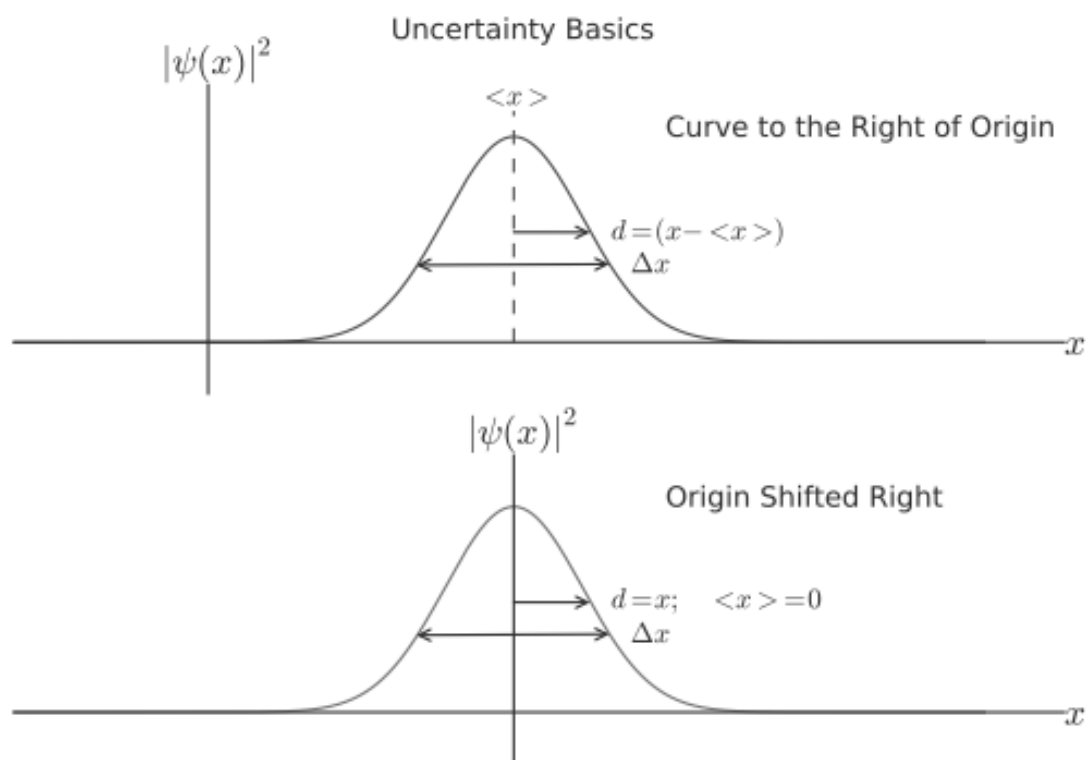
в цьому, візьмемо хвильову функцію з рівняння (8.151) і помножимо її на комплексно сполучене:

$$\psi_p^*(x)\psi_p(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}e^{-\frac{ipx}{\hbar}}} \right) \left(\sqrt{2}e^{\frac{ipx}{\hbar}} \right) = \frac{1}{2\pi}.$$

Результат абсолютно однорідний, без жодних піків уздовж всієї осі x . Очевидно, що стан з певним імпульсом, положення (частки) зовсім не визначено.

Малюнок 8.2 ілюструє визначення невизначеності для координат x . У верхній частині малюнка, ви можете побачити, що невизначеність Δx є мірою того, як хвильова функція розмазана по відношенню до очікуваного значення координати частки $\langle x \rangle$. Буквою d позначено відхилення точки графіка по відношенню до середнього значення $\langle x \rangle$; це відхилення може бути позитивним чи негативним. Невизначеність Δx визначається як результат процесу усереднення по всіх можливих d . Ця невизначеність характеризує всю функцію цілком. Щоб уникнути небажаного скорочення вкладів від позитивних та негативних d , за усереднення кожне значення зведено в квадрат.

У нижній половині малюнка 8.2 показано, як обчислення може бути спрощено шляхом зсуву початку координат у точку з координатою, що дорівнює $\langle x \rangle$. При цьому чисельне значення Δx не змінюється.



Мал. 8.2. Основи визначеності. Верхній малюнок: Середнє значення $\langle x \rangle$ знаходиться праворуч від початку координат. Відхилення d може бути як позитивним, і негативним. Загальна невизначеність Δx (> 0) визначається як середнє значення d^2 . Нижній малюнок: Початок відліку зсунуто вправо, $\langle x \rangle = 0$, Δx теж саме, що і на верхньому малюнку.

9. Динаміка частинки

Art and Lenny expected some action at Hilbert's Place. But all the state-vectors were absolutely still—frozen, you might say.

Lenny: This is boring, Art. Doesn't anything ever happen around here? Hey Hilbert, why is this joint so still?

Hilbert: Oh, don't worry. Things will pick up as soon as the Hamiltonian gets here.

Art: The Hamiltonian? He sounds like a real operator.

9.1. Простий приклад

Фундаментальна різниця між класичною та квантовою фізикою найбільш яскраво проявляється у відповідях на наступні два питання.

Перше питання: Що ми розуміємо під системою та як ми описуємо миттєві стани системи? Як ми вже бачили, класичні та квантові відповіді на це питання дуже різні. Класичне фазове просторово - зокрема, безліч, простір координат і імпульсів - замінюється у квантової теорії лінійним векторним простором станів.

Друге велике питання: Як стану змінюються з часом? Як у класичній механіці так і в квантовій механіці, відповідь однакова: Стан змінюється відповідно до *мінус першого закону*. Іншими словами, стани змінюються так, що інформація та відмінності ніколи не знищуються. У класичній механіці цей принцип призводить до рівнянь Гамільтона та теореми Ліувіля. Раніше, в лекції 4, я пояснив, як у квантовій механіці цей закон призводить до принципу унітарності, який, у свою чергу, призводить до рівняння Шредінгера.

Лекція 8 була все ще про перше питання: Як ми описуємо стан частки? Тепер, у цій лекції ми підходимо до другого питання, яке ми могли б перефразувати: Як частинки рухаються у квантовій механіці?

У лекції 4, я виклав основні правила того, як квантові стани змінюються з часом. Істотним компонентом є гамільтоніан H , який у класичній

та квантовій механіці є повною енергією системи. У квантовій механіці гамільтоніан контролює еволюцію в часі системи через рівняння Шредінгера, що залежить від часу:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H |\Psi\rangle. \quad (9.164)$$

У цій лекції обговорюється все істотне про власне рівняння Шредінгера - рівняння, яке Шредінгер записав для опису квантово-механічної частки. Таке оригінальне рівняння Шредінгера є окремим випадком рівняння (9.164).

Рух звичайних (нерелятивістських) частинок у класичній механіці визначається гамільтоніаном, який дорівнює сумі кінетичної енергії та потенційної енергії. Ми незабаром прийдемо до квантової версії такого гамільтоніану, але спочатку давайте подивимося на ще простіший гамільтоніан.

Почнемо з найпростішого гамільтоніана, який можна вигадати. У цьому випадку оператор Гамільтона \mathbf{H} є твором константи та оператора імпульсу \mathbf{P} :

$$\mathbf{H} = c\mathbf{P}. \quad (9.165)$$

Цей приклад рідко використовується, хоча він є дуже повчальним. Константа c є фіксованим числом. Чи є $c\mathbf{P}$ осмисленим гамільтоніаном для частки? Так, і через деякий час ми дізнаємося, які частинки він описує. На даний момент, просто зауважимо, що рівняння (9.165) відрізняється від того, що ми могли б очікувати для нерелятивістської частки. Іншими словами, це не $\mathbf{P}^2/2m$. Цей простий приклад варто досліджувати насамперед, щоб подивитися, як працює математичний апарат.

Як би ми висловили цей приклад через хвильову функцію $\psi(x)$ в координатному поданні? Для початку, ми підставимо наші оператори в рівняння Шредінгера, що залежить від часу (9.164):

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -ci\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x}.$$

Зверніть увагу, що ми зараз пишемо ψ як функцію двох змінних x і t . Зменшуючи множники $i\hbar$, отримуємо

$$\frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} = -c \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial x}, \quad (9.166)$$

який є досить простим рівнянням. Насправді будь-яка функція від аргументу $(x - ct)$ є рішенням. Під терміном “функція від аргументу $(x - ct)$ ” я маю на увазі будь-яку функцію, яка залежить не від x і t окремо, а лише від комбінації $(x - ct)$. Щоб побачити, як це працює, просто розглянемо довільну функцію $\psi(x - ct)$ і обчислимо її похідні. Приватна похідна x , є

$$\frac{\partial\psi(x - ct)}{\partial x} = \frac{\partial\psi(z)}{\partial z}$$

оскільки похідна від $(x - ct)$ до x дорівнює 1. А приватна похідна t дорівнює

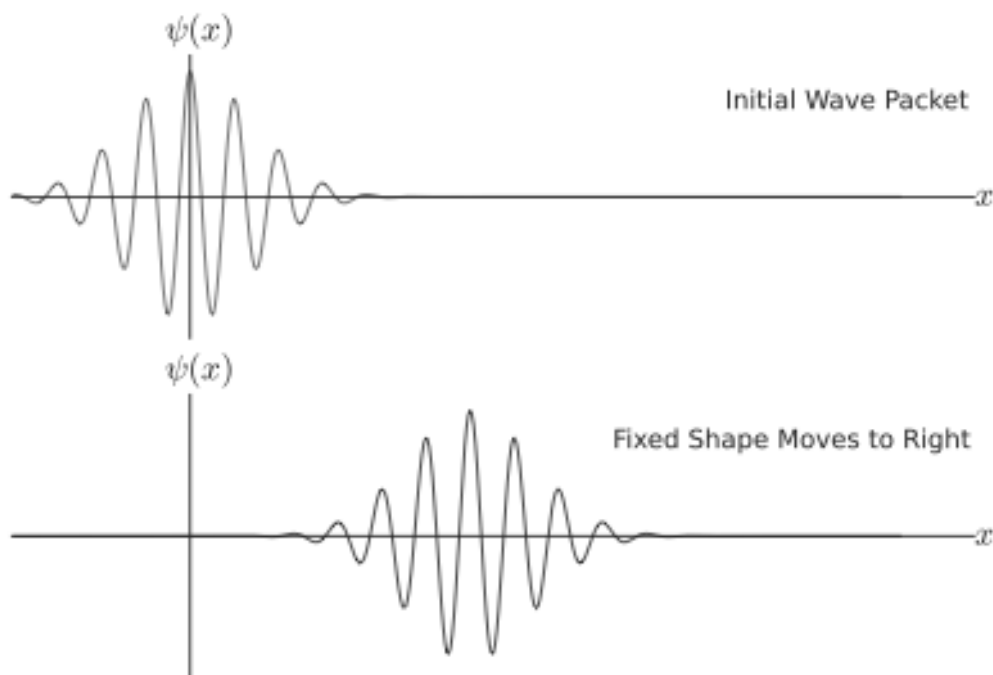
$$\frac{\partial\psi(x - ct)}{\partial t} = -c \frac{\partial\psi(z)}{\partial z},$$

де ми позначили аргумент хвильової функції $z = x - ct$. Зрозуміло, що комбінація таких похідних відповідає рівнянню (9.166). Тому будь-яка функція від $(x - ct)$ вирішує рівняння Шредінгера (з аналізованим гамільтоніаном).

Тепер давайте подивимося, як функція $\psi(x - ct)$ поводить ся. На що це схоже? Як це змінюється з часом? Давайте почнемо з часу $t = 0$. Те, що ми отримаємо, можна назвати $\psi(x)$, оскільки це свідчить про те, як хвильова функція ψ залежить від свого аргументу в кожній точці простору в заданий час $t = 0$. Звичайно, не всяка функція аргументу $(x - ct)$ нам підійде. Нам потрібні тільки нормовані на одиницю функції, оскільки ми хочемо, щоб загальна ймовірність

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx$$

дорівнювала 1. Іншими словами, ми хочемо, щоб $\psi(x)$ убувала досить швидко на нескінченності так, щоб інтеграл не розходився. На рисунку 9.1 схематично показаний приклад допустимої $\psi(x)$. Функцію $\psi(x)$ з такою поведінкою має сенс називати *хвильовий пакет*.



Мал. 9.1. Хвильовий пакет постійної форми, що рухається з постійною швидкістю c .

Тепер, коли ми описали знімок хвильової функції $\psi(x)$ за $t = 0$, ми можемо запитати, що станеться, якщо ми дозволимо часу рухатися вперед? При зростанні t , хвильовий пакет зберігає ту саму форму. Кожен вигин функції $\psi(x, t)$ рухається зі швидкістю c вправо.

У мене була причина для того, щоб позначити константу буквою c , яка часто використовується для позначення швидкості світла. То це частка є фотона? Ні не зовсім. Але наш опис цієї гіпотетичної частки є досить близьким до правильного опису нейтрино, частинки, яка рухається зі швидкістю світла. (Справжні нейтрино, ймовірно, рухаються зі швидкістю

трохи менше, ніж швидкість світла.) Цей гамільтоніан давав би дуже хороший опис одновимірного нейтринно за винятком однієї проблеми: частка, що описується нашою хвильовою функцією, може рухатися тільки вправо. Щоб завершити цей опис, ми повинні додати ще одну можливість, а саме щоб частка могла також переміщатися вліво!

Наша рухома-право частка має ще одну дивну особливість - її енергія може бути як позитивною так і негативною. Це відбувається тому, що оператор \mathbf{P} як вектор може приймати позитивні або негативні значення. У загальному випадку, енергія частинки з негативним імпульсом є негативною, а енергія частки з позитивним позитивним імпульсом. Я не говоритиму більше про це за винятком того, що проблема негативної енергії для такого роду частинки була вирішена Діраком, який використав її (цю проблему), щоб теоретично обґрунтувати існування античастинок. Для наших цілей ми можемо ігнорувати це питання і просто дозволити енергії нашої частки бути як позитивною так і негативною.

Оскільки хвильова функція нашої частки рухається без зміни форми вздовж осі x , то аналогічно рухається розподіл ймовірностей. В результаті, очікуване значення координати x (хвильового пакета) рухається таким же чином, що дозволяє сказати, що наша частка рухається вправо зі швидкістю c . В останньому твердженні і полягає все найважливіше, що квантова механіка говорить нам про поведінку нашої частки. Проте є ще одна важлива річ, яку необхідно мати на увазі. Коли ми говоримо, що швидкість c є фіксованою константою, ми не жартуємо. Наша частка може існувати лише в стані, коли вона рухається із цією конкретною швидкістю. Частка ніколи не може сповільнитись або прискоритися.

Як це співвідноситься з класичним описом такої частки? Використовуючи той самий гамільтоніана, класичний фізик (тобто фізик, який користується законами класичної фізики) просто записав би рівняння Гамільтона. Для $H = cP$, рівняння Гамільтона є

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x}$$

и

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{p}.$$

Виконуючи диференціювання, отримуємо

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x} = c$$

і

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{p} = 0.$$

Таким чином, у класичному описі нашої частки імпульс зберігається, а координата рухається з фіксованою швидкістю c . У квантово-механічному описі весь розподіл ймовірностей і очікувана величина координати рухаються зі швидкістю c . Іншими словами,

очікуване значення координати (квантової частки) веде себе відповідно до класичних рівнянь руху.

9.2. Нерелятивістські вільні частки

Тільки безмасові частинки можуть рухатися зі швидкістю світла c , і я міг би додати, що вони можуть рухатися лише з цією швидкістю. Всі відомі частинки, крім фотонів та гравітонів, масивні і можуть переміщатися з швидкістю менше, ніж c . Коли вони рухаються зі швидкістю, набагато менше швидкості світла, вони називаються нерелятивістськими і їхній рух регулюється звичайною механікою ньютонівської, принаймні, класично. Найбільш раннє застосування квантової механіки стосувалося руху нерелятивістських частинок.

Я показав раніше (у лекціях 4 і 8), що дужки Пуассона грають ту ж математичну роль у класичній механіці, як і комутатори у квантовій

механіці. Написані з використанням цих конструкцій, класичні та квантові рівняння руху практично ідентичні за формою. Зокрема, гамільтоніан входить однаково як у дужки Пуассона, так і в комутатори. Отже, якщо ви хочете записати квантово-механічні рівняння руху системи, для якої ви вже знаєте класичний опис, то цілком розумним є спробувати використати класичний гамільтоніан, переведений в операторну форму.

Для нерелятивістської вільної частки природним пробним гамільтоніаном є $p^2/2m$. Коли ми говоримо, що частка вільна, то насправді маємо на увазі, що жодні сили не діють на неї, і тому ми можемо ігнорувати потенційну енергію. Все, про що ми дбаємо так це про кінетичну енергію, яка визначається як

$$T = \frac{1}{2}mv^2.$$

Як ви пам'ятаєте, імпульс класичної частки дорівнює

$$p = mv.$$

Гамільтоніан у цьому випадку це лише кінетична енергія, яку ми можемо виразити через імпульс p . Це дає нам

$$H = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

для гамільтоніана класичної нерелятивістської вільної частки. На відміну від частинок, що рухаються тільки вправо, з попереднього прикладу, енергія даної частинки не залежить від напрямку його руху. Це тому, що енергія пропорційна p^2 , а не самому p . Таким чином, ми почнемо з частки, енергія якої дорівнює $p^2/2m$ і отримаємо рівняння Шредінгера (оригінальне рівняння, яке отримав Шредінгер) для вільної частки.

Наш план полягає в тому, щоб дотримуватися тієї ж процедури, що ми використовували в попередньому прикладі, коли виходячи з гамільтоніана отримали рівняння Шредінгера, що залежить від часу. Як завжди, ліва частина рівняння є

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Ми виводимо праву частину шляхом переписування класичного гамільтонова – кінетичної енергії – як оператора. Класична кінетична енергія є

$$p^2/2m.$$

У квантовому випадку ми замінюємо імпульс p оператором імпульсу \mathbf{P} :

$$\mathbf{H} = \mathbf{P}^2/2m.$$

Що це означає? Як ми вже бачили, оператор \mathbf{P} визначається як

$$\mathbf{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

Квадрат \mathbf{P} є просто оператором, який ви отримуєте, дозволяючи \mathbf{P} двічі діяти послідовно. Таким чином,

$$\mathbf{P}^2 = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right),$$

або

$$\mathbf{P}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

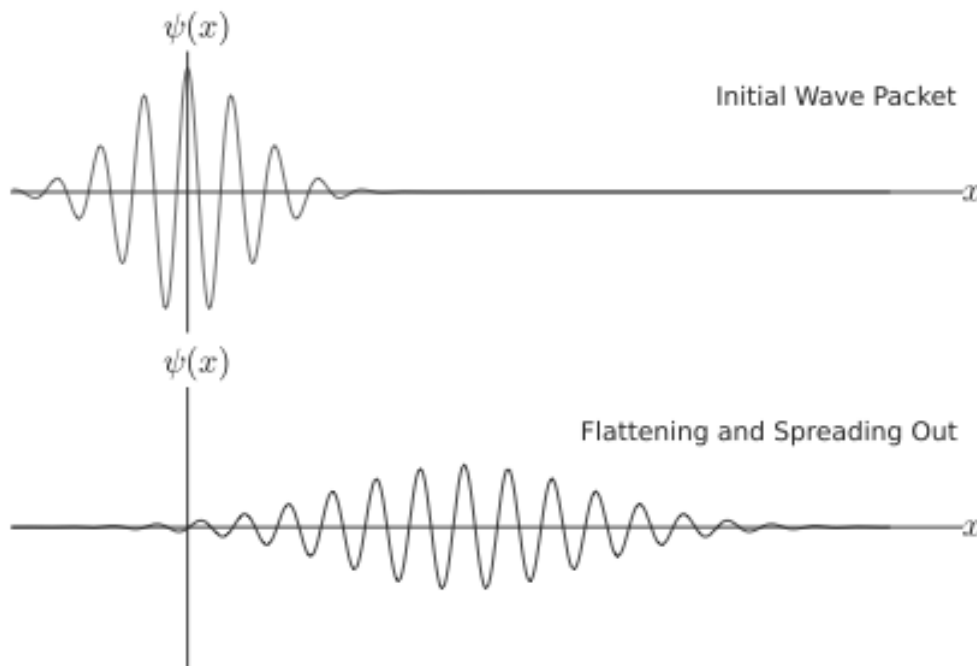
і гамільтоніан стає

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

І, нарешті, якщо ми прирівняємо ліві та праві частини рівняння Шредінгера, що залежить від часу, то ми отримаємо

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (9.167)$$

Це традиційне рівняння Шредінгера для звичайної нерелятивістської вільної частки. Це особливий вид хвильового рівняння, але, на відміну попереднього прикладу, хвилі різної довжини хвилі (і імпульсу) рухаються з різними швидкостями. Через це хвильова функція не зберігає свою форму. На відміну від хвильової функції попереднього прикладу, дана хвильова функція має тенденцію розпливатися і розвалюватися. Це схематично показано на рис. 9.2.



Мал. 9.2. Типовий хвильовий пакет для нерелятивістської вільної частки. Верхній малюнок: Початковий хвильовий пакет є компактним та сильно локалізованим. Нижній малюнок: З часом хвильовий пакет зміщується вправо та розпливається.

9.3. Рівняння Шредінгера, що не залежить від часу

Ми маємо намір вирішити залежне від часу рівняння Шредінгера для нерелятивістської вільної частки, але спочатку нам потрібно вирішити версію цього рівняння, що не залежить від часу. Не залежить від часу рівняння є, по суті, рівняння на власні значення для гамільтоніана,

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle,$$

або записане явно для хвильової функції $\psi(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E \psi(x). \quad (9.168)$$

Дуже легко знайти повний набір власних векторів, які відповідають цьому рівнянню. Насправді власні вектори імпульсу вже виконали всю роботу. Давайте спробуємо функцію

$$\psi(x) = e^{\frac{ipx}{\hbar}} \quad (9.169)$$

як можливе рішення. Обчисливши похідних, ми бачимо, що ця функція є рішенням рівняння (9.168), якщо ми покладемо

$$E = p^2/2m. \quad (9.170)$$

Навряд чи є сюрпризом те, що E є власним значенням енергії в рівнянні (9.168).

Вправа 9.1: Виведіть (9.170) шляхом підстановки рівняння (9.169) до рівняння (9.168).

Як ми бачили в розділі 4.13, кожне рішення рівняння Шредінгера, що не залежить від часу, дозволяє побудувати і залежне від часу рішення. Все, що нам потрібно зробити, це помножити рішення, що не залежить від часу - в даному випадку $e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ - на множник $e^{\frac{-iEt}{\hbar}} = e^{-i\frac{p^2t}{2m\hbar}}$. Таким чином, весь набір рішень можна записати як

$$\psi(x, t) = \exp \frac{i \left(px - \frac{p^2t}{2m} \right)}{\hbar}.$$

Будь-яке рішення є сумою (або інтегралом від) таких рішень:

$$\psi(x, t) = \int \tilde{\psi}(p) \left(\exp \frac{i \left(px - \frac{p^2t}{2m} \right)}{\hbar} \right) dp.$$

Ви можете почати з будь-якої хвильової функції при $t = 0$, знайти $\tilde{\psi}(p)$ за допомогою перетворення Фур'є, і дозволити їй змінюватися з часом (відповідно до вищенаведеного рівняння). Форма хвильової функції змінюватиметься, тому що хвилі для різних значень імпульсу p рухаються з різними швидкостями. Але, як ми незабаром побачимо, загальний хвильовий пакет рухатиметься зі швидкістю $\langle p/m \rangle$, такий же, як і класична частка.

Це просте загальне рішення має важливе значення. Крім того, це говорить про те, що хвильова функція в імпульсному уявленні змінюється з часом дуже простим способом:

$$\tilde{\psi}(p, t) = \tilde{\psi}(p) \exp \frac{i \left(px - \frac{p^2t}{2m} \right)}{\hbar}.$$

Іншими словами, лише фаза змінюється з часом, тоді як амплітуда залишається постійною. Звідси безпосередньо випливає, що розподіл ймовірності $P(p)$ не змінюється взагалі з часом. Це, звичайно, є наслідком збереження імпульсу, але це має місце лише тоді, коли немає сил, що діють на частинку.

9.4. Швидкість та імпульс

Досі я не пояснив зв'язок між оператором \mathbf{P} та класичним поняттям імпульсу - а саме, маса помножена на швидкість, або

$$v = p/m. \quad (9.171)$$

Що ми маємо на увазі під швидкістю квантово-механічної частки? Найпростіша відповідь полягає в тому, що ми маємо на увазі похідну за часом від середнього становища $\langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle$:

$$v = \frac{d \langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle}{dt}$$

або, конкретніше, через хвильову функцію,

$$v = \frac{d}{dt} \int \psi^*(x, t) x \psi(x, t).$$

Чому $\langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle$ змінюються з часом? Це тому, що хвильова функція *psi* залежить від часу, і насправді ми знаємо, як саме. Тимчасова залежність ψ регулюється рівнянням Шредінгера, що залежить від часу. Ми могли б використати цей факт, щоб з'ясувати те, як саме $\langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle$ змінюється з часом. Я так і вчинив - не лукаво вираховував залежність від часу - але на це знадобилося кілька сторінок обчислень. На щастя, абстрактні методи, про які ви дізналися у попередніх лекціях, дозволяють зробити це набагато простіше; насправді, ми вже проробили більшу частину роботи в лекції 4. Перш ніж ми продовжимо, я рекомендую вам повторити лекцію 4, особливо розділ 4.9, від початку до появи рівняння (4.61). Нагадаємо рівняння (4.61),

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

Проговоримо це рівняння: похідна за часом від середнього значення будь-

якої \mathbf{L} обчислюється як добуток $i\hbar$ і очікуваного значення комутатора гамільтоніана з \mathbf{L} . Застосовуючи це правило до швидкості v , ми знаходимо,

$$v = \frac{i}{2m\hbar} \langle [\mathbf{P}^2, \mathbf{X}] \rangle. \quad (9.172)$$

Нагадаємо, що як оператор \mathbf{L} ми взяли оператор координати, а квадрат імпульсу походить з гамільтоніана.

Тепер все, що нам потрібно зробити, так це обчислити комутатор \mathbf{P}^2 та \mathbf{X} . Декілька простих кроків показують, що

$$[\mathbf{P}^2, \mathbf{X}] = \mathbf{P} [\mathbf{P}, \mathbf{X}] + [bfP, \mathbf{X}] \mathbf{P}. \quad (9.173)$$

Це співвідношення може бути перевірено шляхом розкладання кожного комутатора та виконання кількох очевидних скорочень.

Вправа 9.2: Доведіть (9.173) шляхом розкладання кожної сторони та порівнюючи результат почленно.

На останньому кроці використовуємо стандартне комутаційне співвідношення

$$[\mathbf{P}, \mathbf{X}] = -i\hbar.$$

Підставляючи це рівняння (9.173) і потім підставляючи отриманий результат рівняння (9.172), ми бачимо, що

$$v = \frac{\langle \mathbf{P} \rangle}{m}$$

або у більш знайомому вигляді,

$$\langle \mathbf{P} \rangle = mv. \quad (9.174)$$

Ми довели явно те, що й мали намір довести: імпульс дорівнює добутку маси на швидкість, або, точніше, середній імпульс дорівнює масі помноженій на швидкість.

Щоб отримати краще уявлення про те, що це означає, припустимо, що хвильова функція має вигляд пакета, або досить вузького пагорба. Очікуване значення координати x буде приблизно у центрі пагорба. Рівняння (9.174) говорить нам про те, що центр хвильового пакету рухається згідно з класичним правилом $p = mv$.

9.5. Квантування

Перед тим, як перейти до теми про сили в квантовій механіці, я хочу зробити паузу та обговорити те, що ми зробили. Ми розпочали з добре відомої та добре перевіреної класичної системи – вільної частки – і проквантували її. Ми можемо кодифікувати таку процедуру (квантування) таким чином:

1. Почніть із класичної системи. Тобто, з набору координат x та імпульсів p . У нашому прикладі була лише одна координата і один імпульс, але процедура легко узагальнюється на довільне число координат і імпульсів. Координати та імпульси становлять пари, x_i та p_i . Класична система також має гамільтоніан, який є функцією від усіх x та p .
2. Замініть класичний фазовий простір на лінійний векторний простір. У координатному уявленні, простір станів є хвильовою функцією $\psi(x)$, що залежить від координат – у випадку, від усіх координат.
3. Замініть всі x_i та p_i на оператори \mathbf{X}_i та \mathbf{P}_i . Кожен \mathbf{X}_i , діючи на хвильову функцію, множить її на x_i . Кожен \mathbf{P}_i діє за правилом

$$\mathbf{P}_i \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}.$$

4. Коли ці заміни зроблені, гамільтоніан стає оператором, який може бути використаний або в залежному від часу або в незалежному рівнянні Шредінгера. Яке залежить від часу рівняння говорить нам, як хвильова функція змінюється з часом. Не залежить від часу форма рівняння дозволяє визначити власні вектори і значення гамільтоніана.

Ця процедура квантування дозволяє перетворити класичні рівняння на квантові рівняння. Вона багаторазово використовувалася у різних областях, починаючи від руху частинок до квантової електродинаміки, де навіть були спроби (не дуже вдалі) проквантувати теорію гравітації Ейнштейна. Як ми бачили одному простому прикладі, процедура гарантує, що рух середніх значень тісно пов'язані з класичним рухом.

Усе це порушує питання курки і яйця : що первинне – класична чи квантова теорія? Чи має логічна відправна точка фізики бути класичною чи квантово-механічною? Я думаю, відповідь очевидна. Квантова механіка є справжнім описом природи. Класична механіка, будучи прекрасною і елегантною, проте є апроксимацією. [перекладача]. Грубо кажучи, традиційна механіка справедлива тоді, коли хвильові функції зберігають свою форму як пакетів. Іноді, нам щастить, і квантова теорія для деякої системи може бути вгадана - і це насправді ні що інше, як здогад - починаючи зі звичної класичної системи і квантуючи її. Іноді це працює. Квантовий рух електронів, виведений із класичної механіки частинок, є показовим прикладом. Інший приклад це квантова електродинаміка, виведена з рівнянь Максвелла. Але іноді не існує класичної теорії, щоб використовувати як відправну точку. Спин частинки немає класичного аналога. І квантування загальної теорії відносності значною мірою не вдалося. Квантова теорія, ймовірно, набагато фундаментальніша порівняно з класичною теорією, яку, як правило, слід розуміти як наближення.

Сказавши, що сказав, я тепер продовжу квантування руху частинок, але цього разу увімкнувши вплив сил.

9.6. Сили

Світ був би нудним місцем, якби всі частки були вільні. Сили це те, що дозволяє частинкам робити будь-які цікаві речі, такі як об'єднуватися в атоми, молекули, шоколадні батончики та чорні дірки. Сила, що діє на будь-яку цю частинку, є сумою сил, що діють на цю частинку з боку всіх інших частинок у Всесвіті. На практиці ми зазвичай припускаємо, що ми знаємо, що саме роблять решту частинок і, тому, замінюємо їх (сумарний) вплив так званім зовнішнім полем для частки, яку ми вивчаємо. Потенційна енергія у цьому ефективному зовнішньому полі визначає силу, що діє на нашу частинку. Це вірно як у класичній, так і в квантовій механіці.

Потенційна енергія позначається як $V(x)$. У класичній механіці вона пов'язана із силою таким рівнянням

$$F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x}.$$

Якщо рух є одномірним, то приватна похідна може бути замінена звичайною похідною, але я залишу все як є. Якщо ми потім об'єднаємо це рівняння з другим законом Ньютона $F = ma$, то отримаємо

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}.$$

У квантовій механіці ми чинимо інакше: Ми записуємо гамільтоніан і вирішуємо рівняння Шредінгера. Включення потенційної енергії до цієї схеми є досить очевидним. Потенційна енергія $V(x)$ стає оператором \mathbf{V} , який додається до гамільтоніану.

Який оператор є \mathbf{V} ? Відповідь на це питання найпростіше висловити, якщо міркувати мовою хвильових функцій, а не абстрактною мовою бра і кетів. Насамперед зауважимо, що потенційна енергія V як функція координати x може бути представлена у вигляді низки за ступенями x . При переході до оператора потенційної енергії \mathbf{V} ми в кожному члені зазначеного ряду замінюємо координату x на оператор \mathbf{X} . Кожен член отриманого ряду, діючи на хвильову функцію, просто множить її на координату (у

відповідній мірі і з відповідним коефіцієнтом). Тому, коли оператор \mathbf{V} діє будь-яку хвильову функцію $\psi(x)$, він просто множить хвильову функцію на функцію $V(x)$:

$$\mathbf{V} |\Psi\rangle \rightarrow V(x)\psi(x).$$

Так само, як і в класичній механіці, щойно сили включені, імпульс частинки не зберігається. Насправді закони руху Ньютона можна сформулювати в такому вигляді

$$\frac{dp}{dt} = F$$

або

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x}. \quad (9.175)$$

Правила квантування вимагають від нас додати оператор $\mathbf{V}(x)$ до гамільтоніану,

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \mathbf{V}(x), \quad (9.176)$$

і модифікувати рівняння Шредінгера очевидним чином:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \\ E\psi &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi. \end{aligned} \quad (9.177)$$

Який ефект такої зміни? Додатковий член, безумовно, впливає на те, як

хвильова функція ψ змінюється з часом. Так, звичайно, і має бути, якщо середнє положення хвильового пакета має наслідувати класичну траєкторію. Для того, щоб перевірити наші міркування, давайте подивимося, чи це так насправді. Насамперед, чи залишається справедливим рівняння (9.174)? Мабуть, оскільки зв'язок між імпульсом і швидкістю залежить від присутності сил.

Оскільки новий доданок було додано в гамільтоніан H , то з'явиться новий член у комутаторі \mathbf{X} і \mathbf{H} . В принципі, це могло б змінити вираз для швидкості рівняння (9.172), але, як легко бачити, цього не відбувається. Новий член включає комутатор \mathbf{X} з $\mathbf{V}(x)$. Але множення на x та множення на функцію x є операціями, які комутують один з одним. Іншими словами,

$$[\mathbf{X}, \mathbf{V}(x)] = 0.$$

Таким чином, зв'язок між швидкістю та імпульсом не залежить від присутності сил у квантовій механіці, як це має місце і в класичній механіці.

Цікавіше питання: чи можемо ми зрозуміти квантову версію закону Ньютона? Як було зазначено вище, цей закон можна записати у вигляді

$$\frac{dp}{dt} = F.$$

Обчислимо похідну часу від середнього значення оператора імпульсу \mathbf{P} . Знову, хитрість полягає в тому, щоб прокомутувати \mathbf{P} з гамільтоніаном:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = \frac{i}{2m\hbar} \langle [\mathbf{P}^2, \mathbf{P}] \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{V}, \mathbf{P}] \rangle. \quad (9.178)$$

Перший член дорівнює нулю, оскільки оператор комутує з будь-якою функцією себе. Для того, щоб обчислити другий доданок, ми використовува- тимемо рівняння, яке ми ще не довели:

$$[\mathbf{V}(x), \mathbf{P}] = i\hbar \frac{dV(x)}{dx}. \quad (9.179)$$

Підставляючи (9.179) у (9.178), отримаємо

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = - \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle.$$

Тепер давайте доведемо формулу (9.179). Нехай комутатор діє хвильову функцію:

$$[\mathbf{V}(x), \mathbf{P}] \psi(x) = V(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) - \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) V(x) \psi(x). \quad (9.180)$$

Це вираз легко спрощується і приводить до формули (9.179). Таким чином, ми показали, що

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = - \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle, \quad (9.181)$$

що є квантовим аналогом рівняння Ньютона швидкості зміни імпульсу.

Вправа 9.3: Показати, що права сторона рівняння (9.180) може бути приведена до такого виду як і права сторона рівняння (9.179). Підказка Спочатку розкладіть другий член, використовуючи формулу для похідної від твору. Потім зменшіть члени з протилежними знаками.

9.7. Прямолінійний рух та класична межа

Можна подумати, що ми довели, що очікувана величина оператора координати \mathbf{X} точно слідує класичній траєкторії. Але те, що ми насправді довели, виявляється зовсім іншим. Це так, оскільки середнє для функції від x відрізняється від функція середнього для x . Якщо рівняння (9.181) прочитати так,

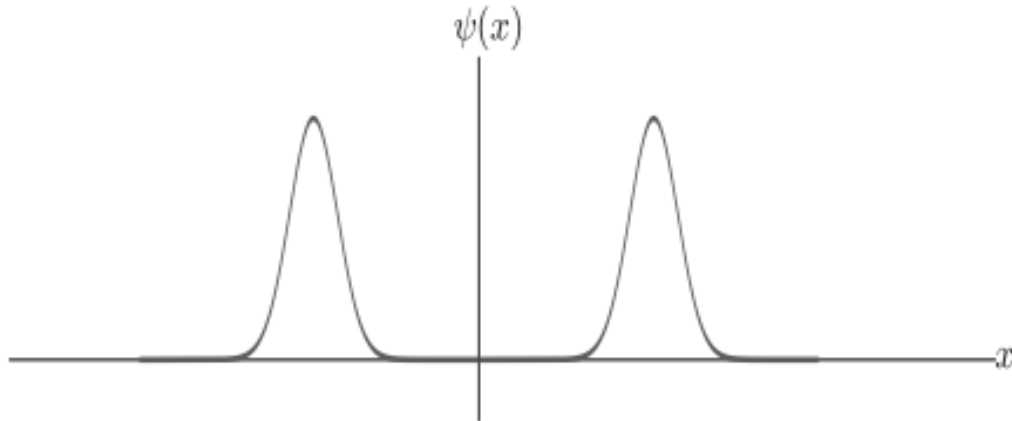
$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = - \frac{dV(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle} \quad [\text{This is wrong}]$$

(і, дозвольте мені підкреслити, що рівняння (9.181) означає зовсім інше), тоді ми б сказали, що середнє положення і імпульс задовольняють рівнянням класичної фізики. Але насправді класичні рівняння є лише наближенням, яке є задовільним лише тоді, коли ми можемо середнє значення для похідної dV/dx замінити похідну від функції, обчисленої для середнього значення x . Коли така заміна є допустимою? Вона допустима щоразу, коли $V(x)$ повільно змінюється на відстанях порядку розмірів хвильового пакета. Якщо V змінюється швидко у межах хвильового пакета, то класичне наближення виявляється не справедливим. Хвильовий пакет, при розсіянні на потенціалі, що швидко змінюється, буде розділений на безліч хвиль, які не мають нічого спільного з початковим хвильовим пакетом. Розподіл ймовірності (для координати або імпульсу) також буде сильно зміненим. В цьому випадку у вас не буде іншого вибору, крім як вирішити рівняння Шредінгера.

Давайте подивимося на цей момент докладніше. Математично, ми не зробили жодних припущень щодо форм наших хвильових пакетів. Але ми мовчазно думали про них як про функції з гладкою формою та з одним максимумом, які плавно зменшуються до нуля у позитивному та негативному напрямках. Ця умова, хоч і не була присутньою явно в наших математичних припущеннях, проте є істотною для того, щоб частка поведилася так, як ми припускаємо вона повинна поводитися відповідно до класичної фізики.

Щоб проілюструвати це, давайте розглянемо трохи "дивний" хвильовий пакет. На малюнку 9.3 показаний бімодальний хвильовий пакет (має два максимуми), з центром на початку координат осі x . Тепер розглянемо деяку функцію x , скажімо $F(x)$, де F є силою. Середнє значення $F(x)$ не співпадає з функцією F від середнього значення x . Іншими словами,

$$\langle F(x) \rangle \neq F(\langle x \rangle).$$



Мал. 9.3. Бімодальна (двогорба) функція, центрована за $x = 0$. Зауважте, що середнє значення дорівнює нулю, $\langle x \rangle = 0$, але середньоквадратичне значення не дорівнює нулю, $\Delta x > 0$.

У правій стороні стоїть функція, обчислена у центрі хвильового пакета. Це не те саме, що стоїть з лівого боку і, що відповідає нашим результатам з попереднього розділу - $\langle F(x) \rangle$ має той же вигляд, що і права частина рівняння (9.181).

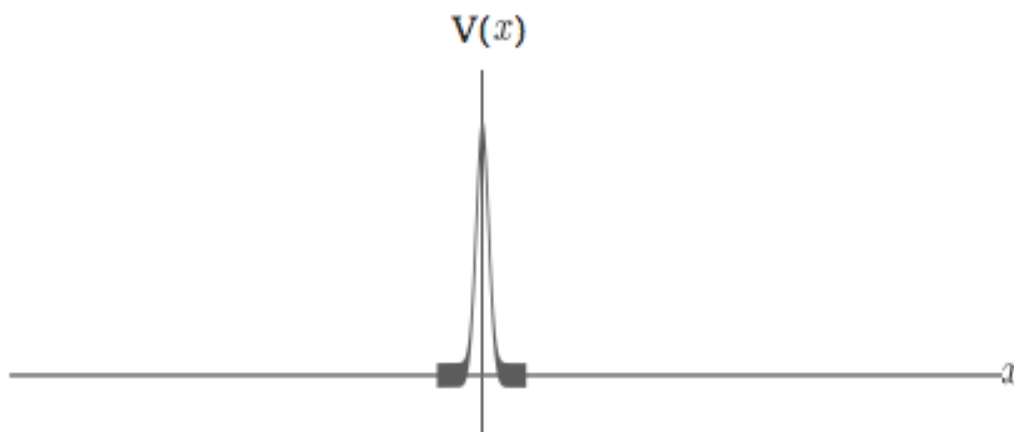
Дозвольте мені навести приклад, у якому ці два вирази можуть бути надзвичайно різними. Припустимо, що F дорівнює x у квадраті:

$$F = x^2.$$

І припустимо, що хвильовий пакет виглядає як на рис. 9.3. Чому дорівнює очікуване значення x ? Воно одно нулю, як і $F(\langle x \rangle)$, оскільки $F(0) = 0^2 = 0$. З іншого боку, якою є очікувана величина x^2 ? Вона безумовно більша за нуль. Тому, коли хвильовий пакет відрізняється від одиночного піку, який здебільшого характеризується своїм центром, то завжди вірно, що швидкість зміни імпульсу визначається значенням сили, обчисленої при значенні математичного очікування x . Це виявляється правильним тільки тоді, коли хвильова функція зосереджена в досить вузькому діапазоні координат так, що очікувана величина $F(x)$ така сама, як $F(\langle x \rangle)$. Таким чином ми

трохи схитрили, кажучи, що наше квантове рівняння руху виглядає класично. Все залежить від хвильового пакета, чи є він добре локалізованим чи ні.

За інших рівних умов, якщо маса частки велика, то хвильова функція має тенденцію бути дуже добре локалізованою. Якщо потенційна енергія $V(x)$ не має різких піків, то хорошим наближенням буде використання $F(\langle x \rangle)$ замість $\langle F(x) \rangle$. Якщо $V(x)$ має піки, то хвильовий пакет має тенденцію розпадатися. Наприклад, припустимо, що ми маємо хороший хвильовий пакет, який рухається вправо і нашоується на точкову систему, подібно до атома, з потенційною енергією подібною до тієї, що показана на рисунку 9.4. Хвильовий пакет розпливатиметься і розбиватиметься на частини. Однак, коли він стикається з дуже гладким потенціалом, то він пройде крізь потенціал так, ніби його рух описувалося б класичними рівняннями. Ми не очікуємо, що квантова механіка відтворить класичну механіку за всіх можливих обставин. Але ми сподіваємося, що це станеться в тих випадках, коли це має статися, а саме, коли частки є важкими, а потенціали гладкими і ніщо не викликає розсіювання або розпаду хвильової функції.



Мал. 9.4. Пікоподібна потенційна функція. Потенційна функція з різко окресленим піком прагне розв'язати хвильову функцію. Чим менше довжина цього піку в порівнянні з розміром хвильового пакета, тим більша ймовірність, що хвильовий пакет буде розсіяний і тим менш "класичним" буде його поведінка.

У яких фізичних системах з'являються погані потенціали, які розбивають хвильову функцію? Припустимо, потенціал має особливості, мають певний розмір. Наприклад, це непроникне тіло з безліччю великих, близько розташованих шипів, як у рисунку 9.4. Нехай характерний розмір таких піків δx , що значно менше, ніж невизначеність положення Δx хвильового пакету, що налітає:

$$\delta x < \Delta x.$$

Якщо різкі особливості $V(x)$ мають масштаб, який набагато менше, ніж розмір пакету хвилі, що налітає, той пакет буде розбитий на багато маленьких шматочків. Всі вони будуть розпорошені в різних напрямках. Грубо кажучи, коли особливості потенціалу менше, ніж довжина хвилі частки, що налітає, то хвильова функція буде мати тенденцію розпадатися.

Допустимо, ви берете кулю для боулінгу і питаєте: “Що в даному випадку є Δx ?” Можна використовувати принцип невизначеності, щоб розвинути інтуїцію щодо цього питання. Як правило, $\Delta p \Delta x$ більше, ніж \hbar . Але в багатьох випадках цей витвір порядку \hbar :

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar.$$

Що таке Δp ? Це $m \Delta v$, що дає нам

$$m \Delta v \Delta x \sim \hbar.$$

Перегруповуючи величини, ми можемо записати

$$\Delta v \Delta x \sim \frac{\hbar}{m}$$

або

$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{m \Delta v}.$$

Тепер, якщо я поставлю шар для боулінгу на землі, я дуже добре знаю, що невизначеність його швидкості не дуже велика. Для все більш і більш важкого м'яча, можна очікувати, що невизначеність у швидкості стає дедалі менше. Але, у будь-якому випадку, права частина має масу m у знаменнику, і незалежно від Δv , зі зменшенням маси невизначеність положення кулі збільшується. І, зокрема, ця невизначеність рано чи пізно стане більшою, ніж характерний розмір особливостей потенціалу.

У квантово-механічній межі, коли m дуже мала і Δx має тенденцію бути більшим, хвильова функція буде рухатися під дією "зазубреного" потенціалу, який змінюється швидше, ніж сама хвильова функція. Ось тоді хвильова функція розпадається. З іншого боку, коли m стає дуже великим, Δx стає маленьким. Для великої кулі для боулінгу хвильовий пакет може бути дуже зосередженим. Коли такий хвильовий пакет рухається через потенціал з колючками, то його крихітна хвильова функція виявляє потенціал, чії особливості не є вже власне різкими особливостями, а скоріше являють собою досить плавні перепади потенційної енергії. Поширення через широкі гладкі зміни потенціалу не розбиває функцію хвильової на шматки. Великі маси та гладкі потенціали є характерними для класичної межі. Частка з малою масою, переміщаючись через різко змінюється потенціал, веде себе як істинно квантово-механічна система.

А як щодо електронів? Чи є вони досить масивними, щоб поводитися класично? Відповідь залежить від співвідношення між потенціалом та масою. Наприклад, якщо у вас є дві пластини конденсатора, рознесені на сантиметр, з плавним електричним полем між ними, то електрон буде рухатися через зазор, як хороша, цілісна, майже класична частка. З іншого боку, потенціал, пов'язаний із ядром атома, завжди має різкі особливості. Якщо електронний хвильовий пакет потрапляє на цей потенціал, він буде розкиданий на всі боки.

Перед тим, як залишити цю тему, я хотів би згадати про хвильові пакети з мінімальною невизначеністю. Це хвильові пакети, де $\Delta x \Delta p$ в точності дорівнює $\hbar/2$ (на відміну від звичайного для переважної кількості випадків знака більше). Іншими словами, в цьому випадку добуток невизначеностей $\Delta x \Delta p$ настільки мало, наскільки квантова механіка дозволяє. Ці хвильові

пакети мають форму кривої Гауса, і вони часто називають гаусові хвильові пакети. Згодом вони розпливаються і стають плоскішими. Такі хвильові пакети негаразд поширені, але вони існують. Куля для боулінгу у стані спокою є гарним наближенням. У лекції 10 ми побачимо, що основний стан гармонійного осцилятора описується гаусовим хвильовим пакетом.

9.8. Інтеграл з траєкторій

Класична гамільтонова механіка зосереджена на детальному, крок-за-кроком, поступовій зміні стану системи. Але є й інший, глобальний, спосіб сформулювати механіку - Принцип найменшого впливу - у якому основна увага приділяється всій історії системи. У разі частинки такий принцип має справу з траєкторією частки повністю, від деякого початкового часу до деякого кінцевого часу. Обидва підходи, зрештою, призводять до одних і тих же рівнянь руху, але методи отримання цих рівнянь, а водночас і акценти, що розставляються, відрізняються. Гамільтонова механіка зосереджується на певному моменті часу і каже нам, як система змінюється між цим і наступним моментами часу. Можна сказати, що гамільтонова механіка "аналізує" траєкторію системи. Принцип найменшого впливу використовує протилежний підхід, заснований на синтезі всієї траєкторії цілком. Можна собі уявити, що природа перебирає всі можливі траєкторії (між заданими початковою та кінцевою точками) і вибирає ту, вздовж якої деяке число, зване дією, виявляється мінімальною (фактично екстремальною, але в переважній кількості практичних випадків - мінімальною).

Квантова механіка також використовує опис гамільтону, який зосереджений на поступових змінах. Такий опис засновано на використанні рівняння Шредінгера, що залежить від часу, і такий підхід є дуже загальним. Наскільки ми знаємо, він може бути використаний для опису всіх фізичних систем. Тим не менш, є справедливим поставити питання, що і зробив Річард Фейнман майже сімдесят років тому, чи є такий спосіб поглянути на квантову механіку, що ґрунтується на всій історії системи. Або інакше кажучи, чи є формулювання аналогічне принципу найменшої дії? Я не буду докладно пояснювати в цій лекції квантово-механічний опис, заснований на фейнманівських інтегралах з траєкторій, але тільки, щоб підігріти апетит,

я натякну на те, як це працює.

По-перше, дозвольте мені дуже коротко нагадати вам про класичний принцип найменшої дії. Припустимо, що класична частка стартує в точці x_1 в момент часу t_1 і прибуває в точку x_2 в момент часу t_2 (рис. 9.5). Питання полягає в наступному: Яка траєкторія частки?

Відповідно до принципу найменшої дії, фактична траєкторія – це така траєкторія, яка мінімізує дію. Дія, звичайно, технічний термін, і це означає інтеграл від функції Лагранжа між кінцевими точками траєкторії. Для простих систем, лагранжіани це кінетична енергія мінус потенційна енергія. Таким чином, для частки, яка рухається в одному вимірі, дія

$$A = \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}) dt \quad (9.182)$$

або

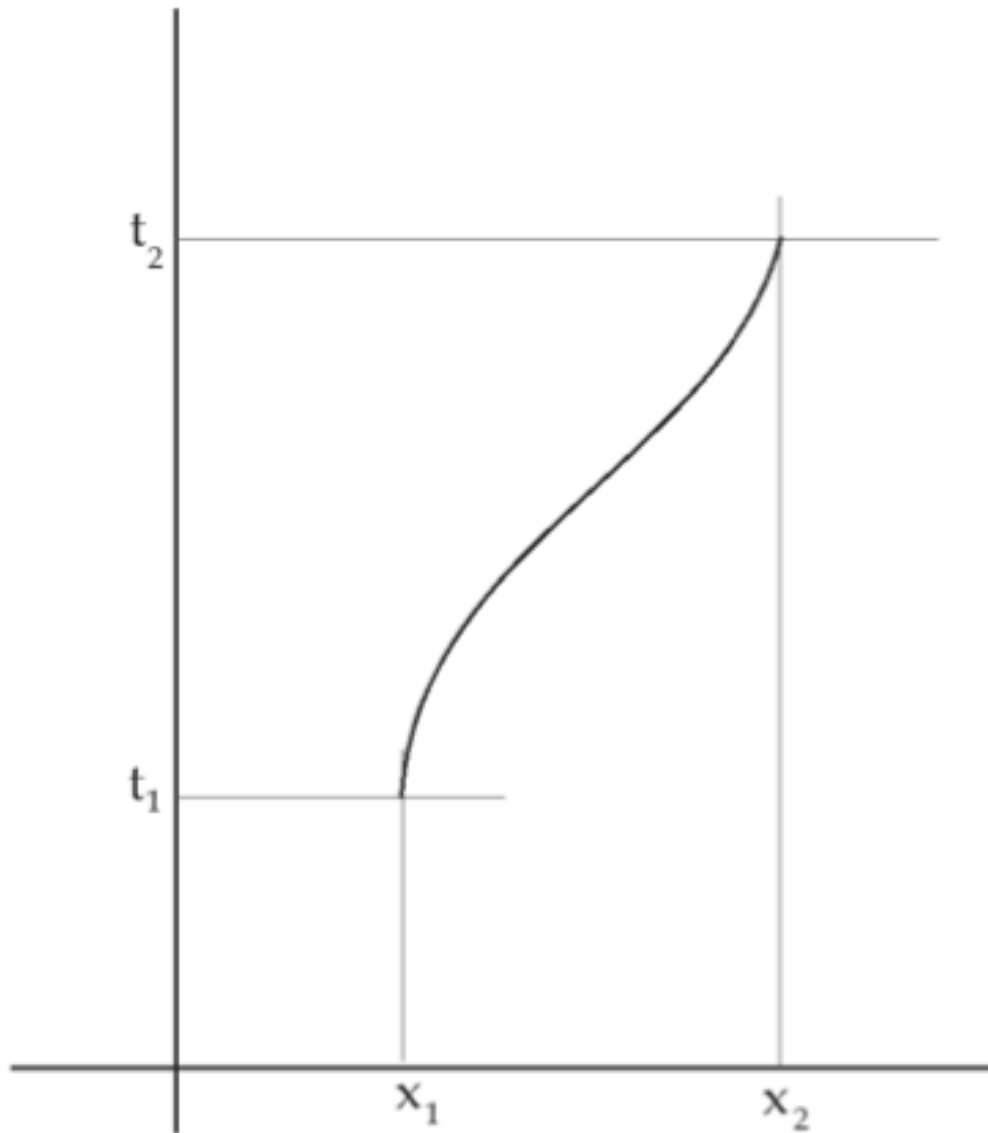
$$A = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \right) dt.$$

Ідея полягає в тому, щоб спробувати всі можливі траєкторії, що з'єднують дві кінцеві точки і обчислити A для кожної з них. Переможцем є та траєкторія, яка має найменшу дію.

Тепер перейдемо до квантової механіки. Ідея про чітко визначену траєкторію між двома точками не має сенсу в квантовій механіці через принцип невизначеності. Тим не менш, ми можемо поставити таке питання: Враховуючи, що на початку частка знаходиться в точці (x_1, t_1) , яка ймовірність того, що вона буде виявлена в точці (x_2, t_2) , якщо таке спостереження буде здійснено?

Як завжди у квантовій механіці, ймовірність дорівнює квадрату абсолютної величини комплексної амплітуди. Глобальна версія квантової механіки запитує:

За умови, що частка стартувала з точки x_1, t_1 , чому дорівнює амплітуда того, що частка опиниться в точці x_2, t_2 ?



Мал. 9.5. Класична траєкторія. Показано один з можливих шляхів, яким частка переходить з точки 1 (x_1, t_1) в точку 2 (x_2, t_2). Для простоти, вісь швидкості \dot{x} , вздовж якої відкладається швидкість частинки вздовж осі x , не показана.

Давайте назвемо таку амплітуду $C(x_1, t_1; x_2, t_2)$, або, простіше, просто $C_{1,2}$. Початковий стан частки $|\Psi(t_1)\rangle = |x_1\rangle$. Протягом інтервалу між t_1 і t_2 стан частки еволюціонує в

$$|\Psi(t_2)\rangle = e^{-iH(t_2-t_1)} |x_1\rangle. \quad (9.183)$$

Амплітуда виявити частку в стані $|x_2\rangle$ визначається просто як скалярне твір $|\Psi(t_2)\rangle$ і $|x_2\rangle$. Її значення одно,

$$C_{1,2} = \langle x_2 | e^{-iH(t_2-t_1)} |x_1\rangle. \quad (9.184)$$

Іншими словами, амплітуда переходу з x_1 в x_2 протягом інтервалу часу $t_2 - t_1$ виходить, якщо помістити оператор $e^{-iH(t_2-t_1)}$ між початковим і кінцевим положеннями (мається на увазі відповідні вектор станів). Для спрощення формул, давайте замінімо $t_2 - t_1$ на t . Тоді амплітуда запишеться так,

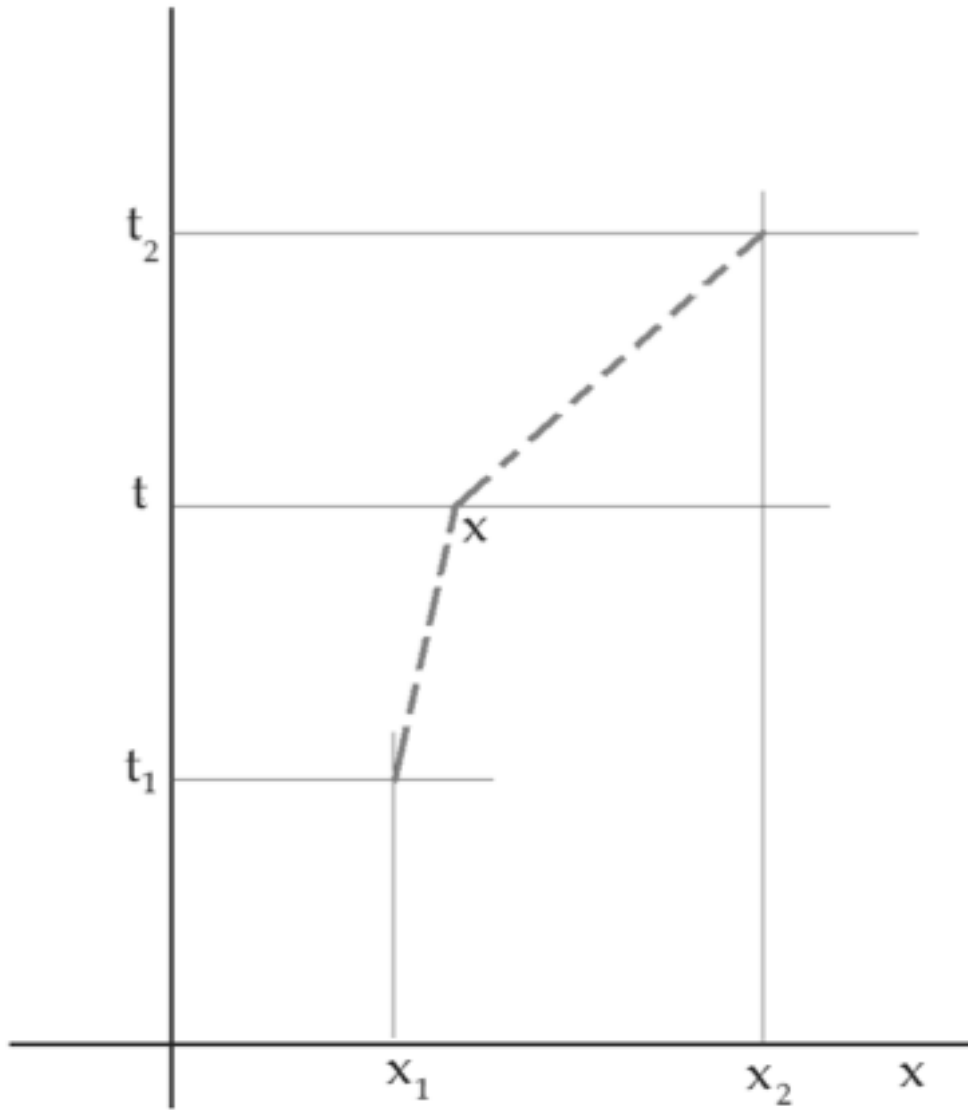
$$C_{1,2} = \langle x_2 | e^{-iHt} |x_1\rangle. \quad (9.185)$$

Тепер давайте розіб'ємо інтервал часу t на два менші інтервали розміром $t/2$ кожен (див. малюнок 9.6). Оператор e^{-iHt} можна записати у вигляді твору двох операторів:

$$e^{-iHt} = e^{-iHt/2} e^{-iHt/2}. \quad (9.186)$$

Вставляючи одиничний оператор у вигляді

$$I = \int dx |x\rangle \langle x|, \quad (9.187)$$



Мал. 9.6. Перший крок на шляху квантування траєкторії. Розбиваємо траєкторію на дві рівні частини (рівні за часом). Частка має ті ж, що й раніше початкову і кінцеву точки, але тепер також її траєкторія проходить через фіксовану проміжну точку x .

перепишемо амплітуду як

$$C_{1,2} = \int dx \langle x_2 | e^{-iHt/2} | x \rangle \langle x | e^{-iHt/2} | x_1 \rangle. \quad (9.188)$$

Ця форма рівняння виглядає складніше, але має дуже цікаву інтерпретацію. Дозвольте мені це сказати. Амплітуда переходу з x_1 до x_2 за інтервал часу t є інтегралом за проміжною позицією x . Підінтегральним виразом є амплітуда переходу від x_1 до x за інтервал часу $t/2$, помножена на амплітуду, переходу від x до x_2 за інший інтервал часу $t/2$.

Малюнок 9.6 ілюструє ту саму ідею у візуальному плані. Класично, щоб перейти від x_1 до x_2 , частка повинна пройти через проміжну точку x . Але в квантовій механіці амплітуда переходу від x_1 до x_2 є інтегралом по всіх можливих проміжних точках.

Ми можемо продовжити цю ідею далі і розділити часовий інтервал на велику кількість крихітних інтервалів, як показано на рис. 9.7. Я не виписуватиму складних формул, але ідея повинна бути ясна. Для кожного крихітного проміжку часу, скажімо, розміром ϵ , ми включаємо фактор

$$e^{-i\epsilon H}.$$

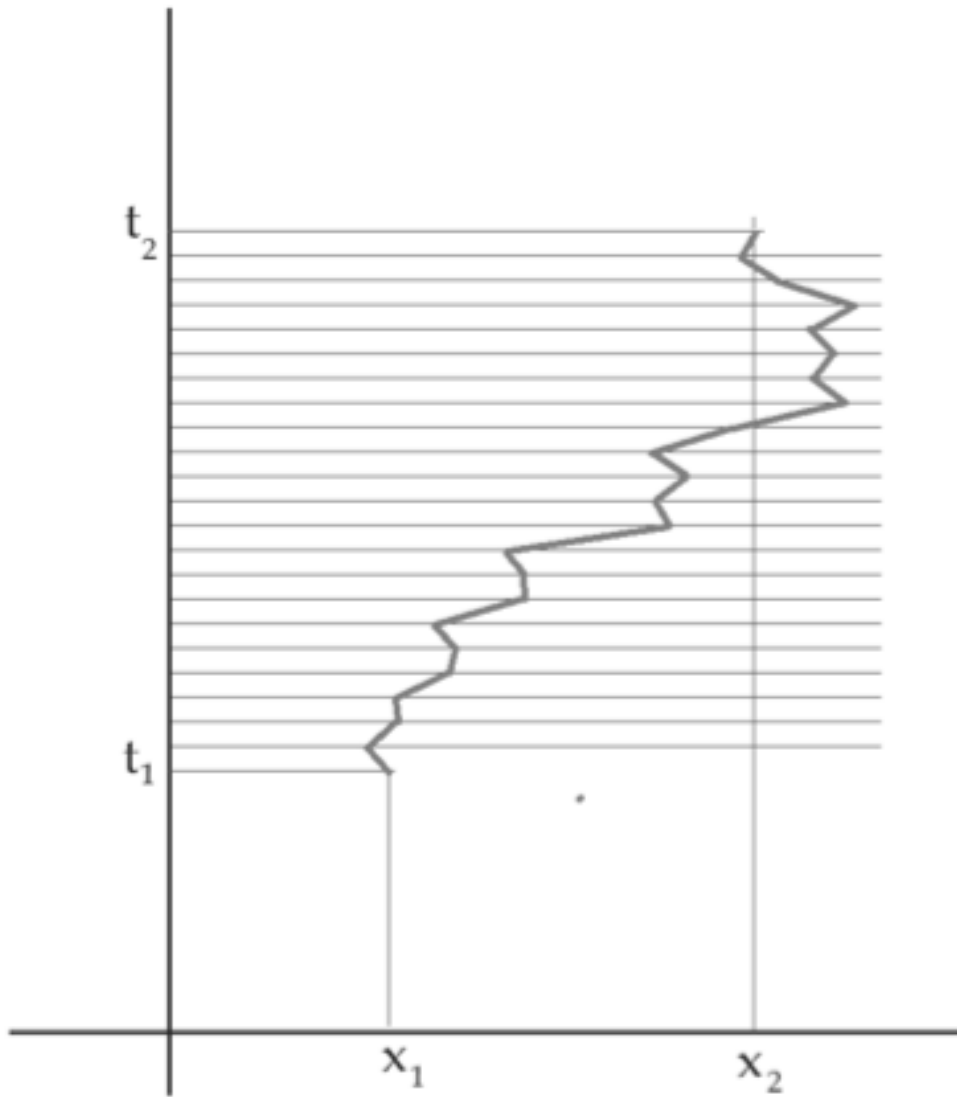
Потім, між кожною парою співмножників, ми вставляємо одиницю так, що амплітуда $C_{1,2}$ стає кратним інтегралом по всіх проміжних розташуваннях. Підінтегральний вираз складено з творів виразів виду

$$\langle x_i | e^{-i\epsilon H} | x_{i+1} \rangle.$$

Якщо ми визначимо $U(\epsilon)$ як

$$U(\epsilon) = e^{-i\epsilon H},$$

тоді ми можемо записати весь твір у такому вигляді



Мал. 9.7. Подальші кроки отримання інтеграла по траєкторії. Зафіксувавши початкову та кінцеву точки, розіб'ємо траєкторію на велику кількість шматочків однакового (за часом) розміру.

$$\langle x_2 | U^N | x_1 \rangle$$

або

$$\langle x_2 | UUUU \dots | x_1 \rangle.$$

У цьому рівнянні U з'являється N раз, як множник, де N означає число кроків довжиною епсілон. Потім ми можемо вставити тотожні оператори між усіма множниками U .

Такий вираз можна назвати амплітудою даної траєкторії. Але частка не переміщається вздовж певної траєкторії. Натомість, в межі великої кількості нескінченно малих інтервалів часу, амплітуда є інтегралом по всіх можливих шляхах між кінцевими точками. Елегантний факт, який виявив Фейнман, полягає в тому, що амплітуда для кожного шляху простим чином пов'язана з відомим виразом із класичної механіки - дією для цього шляху. Точний вираз для кожного шляху є

$$e^{iA/\hbar},$$

де A є дія для індивідуального шляху.

Формулювання Фейнмана можна звести до одного рівняння:

$$C_{1,2} = \int_{\text{по всім шляхам}} e^{iA/\hbar}. \quad (9.189)$$

Формулювання, засноване на інтегралах з траєкторій, не просто елегантний математичний трюк; вона є дуже сильним інструментом. Насправді її можна використати для того, щоб отримати як рівняння Шредінгера, так і всі комутаційні співвідношення квантової механіки. Але цей підхід по-справжньому розкриває всі свої можливості в контексті квантової теорії поля, де він є основним інструментом для формулювання законів фізики елементарних частинок.

10. Гармонійний осцилятор

Art: I think I see it, Lenny. The whole picture is slowly coming into focus. Minus One, General Uncertainty, entangled pairs, the Hamiltonian – even the degenerates. What’s next?

Lenny: Oscillations, Art. Vibrations. You’re a fiddler – play us a last tune tonight. Something with good vibes.

З усіх інгредієнтів, які входять у побудову квантового опису світу, два виділяються як особливо фундаментальні. Спин або кубит, звичайно ж є одним з них. У класичній логіці, все може бути побудовано з так-ні питань. Аналогічно, у квантовій механіці, кожне логічне питання зводиться до питання про кубіти. Ми витратили багато часу у попередніх лекціях на вивчення кубітів. У цій лекції ми дізнаємося про другу базову складову квантової механіки - про гармонійний осцилятор.

Гармонічний осцилятор не є конкретним об’єктом, як атом водню або кварк. Це справді математична конструкція для розуміння величезної кількості явищ. Концепція гармонійного осцилятора також існує у класичній фізиці, але вона справді виходить на перший план лише у квантовій теорії.

Одним із прикладів гармонійного осцилятора є частка, що рухається під дією лінійної сили, що відновлює; наприклад, вантаж, що широко використовується, на кінці пружини. Ідеалізована пружина задовольняє закону Гука: сила, що діє на зміщену масу, пропорційна відстані, на яку була зміщена ця маса. Ми називаємо силу, що повертає сила, тому що вона тягне масу назад у бік положення рівноваги.

Іншим прикладом є ванька-встанька. Що характеризує ці системи, так це потенційна енергія, яка виглядає як парабола:

$$V(x) = \frac{k}{2}x^2. \quad (10.190)$$

Постійна k називається *коефіцієнт пружності пружини*. Якщо згадати,

що сила, що діє на об'єкт, дорівнює мінус градієнту V , то ми знайдемо, що сила, що діє на об'єкт є

$$F = -kx. \quad (10.191)$$

Негативний знак говорить нам, що сила діє протилежно до переміщення і тягне масу назад до початку координат.

Чому гармонійні осцилятори настільки поширені у фізиці? Причиною тому є той факт, що майже будь-яка гладка функція виглядає як парабола, близько свого мінімуму. Дійсно, багато видів систем характеризуються енергією, яка може бути апроксимована квадратичною функцією певної змінної, яка представляє зміщення від рівноваги. Будучи обурені, ці системи коливатимуться біля точки рівноваги. Ось деякі інші приклади:

- Атом, що знаходиться в кристалічній решітці. Якщо атом трохи зміщений зі свого положення рівноваги, то сусідні атоми штовхають його назад. При цьому сила, що повертає, приблизно лінійна по зміщенню. Цей рух є тривимірним і справді складається з трьох незалежних коливань.
- Електричний струм у ланцюгу низького опору часто осцилює з характерною частотою. Математика ланцюгів ідентична математиці мас, прикріплених до пружин.
- Хвилі. Якщо поверхня ставка не спокійна, то нею поширюються хвилі. Якщо хтось дивиться у певне місце, то він бачитиме коливання поверхні, коли хвиля проходить повз. Цей рух може бути описаний як простий гармонійний рух. Те саме стосується звукових хвиль.
- Електромагнітні хвилі. Так само, як і будь-яка інша хвиля, світлова хвиля або радіохвиля осцилює, коли вона проходить повз вас. Та сама математика, що визначає коливається частинку також застосовна до опису електромагнітних хвиль.

Цей список можна продовжувати і продовжувати, але математика для них однакова. Просто, щоб мати на увазі конкретний приклад, давайте представимо осцилятор у вигляді вантажу висить на пружині. Зрозуміло, нам навряд чи потрібна квантова механіка, щоб описати звичайний вантаж і пружину, так що давайте представимо дуже крихітну версію цієї ж системи, а потім проквантуємо її.

10.1. Класичний опис

Давайте використовувати y для позначення висоти, на якій важить вантаж. Виберемо початок відліку, так що вантаж у рівновазі знаходиться за $y = 0$, тобто, коли вантаж висить у стані спокою. Для вивчення цієї системи класично ми можемо використовувати метод Лагранжа, про який можна прочитати в будь-якому підручнику з класичної механіки. Кінетична та потенційна енергії є $\frac{1}{2}m\dot{y}^2$ і $\frac{1}{2}ky^2$, відповідно.

Як ви пам'ятаєте, лагранжیان це кінетична енергія мінус потенційна енергія:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{y}^2 - \frac{1}{2}ky^2.$$

По-перше, ми приведемо лагранжیان до певного стандартного виду шляхом заміни y на іншу змінну, яку ми називатимемо x . Ця нова координата не честь щось зовсім нове. Вона, як і раніше, представляє зсув маси. При переході від y до x ми просто робимо зручну зміну одиниць виміру. Давайте визначимо нову змінну

$$x = \sqrt{m}y.$$

Виразений через координату x лагранжیان записується так

$$L = \frac{1}{2}\dot{x}^2 - \frac{1}{2}\omega^2 x^2. \quad (10.192)$$

Постійна ω визначається як $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ є не що інше, як частота осцилятора.

З такою заміною змінних, ми можемо використовувати ту саму форму (рівняння) для опису будь-якого осцилятора. Представлені в такій формі осцилятори відрізняються один від одного тільки за їх частотою.

Тепер, давайте використовувати рівняння Лагранжа, щоб знайти рівняння руху. Для одномірної системи існує тільки одне рівняння Лагранжа, а саме:

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}. \quad (10.193)$$

Підставляючи вираз (10.192), отримаємо

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \dot{x}. \quad (10.194)$$

Величина, визначена в цьому рівнянні, називається канонічним імпульсом, пов'язаним з координатою x . Диференціювання за часом дає

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \ddot{x} \quad (10.195)$$

і тепер маємо праву частину рівняння (10.193). Ліва частина того ж рівняння виглядає так,

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -\omega^2 x. \quad (10.196)$$

Прирівнюючи ліву та праву частини ((10.196) та (10.195)) рівняння Лагранжа, отримаємо

$$-\omega^2 x = \ddot{x}. \quad (10.197)$$

Це рівняння, звичайно ж, еквівалентне рівнянню Ньютона $F = ma$. Чому з'являється мінус? Тому що сила є сила, що відновлює, - її напрямок протилежне зсуву. На даний момент ви вже бачили цей тип рівняння досить багато разів, щоб знати, що рішення містить синуси та косинуси. Загальне рішення,

$$x = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t). \quad (10.198)$$

показує, що ω дійсно є частотою осцилятора. Коли ми диференціюємо двічі, ми отримуємо множник ω^2 .

Вправа 10.1: Знайдіть другу похідну від x в (10.198) і потім покажіть, що вона задовольняє рівнянню (10.197).

10.2. Квантово-механічний опис

Тепер давайте повернемося до нашої мікроскопічної версії вантаж-напружині системи - скажімо, з розміром не більше, ніж у молекули. На перший погляд це здається смішним. Як можна зробити пружину такою маленькою? Але насправді природа надає всілякі види мікроскопічних пружин. Багато молекул складаються з двох атомів - наприклад, з важкого і легкого атома. Деякі сили утримують молекулу у рівновазі, коли атоми розташовані певну відстань друг від друга. Коли легкий атом зміщується, він притягуватиметься назад у положення рівноваги. Молекула є мініатюрним варіантом грузик-на-пружині системи, причому настільки малою, що ми повинні використовувати квантову механіку, щоб описати її.

Маючи під руками класичний лагранжіан, спробуємо побудувати квантово-механічний опис нашої системи. Перше, що нам потрібне, це простір станів. Як ми вже бачили, стан частинки, що рухається вздовж прямої, є хвильовою функцією $\psi(x)$. Є багато можливих станів системи, і кожен із них представлений своєю хвильовою функцією. Функція $\psi(x)$ визначається таким чином, що добуток $\psi^*(x)\psi(x)$ задає щільність ймовірності (імовірність на одиницю довжини) того, що частка буде виявлена в точці x :

$$\psi^*(x)\psi(x) = P(x).$$

У цьому рівнянні $P(x)$ є щільністю ймовірності. Тепер у нас є свого роду кінематика - опис того, що є станом системи.

Чи може $\psi(x)$ бути довільною функцією? Крім вимоги, що вона повинна бути безперервною і диференційованою, єдина додаткова умова полягає в тому, що повна ймовірність знаходження частинки в будь-якій точці простору має бути рівним одиниці (це є вимога нормованості):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1. \quad (10.199)$$

Це не є настільки сильним обмеженням. Чому б не дорівнював даний інтеграл, ми завжди можемо помножити хвильову функцію на постійний множник, такий, щоб значення інтеграла дорівнювало б одиниці - якщо, звичайно, інтеграл не дорівнює нулю або нескінченності. Оскільки твір $\psi^*(x)\psi(x)$ явно позитивний, ми не повинні турбуватися про нуль, але нескінченність зовсім інша справа. Є багато функцій, для яких інтеграл в рівнянні (10.199) розходиться. Умови для розумної хвильової функції, таким чином, включають вимогу, щоб $\psi(x)$ спадала до нуля (при великих x) досить швидко так, щоби інтеграл сходився. Функції, які задовольняють цій умові, називаються нормовані.

Є два питання, які ми могли б поставити про наш гармонійний осцилятор:

- Як змінюється вектор стану з часом? Щоб відповісти на це питання, нам потрібно знати гамільтоніан.
- Які можливі енергії осцилятора? Вони також визначаються гамільтоніаном.

Таким чином, щоб знати щось корисне нам потрібен гамільтоніан. На щастя, ми можемо вивести його з лагранжіана, і я нагадаю вам незабаром, як саме це робиться. Але спочатку нагадаю, що канонічно сполучений імпульс x визначається як $\partial L / \partial \dot{x}$. У поєднанні з рівнянням (10.194), отримуємо

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \dot{x}.$$

Використовуючи безпосереднє визначення класичної механіки, ми бачимо, що гамільтоніан для гармонійного осцилятора дорівнює

$$H = p\dot{x} - \mathcal{L},$$

де p є імпульс канонічно пов'язаний до x , а \mathcal{L} є лагранжіан. Ми могли б працювати безпосередньо з цим визначенням, але натомість ми скористаємося більш коротким шляхом. Ми знаємо, що лагранжіан дорівнює кінетичній енергії мінус потенційна енергія, а гамільтоніан є сумою кінетичної та потенційної енергій - тобто гамільтоніан є повна енергія. Таким чином, гамільтоніан осцилятора можна записати як

$$H = \frac{1}{2}\dot{x}^2 + \frac{1}{2}\omega^2 x^2.$$

Досі все йде як слід, але ми ще не закінчили. Гамільтоніан має бути виражений через канонічний імпульс, а чи не через швидкість. Виразити гамільтоніан через канонічний імпульс досить просто, бо

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \dot{x},$$

що дозволяє нам записати так,

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}\omega^2x^2. \quad (10.200)$$

Це класичний гамільтоніан. Тепер ми можемо перетворити його на квантово-механічне рівняння. Для цього ми інтерпретуємо x і p як відповідні оператори, що визначаються їхньою дією на функцію хвилі $\psi(x)$. Як і раніше, ми використовуємо жирні символи, \mathbf{X} і \mathbf{P} , щоб відрізнити наші квантові оператори від їх класичних аналогів, x і p . З попередніх лекцій ми знаємо, як саме діють ці оператори. \mathbf{X} примножує хвильову функцію на координату x :

$$\mathbf{X} |\psi(x)\rangle \Rightarrow x\psi(x).$$

А оператор імпульсу \mathbf{P} має такий самий вигляд, як і для будь-якого одновимірного завдання:

$$\mathbf{P} |\psi(x)\rangle \Rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x).$$

Тепер ми можемо визначити, як саме гамільтоніан гармонійного осцилятора діє на хвильову функцію: Це цілком аналогічно тому, що ми проробили в лекції 9. Іншими словами,

$$\mathbf{H} |\psi(x)\rangle \Rightarrow \frac{1}{2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left[-i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right] \right) + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \psi(x),$$

або

$$\mathbf{H} |\psi(x)\rangle \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \psi(x). \quad (10.201)$$

Ми використовуємо приватні похідні, оскільки у випадку хвильова функція ψ залежить також від іншої змінної, саме від часу. Час не є оператором і не має такого ж статусу як x , але вектор стану змінюється з часом, і тому ми розглядаємо час як параметр. Приватна похідна вказує на те, що ми описуємо систему "в певний момент часу".

10.3. Рівняння Шрейдінгера

Рівняння (10.201) показує, як гамільтоніан діє на ψ . Зараз, давайте попросимо його трохи попрацювати. Як ми вже говорили в попередньому розділі, одне з його завдань - це сказати вам, як вектор стану змінюється з часом. Для цього запишемо залежне від часу рівняння Шрейдінгера:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{\hbar}\mathbf{H}\psi.$$

Використовуючи (10.201), отримаємо

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2\hbar}\omega^2x^2\psi. \quad (10.202)$$

Це рівняння говорить, що якщо ви знаєте ψ (як дійсну, так і уявну її частини) в якийсь конкретний момент часу, то ви можете передбачити, що буде в майбутньому. Рівняння є комплексним - воно містить уявну одиницю i як множник. Це означає, що навіть якщо ψ спочатку, тобто при $t = 0$, була речовиннозначна, то найближчим часом вона придбає уявну частину. Тому будь-яке рішення ψ , у випадку, має бути комплексної функцією x і t .

Ви можете вирішити це рівняння кількома способами. Наприклад, його можна вирішити чисельно на комп'ютері. Почніть із відомого значення $\psi(x)$ і злегка оновлюйте її обчислюючи похідну. Як тільки ви знайдете похідну, зможете обчислити як $\psi(x)$ зміни при малому прирощенні часу. Потім додати це збільшення у вихідному значенні $\psi(x)$ і продовжуйте робити це знову і знову. Виявляється, що $\psi(x)$ буде робити деякі цікаві речі -

вона змінюватиметься якимось чином. Фактично, за певних обставин вона утворює хвильовий пакет, чий рух дуже нагадує рух (класичного) гармонійного осцилятора.

10.4. Рівні енергії

Інша річ, яку ви можете зробити з гамільтоніаном, так це обчислити рівні енергії осцилятора. Для цього необхідно знайти власні вектори та власні значення. Як ми дізналися в лекції 4, коли ви знаєте, ці власні вектори та власні значення, ви можете з'ясувати залежність від часу без того, щоб вирішувати будь-які там диференціальні рівняння. Це можливо тому, що ви знаєте, залежність від часу кожного власного вектора гамільтоніана. Подивіться рецепт шредінгерівського кету, який ми дали в розділі 4.13.

А тепер, давайте зосередимося на пошуку власних векторів гамільтоніана, використовуючи рівняння Шредінгера, що не залежить від часу:

$$\mathbf{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle.$$

Індекс E вказує на те, що ψ_E є власним вектором для конкретного значення енергії E . Це рівняння визначає дві речі: хвильові функції $\psi_E(x)$ та енергетичні рівні E . Для того, щоб все виглядало мене абстрактним, давайте підставимо \mathbf{H} з (10.201):

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2 \psi_E(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \psi_E(x) = E \psi_E(x). \quad (10.203)$$

Для того, щоб вирішити дане рівняння, ми повинні:

- Визначити значення E , за яких дане рівняння має рішення.
- Визначити власні вектори та можливі власні значення енергії.

Це трохи важче, ніж ви могли б подумати. Складність у тому, що дане рівняння має рішення за будь-яких значень енергії E (і навіть при

комплексних значеннях), але більшість таких рішень абсурдні з фізичного погляду. Якщо ми просто почнемо з якогось моменту часу і чисельно вирішуватимемо рівняння Шредінгера, роблячи невеликі поступові кроки, то майже завжди знайдемо, що $\psi(x)$ зростає до нескінченності або “вибухає” коли x зростає. Іншими словами, ми зможемо знайти рішення рівняння, але дуже рідко нам буде траплятися нормоване рішення.

Насправді, для більшості значень E , у тому числі для всіх комплексних чисел, рішення рівняння (10.203) експоненційно зростають при x , що прагне ∞ , до $-\infty$ або до обом. Цей тип рішення немає жодного фізичного сенсу; він каже нам, що є переважна ймовірність того, що координата осцилятора нескінченно далека. Очевидно, що ми хочемо накласти деяку умову, яка дозволяє позбавитися таких рішень. Тож давайте накладемо таку умову:

Фізичні рішення рівняння Шредінгера повинні бути нормованими.

Це дуже потужний стримуючий фактор. Насправді, для багатьох значень E , немає нормованих рішень. Але для деяких спеціальних значень E такі рішення дійсно існують, і ми їх знайдемо.

10.5. Основний стан

Який найнижчий рівень енергії для гармонійного осцилятора? У класичній фізиці енергія ніколи не може бути негативною, оскільки гамільтоніан має член x^2 і член p^2 ; щоб звести до мінімуму енергію, ми просто покладемо p і x рівними нулю. Але в квантовій механіці, прирівняти нулю одночасно і імпульс і координату, це аж надто. Принцип невизначеності не дозволить це зробити. Найкраще, що ви можете зробити, це знайти компромісний стан, в якому x і p змінюються в невеликих межах. Оскільки ви повинні йти на компроміс, найменша можлива енергія не дорівнюватиме нулю оскільки ні p^2 , ні x^2 не дорівнюватимуть нулю. Оскільки оператори \mathbf{X}^2 і \mathbf{P}^2 можуть мати лише позитивні власні значення, гармонійний осцилятор не має негативних рівнів енергії і, фактично, він не має також стану з нульовою енергією.

Якщо всі енергетичні рівні системи мають бути позитивними, то має бути мінімальна допустима енергія та відповідна хвильова функція. Цей

найнижчий рівень енергії називається основним станом і позначається через $\psi_0(x)$. Майте на увазі, що індекс 0 не означає, що енергія дорівнює нулю; це означає, що це найнижча допустима енергія.

Існує дуже корисна математична теорема, яка допомагає визначити основний стан. Ми не будемо доводити її тут, а просто наведемо її формулювання:

Для будь-якого потенціалу хвильова функція основного стану не має вузлів і є єдиним власним станом оператора енергії, який не має вузлів.

Так що все, що нам потрібно зробити, щоб знайти основний стан нашого гармонійного осцилятора, так це знайти таке рішення для деякого значення E , яке не має вузлів. Не має жодного значення, як ми це зробимо, ми можемо використовувати математичні трюки, будувати припущення, або просто запитати професора. Давайте використати останній метод. (Я гратиму роль професора.) Ось функція, яка підходить:

$$\psi(x) = e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}. \quad (10.204)$$

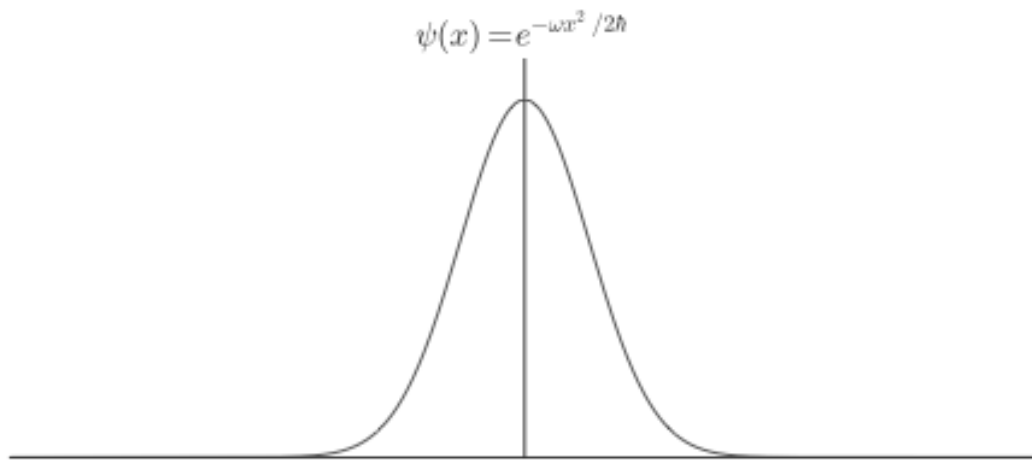
Ця функція схематично показана на мал. 10.1. Як ви можете бачити, вона сконцентрована поблизу початку координат, як ми очікували. Ця функція дуже швидко спадає до нуля при віддаленні від початку координат, тому інтеграл від густини ймовірності кінцевий. І, головне, вона не має вузлів. Так що вона має всі шанси бути нашим основним станом.

Давайте подивимося, чи зможемо ми з'ясувати, що гамільтоніан робить із цією функцією. Перший член гамільтоніана (ліва частина рівняння (10.203)) пропонує нам застосувати оператор

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

до функції $\psi(x)$. Давайте обчислимо те, що вийде, виконуючи одне диференціювання за іншим. Отже, перший крок:

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -\frac{\omega}{2\hbar} (2x) e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2},$$



Мал. 10.1. Хвильова функція - основний стан гармонійного осцилятора.

що можна спростити як

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -\frac{\omega}{\hbar} x e^{-\frac{\omega}{2\hbar} x^2}$$

Коли ми беремо другу похідну, буде два члени через правила диференціювання твору:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{\omega}{\hbar} e^{-\frac{\omega}{2\hbar} x^2} + \frac{\omega}{\hbar} x^2 e^{-\frac{\omega}{2\hbar} x^2}.$$

Давайте підставимо цей результат назад у рівняння (10.203) і в той же час замінимо $\psi(x)$ у правій частині на нашу гіпотезу, $e^{-\frac{\omega}{2\hbar} x^2}$:

$$\frac{\hbar}{2} \omega e^{-\frac{\omega}{2\hbar} x^2} - \frac{1}{2} \omega^2 x^2 e^{-\frac{\omega}{2\hbar} x^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 e^{-\frac{\omega}{2\hbar} x^2} = E e^{-\frac{\omega}{2\hbar} x^2}.$$

Після знищення членів пропорційних $x^2 e^{-\frac{\omega}{2\hbar} x^2}$, ми виявляємо той чудовий

факт, що рішення рівняння Шредінгера просто звелось до вирішення наступного дуже простого рівняння

$$\frac{\hbar}{2}\omega e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} = E e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Як ви можете бачити, єдиний спосіб, яким ми можемо вирішити це рівняння, так це покласти енергію E рівною $\frac{\omega\hbar}{2}$. Іншими словами, ми знайшли не лише хвильову функцію, а й відповідне значення енергії основного стану. Позначаючи енергію основного стану E_0 , ми можемо написати

$$E_0 = \frac{\omega\hbar}{2}. \quad (10.205)$$

Хвильова функція основного стану, як виявилось, є нічим іншим як функцією Гауса, яку дав нам професор:

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Розумний парубок, цей професор.

10.6. Оператори народження та знищення

У цьому курсі ми стикалися з двома способами мислення про квантову механіку. Їхні витoki йдуть до Гейзенберга і Шредінгера. Гейзенберг любив алгебру матриць, і (якби він знав, як їх назвати) лінійні оператори. Шредінгер, навпаки, мислив у категоріях хвильових функцій та хвильових рівнянь; рівняння Шредінгера є найвідомішим прикладом. Звичайно, ці два способи мислення не суперечать один одному; функції утворюють векторний простір та його похідні є операторами.

До цього часу у нашому дослідженні гармонійного осцилятора ми фокусувалися на функціях та диференціальних рівнянь. Але потужніший інструмент у багатьох випадках, зокрема, для гармонійного осцилятора - це метод операторів. Це зводить всі дослідження хвильових функцій та

хвильових рівнянь до дуже невеликого числа трюків алгебри, які майже завжди пов'язані з комутаційними співвідношеннями. Насправді, щоразу, коли ви бачите пару операторів, моя порада, знайдіть їхній комутатор. Якщо комутатор є новим оператором, який ви не бачили раніше, знайдіть його комутатор з оригінальною парою. Ось коли найцікавіше трапляється.

Очевидно, що ця порада може призвести до нескінченного ланцюга нудних обчислень. Але іноді вам може пощастити і ви знайдете безліч операторів, які замкнуті щодо операції комутування (тобто, комутатор будь-яких двох елементів множини є також елементом цієї ж множини). Щоразу, коли це станеться - ви у справі; як ми побачимо далі, операторний метод мають величезну силу.

Тепер давайте застосуємо цей підхід до нашого гармонійного осцилятора. Почнемо з гамільтоніана вираженого через оператори \mathbf{P} і \mathbf{X} :

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2}{2}. \quad (10.206)$$

Для того, щоб знайти інші рівні енергії (енергію основного стану ми вже знайшли), ми будемо використовувати деякі прийоми. Ідея полягає в тому, щоб вміло використовувати властивості \mathbf{X} і \mathbf{P} (зокрема, їхнє комутаційне співвідношення $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar$) і побудувати два нових оператори, званих оператором *народження* та *знищення*. Коли оператор народження діє на власний вектор гамільтоніану (на власну функцію гамільтоніана), то він створює новий власний вектор, який відповідає наступному порядку більш високому рівню енергії. Оператор знищення робить усе навпаки: він створює власний вектор, енергія якого на рівень нижче, ніж енергія власного вектора, який він подействовав. Так що, власне кажучи, те, що вони створюють і знищують це енергія. Ці оператори також називаються оператори, що піднімає і опускає. Але пам'ятайте: оператори діють на вектори стану, а чи не на системи. Щоб подивитися, як працюють ці оператори, давайте перепишемо гамільтоніан у наступному вигляді

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} (\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2). \quad (10.207)$$

Це форма як класичного так і квантово-механічного Гамільтоніана, тому з тим самим успіхом ми могли б використовувати великі літери p і x (і отримали б класичний гамільтоніан). Тим не менш, ми використовуємо жирні великі літери \mathbf{P} і \mathbf{X} , тому що ми плануємо зосередитись на квантово-механічному гамільтоніані.

Давайте почнемо робити маніпуляції, правильні у разі класичної фізики, але які вимагатимуть деякої модифікації у разі квантової механіки. У дужках у наведеному вище виразі, ми маємо суму квадратів. Формула розкладання на множники

$$a^2 + b^2 = (a + ib)(a - ib),$$

каже, що, схоже, ми можемо переписати гамільтоніан у такому вигляді,

$$\mathbf{H} \text{ “=” } \frac{1}{2} (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X}). \quad (10.208)$$

і це майже правильно. Чому майже? Тому, що квантово-механічні оператори \mathbf{P} і \mathbf{X} не комутують один з одним, і ми маємо бути обережними щодо порядку розташування. Давайте перемножимо дужки і подивимося чи відрізнятиметься результат від вихідного гамільтоніану в рівнянні (10.207). Зберігаючи порядок множників, ми можемо розкласти наведене вище вираз наступним чином:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X}) &= \frac{1}{2} (\mathbf{P}^2 + i\omega\mathbf{XP} - i\omega\mathbf{PX} - i^2\omega^2\mathbf{X}^2) \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{P}^2 + i\omega(\mathbf{XP} - \mathbf{PX}) - i^2\omega^2\mathbf{X}^2) \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{P}^2 + i\omega(\mathbf{XP} - \mathbf{PX}) + \omega^2\mathbf{X}^2) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} (\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2) \frac{1}{2} + i\omega (\mathbf{X}\mathbf{P} - \mathbf{P}\mathbf{X}).$$

Зверніть увагу на праву крайню дужку в останньому рядку. Ми вже бачили подібний вираз - це комутатор \mathbf{X} і \mathbf{P} . Насправді ми вже знаємо його значення:

$$(\mathbf{X}\mathbf{P} - \mathbf{P}\mathbf{X}) = [\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar.$$

Таким чином, вираз для факторизованого (розкладеного на множники) гамільтоніана стає таким,

$$\frac{1}{2} (\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2) + \frac{1}{2} i\omega i\hbar$$

або

$$\frac{1}{2} (\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2) - \frac{1}{2} \omega\hbar.$$

Іншими словами, факторизований гамільтоніан у вираз (10.208) виявляється меншим, ніж оригінальний (правильний) гамільтоніан (10.207) на величину $\frac{\omega\hbar}{2}$. Таким чином, щоб отримати правильний вираз для гамільтоніана, ми повинні додати $\frac{\omega\hbar}{2}$ к (10.208). В результаті отримаємо (вже з правильним знаком одно):

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X}) (\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X}) + \frac{\omega\hbar}{2}.$$

Переписування гамільтоніана різними способами може здатися просто марною справою, але, повірте мені, це не так. Насамперед, останній член є лише константою, яка додає чисельне значення $\frac{\omega\hbar}{2}$ до кожного власного значення енергії. Ми можемо ігнорувати її на якийсь час. Пізніше після того, як ми вирішимо решту завдання, ми повернемо її назад. Суть проблеми полягає у вираженні $(\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X}) (\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X})$. Виявляється, що ці два

множники, $(\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})$ і $(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X})$, мають деякі дуже чудові властивості. Фактично, вони і є тими операторами, що підвищують і знижують (або операторами народження і знищення), про які я говорив вам раніше. На даний момент це тільки імена, але, в міру того, як ми просуватимемося далі, ми побачимо, що імена були добре підібрані. Очевидні визначення є

$$\mathbf{a}^- = (\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X})$$

для понижуючого оператора, та

$$\mathbf{a}^+ = (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})$$

для оператора, що підвищує. Але шляхи історії неспівідні. Історично склалися так, що оператори, що підвищують і знижують, були визначені з додатковим множником перед ними. Ось офіційні визначення:

$$\mathbf{a}^- = \frac{i}{\sqrt{2\omega\hbar}} (\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X}), \quad (10.209)$$

$$\mathbf{a}^+ = \frac{-i}{\sqrt{2\omega\hbar}} (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X}), \quad (10.210)$$

Використовуємо ці визначення і запишемо гамільтоніан у такому вигляді,

$$\mathbf{H} = \omega\hbar (\mathbf{a}^+ \mathbf{a}^- + 1/2). \quad (10.211)$$

Тільки дві властивості операторів \mathbf{a}^+ і \mathbf{a}^- нам знадобляться. По-перше, вони є ермітово-сполученими один з одним. Це просто впливає з їхніх визначень. Інша властивість це те, що справді наповнює їх змістом. Комутатор \mathbf{a}^+ і \mathbf{a}^- є просто одиниця:

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+] = 1.$$

Це легко довести. Спочатку ми використовуємо визначення цих операторів та записуємо

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+] = \frac{1}{2\omega\hbar} [(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X}), (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})].$$

Наступним кроком є використання комутаційних співвідношень $[\mathbf{X}, \mathbf{X}] = 0$, $[\mathbf{P}, \mathbf{P}] = 0$, і $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar$. Використовуючи їх у наведеному вище рівнянні, ви швидко виявите, що $[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+] = 1$.

Ми можемо зробити гамільтоніан у рівнянні (10.211) ще простіше шляхом введення нового оператора,

$$\mathbf{N} = \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^-,$$

званого *оператором числа*. Ще раз, це просто назва, але, як ми побачимо, це дуже відповідна назва. Виражений через оператор \mathbf{N} гамільтоніан стає таким,

$$\mathbf{H} = \omega\hbar (\mathbf{N} + 1/2). \quad (10.212)$$

Досі все, що ми зробили, це визначили деякі символи, \mathbf{a}^+ , \mathbf{a}^- і \mathbf{N} , які спрощують вигляд гамільтоніана; хоч і не ясно, чи наблизилися ми хоч на йоту до визначення власних значень енергії. Для того, щоб рухатися далі, давайте згадаємо мою попередню пораду: щоразу, коли ви бачите два оператори, комутують їх. Ми вже знаємо, один комутатор:

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+] = 1. \quad (10.213)$$

Далі, давайте знайдемо комутатори оператора, що підвищує і знижує, з оператором \mathbf{N} . Ми обчислимо ці комутатори, як кажуть, "в лоб", не мудрую лукаво. Ось необхідні кроки:

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{N}] = \mathbf{a}^- \mathbf{N} - \mathbf{N} \mathbf{a}^- = \mathbf{a}^- \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^- - \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^- \mathbf{a}^-.$$

Тепер ми скомбінуємо доданки таким чином,

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{N}] = (\mathbf{a}^- \mathbf{a}^+ - \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^-) \mathbf{a}^-.$$

Це виглядає досить складним, поки ми не помічаємо, що вираз у дужках всього лише комутатор $[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+]$, який дорівнює одиниці. Використовуючи цей факт для спрощення, ми отримуємо

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{N}] = \mathbf{a}^-.$$

Ми можемо зробити те саме з \mathbf{a}^+ і \mathbf{N} . Результат майже такий самий, за винятком знака. Тут весь перелік комутаторів зібрано в одному місці:

$$\begin{aligned} [\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+] &= 1 \\ [\mathbf{a}^-, \mathbf{N}] &= \mathbf{a}^- \\ [\mathbf{a}^+, \mathbf{N}] &= -\mathbf{a}^+. \end{aligned} \tag{10.214}$$

Це те, що ви могли б назвати алгеброю комутаторів: безліч операторів, яке є замкненим щодо операції комутування. Алгебра комутаторів має чудові властивості, які роблять її одним із улюблених інструментів фізиків-теоретиків. Давайте переконаємося у цьому одному з найбільш відомих прикладів, з прикладу гармонійного осцилятора. Ми використовуємо алгебру операторів для знаходження власних значень та власних векторів оператора \mathbf{N} . Як тільки ми знайдемо їх, ми зможемо негайно визначити власні значення гамільтоніану \mathbf{H} з рівняння (10.212). Прийом полягає у використанні методу індукції: ми починаємо, припускаючи, що ми маємо власне значення і власний вектор \mathbf{N} . Назвемо їх n і $|n\rangle$ відповідно. За визначенням,

$$\mathbf{N} |n\rangle = n |n\rangle.$$

Тепер давайте розглянемо новий вектор, який отримується шляхом впливу оператором \mathbf{a}^+ на вектор $|n\rangle$. Доведемо, що результат буде інший власний вектор оператора \mathbf{N} з іншим власним значенням. Знову ж таки, ми виконаємо всі необхідні обчислення лише шляхом безпосереднього застосування комутаційних співвідношень. Ми почнемо з того, що запишемо вираз $\mathbf{N}(\mathbf{a}^+ |n\rangle)$ у дещо складнішій формі,

$$\mathbf{N}(\mathbf{a}^+ |n\rangle) = [\mathbf{a}^+ \mathbf{N} - (\mathbf{a}^+ \mathbf{N} - \mathbf{N} \mathbf{a}^+)] |n\rangle.$$

Ми просто додали і відібрали $\mathbf{a}^+ \mathbf{N}$. Але зверніть увагу, що вираз у круглих дужках є останнім. комутаторів у рівнянні (10.214). З урахуванням значення цього комутатора ми отримуємо

$$\mathbf{N}(\mathbf{a}^+ |n\rangle) = \mathbf{a}^+ (\mathbf{N} + 1) |n\rangle.$$

Останній крок полягає у використанні того факту, що вектор $|n\rangle$ є власним вектором оператора \mathbf{N} із власним значенням n . Це означає, що ми можемо замінити $(\mathbf{N} + 1)$ на $(n + 1)$:

$$\mathbf{N}(\mathbf{a}^+ |n\rangle) = (n + 1) (\mathbf{a}^+ |n\rangle). \quad (10.215)$$

Як завжди, коли ми рухаємося на автопілоті, ми повинні тримати очі відкритими, щоб не пропустити цікаві результати. Рівняння (10.215) якраз цікаво. Воно говорить про те, що $\mathbf{a}^+ |n\rangle$ є новим власним вектором оператора \mathbf{N} з власним значенням $(n + 1)$. Іншими словами, якщо дано один власний вектор $|n\rangle$, то ми можемо знайти ще один власний вектор, для якого значення збільшується на 1. Все це може бути узагальнено таким рівнянням,

$$\mathbf{a}^+ |n\rangle = |n + 1\rangle. \quad (10.216)$$

Очевидно, що ми можемо зробити це знову і знову і знайдемо власні вектор $|n + 2\rangle$, $|n + 3\rangle$, і так далі. Примітно, що й існує власне значення n , мусить бути нескінченна послідовність власних значень з нього, відмінних цілі числа. Ім'я оператора "підвищує здається, добре підібрано.

Як щодо знижуючого оператора? Не дивно, що ми бачимо, що $\mathbf{a}^- |n\rangle$ дає власний вектор із власним значенням на одиницю нижче:

$$\mathbf{a}^- |n\rangle = |n - 1\rangle. \quad (10.217)$$

Це говорить про те, що має бути нескінченна послідовність власних значень нижче за n , але так не може бути. Ми вже знаємо, що основний стан має позитивну енергію, і оскільки $\mathbf{H} = \omega\hbar(\mathbf{N} + 1/2)$, то низхідна послідовність повинна закінчитися. Але це може статися тільки в тому випадку, якщо дія понижуючого оператора \mathbf{a}^- на основний стан $|0\rangle$ дає нуль замість чергового вектора стану ще з меншою енергією. (Не слід плутати $|0\rangle$ з нульовим вектором). Формально, це може бути виражене як

$$\mathbf{a}^- |0\rangle = 0. \quad (10.218)$$

Будучи найнижчим енергетичним станом, $|0\rangle$ є основним станом і його енергія є $E_0 = \omega\hbar/2$. Цей вектор є власним вектором \mathbf{N} з власним значенням 0. Часто вищенаведений результат виражають таким чином: Основний стан знищується оператором, що знижує \mathbf{a}^- .

Отже, ви бачите, що абстрактні об'єкти \mathbf{a}^+ , \mathbf{a}^- , і \mathbf{N} виявилися дуже корисними. Вони дозволили нам знайти весь спектр енергетичних рівнів квантового гармонійного осцилятора. І, при цьому, нам не потрібно вирішувати жодного складного рівняння. Цей спектр складається з таких значень енергії,

$$\begin{aligned}
 E_n &= \omega \hbar (n + 1/2) \\
 &= \omega \hbar (1/2, 3/2, 5/2, \dots).
 \end{aligned}
 \tag{10.219}$$

Це квантування рівнів енергії гармонійного осцилятора було одним із перших результатів квантової механіки і, безперечно, найважливішим. Атом водню є чудовим прикладом (застосування) квантової механіки, але це, зрештою, лише атом водню. Гармонійний осцилятор виникає скрізь, від коливань кристалічних ґрат до електромагнітних хвиль. Цей список можна продовжити. Навіть макроскопічні осцилятори, подібно до дитини на гойдалках, мають квантовані рівні енергії, але наявність постійної Планка в рівнянні (10.219) призводить до того, що відстань між рівнями настільки малі, що їх неможливо виявити.

Нескінченний спектр позитивних рівнів енергії для гармонійного осцилятора іноді називають вежею, а іноді називають сходами. Це схематично показано на рис. 10.2.

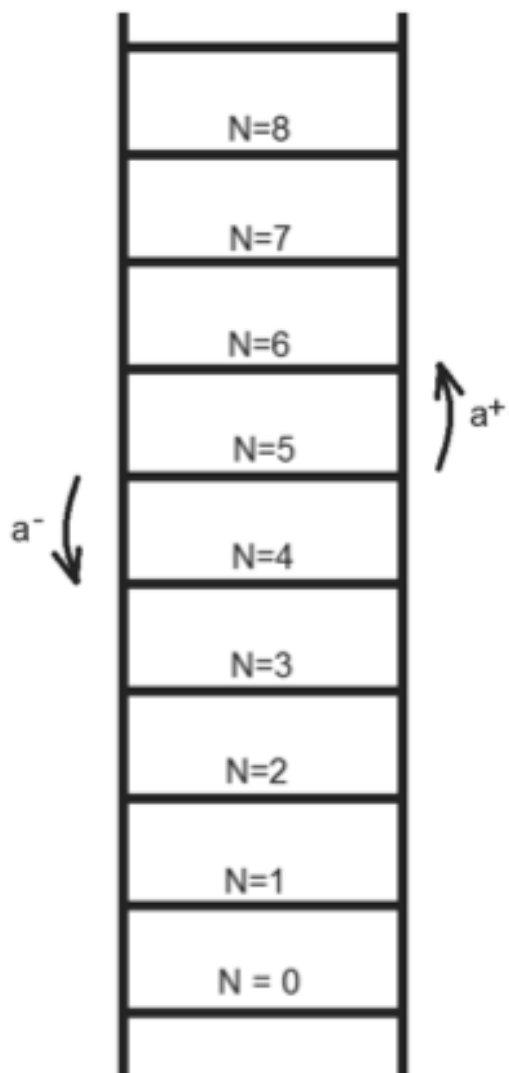
10.7. Назад до хвильових функцій

Ця вправа наочно продемонструвала чудову силу алгебри операторів. Метод операторів справді чудовий. Але, з іншого боку, це дуже абстрактно. Чи допоможе це нам у знаходженні хвильових функцій, які є конкретнішими та які легше візуалізувати? Звісно так.

Почнемо із основного стану. Ми бачили в рівнянні (10.218), що основний стан є єдиним станом, який знищується оператором \mathbf{a}^- . Тепер, давайте перепишемо формулу (10.218) через оператори координати та імпульсу та хвильову функцію основного стану $\psi_0(x)$:

$$\frac{i}{\sqrt{2\omega\hbar}} (\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X}) \psi_0(x) = 0,$$

або, поділивши на постійний множник, отримаємо



Мал. 10.2. Сходи енергетичних рівнів гармонійного осцилятора. Енергетичні рівні екі-дистантні (різниця енергій двох послідовних рівнів однакова для спектра). a^+ і a^- збільшує та знижує енергію рівня, відповідно. N має нижню межу, що дорівнює ну-лю (основний стан), але не має верхньої межі.

$$(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X})\psi_0(x) = 0.$$

Якщо ми тепер замінили \mathbf{P} на $-i\hbar\frac{d}{dx}$, ми отримаємо диференціальне рівняння першого порядку, яке вирішити набагато простіше ніж рівняння другого порядку, рівняння Шредінгера :

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{\omega x}{\hbar}\psi_0(x).$$

Це просте диференціальне рівняння, яке можна легко вирішити. Або ви можете просто перевірити, що хвильова функція основного стану

$$e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

з рівняння (10.204) є розв'язком цього рівняння. Обчислення хвильових функцій збуджених (не основних) станів ще простіше – не потрібно вирішувати жодних рівнянь. Давайте йти вгору сходами до $n = +1$. Ми можемо зробити це шляхом застосування оператора \mathbf{a}^+ до основного стану. Давайте назовемо хвильову функцію нового стану $\psi_1(x)$.

Щоб уникнути багаторазового переписування константи $-i/\sqrt{2\omega\hbar}$, ми просто відкинемо її з нашого визначення \mathbf{a}^+ . Це впливає лише на чисельний коефіцієнт. Отримане рівняння дорівнює,

$$\psi_1(x) = (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})\psi_0(x)$$

або

$$\psi_1(x) = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + i\omega x\right) e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Виносячи за дужки i , отримаємо

$$\psi_1(x) = i \left(-\hbar\frac{\partial}{\partial x} + \omega x\right) e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Найважча частина роботи полягає в обчисленні не складної похідної від функції $e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$. Ось результат:

$$\psi_1(x) = 2i\omega x e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2},$$

або

$$\psi_1(x) = 2i\omega x \psi_0(x).$$

Єдиною істотною відмінністю між $\psi_0(x)$ і $\psi_1(x)$ є наявність множника x у $\psi_1(x)$. І ця відмінність має ефект: Цей множник призводить до того, що хвильова функції першого збудженого стану має нуль, або вузол, за $x = 0$. Аналогічні зміни відбуваються і з хвильовими функціями вищих рівнів енергетичних сходів: кожне подальше збуджене стан має додатковий вузол. Ми можемо простежити це з прикладу обчислення хвильової функції другого збудженого стану, тобто $n = 2$. Все, що нам потрібно зробити, це застосувати знову \mathbf{a}^+ :

$$\psi_2(x) = i \left(-\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \omega x \right) \left(x e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} \right).$$

Можна відразу побачити, що множник ωx перетвориться на ωx^2 . Тим часом, похідна $-\frac{\partial}{\partial x}$ дасть два доданки, в силу правила диференціювання твору. Один із цих доданків виникне від експоненти (з додатковим множником ωx). Інше доданок виникне від диференціювання x . Зрозуміло, що зрештою ми матимемо квадратичний багаточлен. Після взяття похідних отримаємо хвильову функцію,

$$\psi_2(x) = (-\hbar + 2\omega x^2) e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}.$$

І так далі, вгору сходами. Ми можемо помітити ще одну особливість: кожна власна функція є багаточленом від x , помножений на $e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$. Оскільки експоненційна функція прагне до нуля швидше, ніж зростає будь-який з

багаточленів, кожна власна функція асимптотично наближається до нуля, коли x прагне до плюс або мінус нескінченності. Крім того, оскільки ступінь кожного полінома на одиницю більший, ніж ступінь попереднього, кожна наступна власна функція має більше нулів, ніж попередня. Це також пояснює, чому власні функції є по черзі симетричними або антисиметричними (по x). Зокрема, власні функції з поліномами парного ступеня є симетричними, у той час як ті, що з поліномами непарного ступеня є антисиметричними. Багаточлени у цій послідовності дуже добре відомі. Вони називаються поліномами Ерміта. Хвильова функція основного стану $e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$, яка входить співмножником у всі хвильові функції збуджених станів, є симетричною по x .

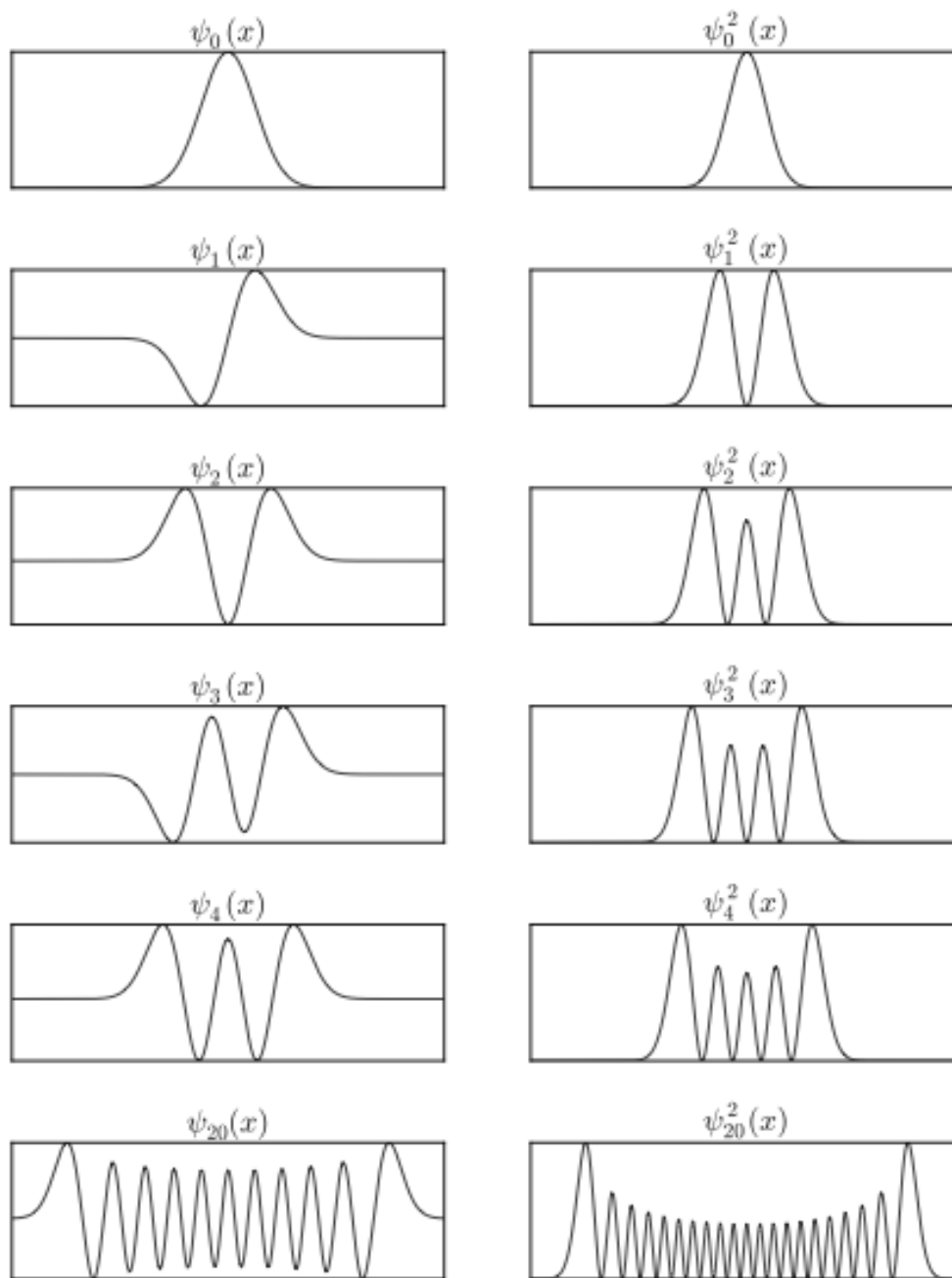
На рисунку 10.3 наведено власні хвильові функції для кількох різних рівнів енергії. Кожна наступна власна функція осцилює швидше, ніж попередня. Це відповідає збільшенню імпульсу. Чим швидше хвильова функція осцилює, тим більший імпульс системи. На більш високих рівнях енергії хвильова функція також стає більш розмитою. З фізичної точки зору це означає, що маса переміщається далі від точки рівноваги і рухається швидше.

Ці власні функції дають ще один важливий урок. Незважаючи на те, що вони прагнуть нуля асимптотично (досить швидко), вони ніколи не досягають нуля. Це означає, що є невелика, але кінцева ймовірність знаходження частки "поза шаром який визначається його потенційною енергією (кордон цього, в даному випадку одновірного, "кулі визначається умовою рівності потенційної та кінетичної енергії осцилятора). Це, відоме як квантове тунелювання, зовсім невідоме у класичній фізиці.

10.8. Важливість квантування

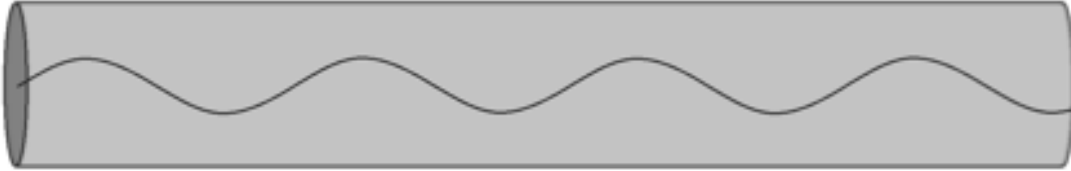
Ми піднялися на високу гору у цих лекціях, але це не остання гора. Дивлячись із нинішньої точки, ми можемо отримати уявлення про величезний ландшафт квантової теорії поля. Це матеріал для іншої книги. Або може бути для трьох. Проте ми можемо трохи озирнутися навколо, з того місця, де ми знаходимося.

Розглянемо приклад електромагнітного випромінювання у порожнині,



Мал. 10.3. Власні хвильові функції гармонійного осцилятора. Амплітуди показані зліва, а ймовірності - праворуч. Хвильові функції, відповідні більшій енергії, осцилюють швидше і розмиті.

як показано на рисунку 10.4. У цьому контексті, порожнина являє собою область простору обмежена парою дзеркал, що ідеально відображають, які утримують випромінювання бігаючим нескінченно взад і вперед. Подумайте про порожнину як про довгу металеву трубку, по якій випромінювання може рухатися вперед в обох напрямках.



Мал. 10.4. Електромагнітне випромінювання у порожнині.

Існує багато довжин хвиль, які можуть поміститися у порожнину. Розглянемо хвилі довжиною λ . Як і будь-які хвилі, ці хвилі коливаються, що дуже схоже на коливання грузика на кінці пружини. Але важливо не заплутатися тут: осцилятори не маси, прикріплені до пружин. Що насправді коливається, то це електричні та магнітні поля. Для кожної довжини хвилі існує такий математичний гармонічний осцилятор, який описує амплітуду або напруженість поля. Багато гармонічних осциляторів коливаються одночасно. На щастя, однак, всі вони коливаються незалежно один від одного, тому ми можемо зосередити нашу увагу на хвилях однієї певної довжини хвилі і ігнорувати все інше.

Існує тільки одне важливе число, пов'язане з гармонічним осцилятором, зокрема, його частота. Ви, напевно, вже знаєте, як розрахувати частоту хвилі довжиною λ :

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}.$$

У класичній фізиці, звичайно ж, частота лише частота. Але в квантовій механіці частота визначає квант енергії осцилятора. Іншими словами, енергія, що міститься у хвилях довжиною λ , має бути

$$(n + 1/2) \hbar\omega.$$

Складане $(1/2)\hbar\omega$ не важливо для наших теперішніх цілей. Воно називається енергією нульових коливань, і ми його ігнорувати (слід сказати, що у квантової теорії поля цей член грає величезну роль). Якщо ми зробимо так, то енергія хвиль довжини λ стає

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda}n,$$

де n може бути будь-яким цілим числом від нуля та більше. Іншими словами, енергія електромагнітної хвилі квантується у неподільних одиницях

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda}.$$

Для класичного фізика це дуже дивно. Незалежно від того, що ви робите, енергія завжди приходить і йде неподільні одиниці (квантами).

Ви вже знаєте, що ці одиниці називаються фотони. Насправді фотон це просто інша назва для дискретної одиниці енергії квантового гармонійного осцилятора. Але ми також можемо описати ті самі факти по-іншому. Будучи неподільні, фотони можна розглядати як елементарні частинки. Хвиля збуджена до її n -го квантового стану може розглядатися як сукупність n фотонів.

Що таке енергія одного фотону? Це легко. Це просто енергія, яка потрібна, щоб додати ще одну одиницю, а саме:

$$E(\lambda) = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}.$$

Тут ми можемо побачити щось, що визначало фізику протягом більше ста років: чим коротша довжина хвилі фотона, тим вища його енергія. З чого це фізики так прагнуть отримати короткохвильові фотони, враховуючи, що для цього потрібно так багато енергії? Це для того, щоб краще бачити. Як уже говорилося в лекції 1, щоб дозволити об'єкт заданого розміру, ви повинні використовувати хвилі з довжиною хвилі такого ж розміру або



меншого. Щоб побачити людську фігуру, довжина хвилі кілька дюймів досить хороша. Щоб побачити крихітні порошинки, вам може знадобитися видиме світло набагато меншої довжини хвилі. Для дозволу частини протона, довжина хвилі повинна бути меншою, ніж 10^{-15} метрів, а відповідні фотони мають бути дуже енергійними. Зрештою, все це перегукується з гармонійним осцилятором.

Додаток

Матриці Паулі

$$\sigma_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

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

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

Дія спинових операторів

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \iff \sigma_z |u\rangle = |u\rangle$$

$$\sigma_x |u\rangle = |d\rangle$$

$$\sigma_y |u\rangle = i |d\rangle$$

$$|d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \iff \sigma_z |d\rangle = -|d\rangle$$

$$\sigma_x |d\rangle = |u\rangle$$

$$\sigma_y |d\rangle = -i |u\rangle$$

$$|r\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \iff \begin{aligned} \sigma_z |r\rangle &= |l\rangle \\ \sigma_x |r\rangle &= |r\rangle \\ \sigma_y |r\rangle &= -i |l\rangle \end{aligned}$$

$$|l\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \iff \begin{aligned} \sigma_z |l\rangle &= |r\rangle \\ \sigma_x |l\rangle &= -|l\rangle \\ \sigma_y |l\rangle &= i |r\rangle \end{aligned}$$

$$|i\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ i \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \iff \begin{aligned} \sigma_z |i\rangle &= |o\rangle \\ \sigma_x |i\rangle &= i |o\rangle \\ \sigma_y |i\rangle &= |i\rangle \end{aligned}$$

$$|o\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \iff \sigma_z |o\rangle = |i\rangle$$

$$\sigma_x |o\rangle = -i |i\rangle$$

$$\sigma_y |o\rangle = -|o\rangle$$

Зміна базису

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

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |d\rangle$$

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

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

Компонента спина у довільному напрямку \hat{n}

Векторні позначення

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

У вигляді компонент

$$\sigma_n = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z$$

Більш конкретно

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

Зібране в одну матрицю

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} n_z & (n_x - in_y) \\ (n_x + in_y) & -n_z \end{pmatrix}$$

Таблиці множення операторів спіна

Декілька слів про позначення: У таблиці 3 нижче символ i використовуються у двох різних значеннях. Всередині позначення кет векторів, таких як $|io\rangle$, він є частиною позначення вектора стану - io означає “in-out” (“всередину-назовні”). Але коли i розташований поза символом кет вектора, як, наприклад, $i|oo\rangle$, він позначає уявну одиницю.

Табл. 0.1. Базис вгору-вниз

	2-спін власні вектори			
	$ uu\rangle$	$ ud\rangle$	$ du\rangle$	$ dd\rangle$
σ_z	$ uu\rangle$	$ ud\rangle$	$- du\rangle$	$- dd\rangle$
σ_x	$ du\rangle$	$ dd\rangle$	$ uu\rangle$	$ ud\rangle$
σ_y	$i du\rangle$	$i dd\rangle$	$-i uu\rangle$	$-i ud\rangle$
τ_z	$ uu\rangle$	$- ud\rangle$	$ du\rangle$	$- dd\rangle$
τ_x	$ ud\rangle$	$ uu\rangle$	$ dd\rangle$	$ du\rangle$
τ_y	$i ud\rangle$	$-i uu\rangle$	$i dd\rangle$	$-i du\rangle$

$$|i\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \iff \begin{aligned} \sigma_z |i\rangle &= |o\rangle \\ \sigma_x |i\rangle &= i |o\rangle \\ \sigma_y |i\rangle &= |i\rangle \end{aligned}$$

$$|o\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \iff \begin{aligned} \sigma_z |o\rangle &= |i\rangle \\ \sigma_x |o\rangle &= -i |i\rangle \\ \sigma_y |o\rangle &= -|o\rangle \end{aligned}$$

Зміна базису

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

Компонента спина у довільному напрямку \hat{n}

Векторні позначення

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

У вигляді компонент

$$\sigma_n = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z$$

Більш конкретно

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

Зібране в одну матрицю

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} n_z & (n_x - in_y) \\ (n_x + in_y) & -n_z \end{pmatrix}$$

Таблиці множення операторів спина

Декілька слів про позначення: У таблиці 3 нижче символ i використовуються у двох різних значеннях. В середині позначення кет векторів, таких як $|io\rangle$, він є частиною позначення вектора стану - io означає “in-out” (“всередину-назовні”). Але коли i розташований поза символом кет вектора, як, наприклад, $i|oo\rangle$, він позначає уявну одиницю.

Табл. 0.2. Базис вгору-вниз

	2-спін власні вектори			
	$ uu\rangle$	$ ud\rangle$	$ du\rangle$	$ dd\rangle$
σ_z	$ uu\rangle$	$ ud\rangle$	$- du\rangle$	$- dd\rangle$
σ_x	$ du\rangle$	$ dd\rangle$	$ uu\rangle$	$ ud\rangle$
σ_y	$i du\rangle$	$i dd\rangle$	$-i uu\rangle$	$-i ud\rangle$
τ_z	$ uu\rangle$	$- ud\rangle$	$ du\rangle$	$- dd\rangle$
τ_x	$ ud\rangle$	$ uu\rangle$	$ dd\rangle$	$ du\rangle$
τ_y	$i ud\rangle$	$-i uu\rangle$	$i dd\rangle$	$-i du\rangle$

Табл. 0.3. Базис вправо-вліво

	2-спін власні вектори			
	$ rr\rangle$	$ rl\rangle$	$ lr\rangle$	$ ll\rangle$
σ_z	$ lr\rangle$	$ ll\rangle$	$ rr\rangle$	$ rl\rangle$
σ_x	$ rr\rangle$	$ rl\rangle$	$- lr\rangle$	$- ll\rangle$
σ_y	$-i lr\rangle$	$-i ll\rangle$	$i rr\rangle$	$i rl\rangle$
τ_z	$ rl\rangle$	$ rr\rangle$	$ ll\rangle$	$ lr\rangle$
τ_x	$ rr\rangle$	$- rl\rangle$	$ lr\rangle$	$- ll\rangle$
τ_y	$-i rl\rangle$	$i rr\rangle$	$-i ll\rangle$	$i lr\rangle$

Табл. 0.4. Базис вперед-назад

	2-спін власні вектори			
	$ ii\rangle$	$ io\rangle$	$ oi\rangle$	$ oo\rangle$
σ_z	$ oi\rangle$	$ oo\rangle$	$ ii\rangle$	$ io\rangle$
σ_x	$i oi\rangle$	$i oo\rangle$	$- ii\rangle$	$- io\rangle$
σ_y	$ ii\rangle$	$ io\rangle$	$- oi\rangle$	$- oo\rangle$
τ_z	$ io\rangle$	$ ii\rangle$	$ oo\rangle$	$ oi\rangle$
τ_x	$i oi\rangle$	$-i ii\rangle$	$i oo\rangle$	$-i oi\rangle$
τ_y	$ ii\rangle$	$- io\rangle$	$ oi\rangle$	$- oo\rangle$