ЛЕКЦИЯ 13. 7.09.2001

КВАНТОВАЯ КИНЕМАТИКА

В прошлом семестре мы узнали, что квантовая механика, как точная наука, ведет свое начало с 1925 года.

Именно в этом году Гайзенберг установил, что комбинационный принцип Ритца требует пересмотра кинематических представлений, лежащих в основе классической физики. Он показал, что в теории, которая не будет противоречить принципу Ритца, с физическими величинами следует сопоставлять наборы чисел, нумеруемых парой чисел, т.е. матрицы. Поскольку матрицы можно рассматривать как координатную реализацию **линейных операторов**, можно принять в качестве постулата следующее утверждение

> динамическим переменным физической системы соответствуют линейные операторы в гильбертовом пространстве.

Гильбертово пространство, как известно, — это линейное пространство с определенным в нем скалярным произведением. Чтобы напомнить смысл терминов, которые будут постоянно употребляться в дальнейшем, предположим, что гильбертово пространство определено как множество квадратично интегрируемых функций некоторого числа действительных переменных q:

$$\mathcal{H} \quad = \quad \psi(q), \qquad \int |\psi(q)|^2 dq \quad < \quad \infty$$

Скалярное произведение в этом пространстве определяется формулой

$$< \psi_1 | \psi_2 > \quad = \quad \int \psi_1^*(q) \psi_2(q) dq.$$

Если обращаться с δ-функциями как с обычными, то все необходимые нам линейные операторы можно считать интегральными:

$$\psi(q) \Rightarrow \psi^{'}(q) \quad = \quad (\hat{F}\psi)(q) \quad = \quad \int F(q, q^{'}) \psi(x^{'}) dq^{'},$$

и сопоставлять с оператором $\hat{F}$ интегральное ядро $F(q, q^{'})$

$$\hat{F} \Leftrightarrow F(q, q^{'}).$$

Для определения действительных величин прибегают к помощи **эрмитового сопряжения**. Со всяким ядром $F(q, q^{'})$ можно сопоставить **эрмитово сопряженное ядро**

$$F^{+}(q, q^{'}) \quad = \quad F^*(q^{'}, q)$$

и эрмитово сопряженный оператор $\hat{F}^{+}$

$$(\hat{F}^{+}\psi)(q) \quad = \quad \int F^{+}(q, q^{'}) \psi(q^{'}) dq^{'}.$$

Поскольку двукратное эрмитово сопряжение приводит к первоначальному оператору:

$$(F^{+})^{+}(q,q^{'}) \quad = \quad (F^{+})^{*}(q^{'},q) \quad = \quad F(q,q^{'}),$$

то эрмитово сопряжение операторов аналогично обычному сопряжению комплексных чисел. После этого напрашивается определение:

> если величине F соответствует оператор $\hat{F}$, то комплексно сопряженной величине F^* соответствует эрмитово сопряженный оператор $\hat{F}^{+}$:

$$F \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{F}, \qquad F^* \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{F}^{+}.$$

В силу этого соглашения с действительными величинами сопоставляются самосопряженные (или **эрмитовы**) операторы:

$$F \quad = \quad F^* \qquad \Longleftrightarrow \qquad \hat{F} \quad = \quad \hat{F}^{+}.$$

Чтобы оперировать с функциями операторов, нужно определить сумму и произведение операторов. Первая величина определяется соглашением:

$$\hat{G} \quad = \quad C_1\hat{F}_1 + C_2\hat{F}_2 \qquad \Longleftrightarrow \qquad G(q,q^{'}) \quad = \quad C_1F_1(q,q^{'}) + C_2F_2(q,q^{'}),$$

а с произведением операторов сопоставлют композицию ядер сомножителей:

$$G(q,q^{'}) \quad = \quad \int F_1(q,q^{''})dq^{''}F_2(q^{''},q^{'}) \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{G} \quad = \quad \hat{F}_1\hat{F}_2.$$

Произведение операторов осуществляет преобразование вектора в два приема:

$$(\hat{F}_1\hat{F}_2)\Psi \quad = \quad \hat{F}_1(\hat{F}_2\Psi).$$

Полезно помнить, что умножение операторов некоммутативно,

$$\hat{F}_1\hat{F}_2 \quad \neq \quad \hat{F}_2\hat{F}_1,$$

и что величину

$$\hat{G} \quad = \quad \hat{F}_1\hat{F}_2 \quad - \quad \hat{F}_2\hat{F}_1 \quad \equiv \quad [\hat{F}_1,\hat{F}_2]$$

называют **коммутатором** операторов $\hat{F}_1$ и $\hat{F}_2$.

СОСТОЯНИЯ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

В 1927 году фон-Нейман объяснил, как можно строго определить понятие **состояния физической системы**. В физике все сведения о свойств систем требуют проведения некоторых измерений, а результатом измерения, в конечном счете, является некоторое число, которому придают смысл **среднего значения** той или иной физической величины. Поэтому для сравнение теории с экспериментом возможно только после того, как будет найдена формула вычисления средних значений. Это означает, что следует определить число $<\hat{F}>$ - функцию оператора $\hat{F}$. Фон-Нейман потребовал, чтобы эта функция удовлетворяла следующим условиям:

1) $<\hat{E}> \;=\; 1$ — среднее значение единицы равно единице;

2) $<C_1\hat{F}_1+C_2\hat{F}_2> \;=\; C_1<\hat{F}_1>+C_2<\hat{F}_1>$ — среднее значение суммы равно сумме средних значений;

3) $<\hat{F}^+> \;=\; (<\hat{F}>)^*$ — средние значения комплексно сопряженных величин комплексно сопряжены;

4) если $\hat{F}$ — неотрицательная величина, то ее среднее также неотрицательно: $\hat{F} \;\geq\; 0 \quad\Longrightarrow\quad <\hat{F}> \;\geq\; 0.$

Оказалось, что эти условия однозначно определяют функцию $<\hat{F}>$:

$$<\hat{F}> \;=\; Tr(\hat{F}\hat{\rho}).$$

Правая часть этой формулы содержит оператор $\hat{\rho}$, который должен удовлетворять условиям

I. $\hat{\rho}^+ \;=\; \hat{\rho}.$

II. $Tr\hat{\rho} \;=\; 1.$

III. Для каждого вектора Ψ из $\mathcal{H}$ справедливо неравенство $<\Psi|\hat{\rho}\Psi> \;\geq\; 0.$

Фон-Нейман предложил связывать каждый из операторов $\hat{\rho}$ с некоторым состоянием системы. Это приводит к определению:

Произвольному состоянию системы соответствует линейный оператор $\hat{\rho}$ со свойствами I. - III.

После этого можно сказать, что **среднее значение величины $\hat{F}$ в состоянии** $\hat{\rho}$ равно

$$<\hat{F}>_\rho \;=\; Tr(\hat{F}\hat{\rho}).$$

Поскольку основное назначение оператора $\hat{\rho}$ — вычисление средних, его называют **матрицей плотности**. Можно сказать, что матрица плотности — это эрмитов положительно определенный оператор с единичным следом.

Фон-Нейман дал **объективное определение состояния**. Он же, сформулировав теорию измерений, выяснил как с помощью измерений можно выяснить, в каком состоянии находится система.

Для этого, естественно, необходимы максимально точные измерения. Поэтому следует дать определение **точного значения физической величины**. Теория вероятности учит, что для этого нужно обратиться к понятию **дисперсии**.

Дисперсия величины $\hat{F}$ в состоянии $\hat{\rho}$ — это число, равное

$$D_\rho(\hat{F}) \;=\; <\hat{F}^2>_\rho-(<\hat{F}>_\rho)^2 \;=\; <(\hat{F}-<\hat{F}>_\rho\hat{E})^2>_\rho .$$

Среднее значение действительной величины действительно, поэтому **дисперсия действительной величины неотрицательна**. Естественно сказать, что

действительная величина $\hat{F}$ имеет точное значение в состоянии ρ, если ее дисперсия в этом состоянии равна нулю.

Известно, что каждую конечномерную эрмитову матрицу можно привести к диагональному виду. В случае бесконечномерной матрицы это не так. Существуют бесконечнорядные эрмитовы матрицы (например импульса и координаты), которые нельзя привести к диагональной форме. Поэтому целесообразно выделить особый класс операторов — **операторы с чисто дискретным спектром**. Так называют операторы, которые можно представить в форме

$$\hat{F} \quad = \quad \sum\nolimits_n f_n \hat{P}_n,$$

где все числа f_n различны:

$$f_m \neq f_n, \quad \textit{если} \quad m \neq n,$$

а операторы $\hat{P}_n$ обладают свойствами

$$\hat{P}_n^+ \quad = \quad \hat{P}_n, \qquad \hat{P}_m \hat{P}_n \quad = \quad \delta_{mn} \hat{P}_m, \qquad \sum\nolimits_n \hat{P}_n \quad = \quad \hat{E}.$$

Совокупность чисел $\{f_n\}$ называют **спектром оператора**, систему опературов $\hat{P}_n$ — **спектральным рвзложением единицы**, принадлежащим оператору $\hat{F}$, а представление оператора в форме указанной суммы — **спектральным представлением оператора**. Зная спектральное представление оператора, легко определить его произвольную функцию:

$$\phi(\hat{F}) \quad = \quad \sum\nolimits_n \phi(f_n) \hat{P}_n.$$

Используя спектральное представление оператора, среднее значение величины $\hat{F}$ можно записать в форме

$$< \hat{F} >_\rho \quad = \quad \sum_n f_n Tr(\hat{P}_n \hat{\rho}).$$

Числа $w_n = Tr(\hat{P}_n \hat{\rho})$ обладают свойствами

$$w_n \quad \geq \quad 0, \qquad \sum\nolimits_n w_n \quad = \quad 1,$$

т.е. определяют некоторое распределение вероятностей:

$$w_n \quad = \quad Tr(\hat{P}_n \hat{\rho}) \quad -$$

это вероятность того, что величина $\hat{F}$ принимает значение f_n в состоянии $\hat{\rho}$.

Для дальнейшего существенно, что класс операторов, к которому принадлежит матрица плотности, — это операторы с чисто дискретным спектром. Поэтому каждую матрицу плотности можно представить в форме

$$\hat{\rho} \quad = \quad \sum\nolimits_n p_n \hat{P}_n,$$

где числа p_n обладают свойствами

$$0 \quad \leq \quad p_n \quad \leq \quad 1, \qquad \sum\nolimits_n p_n Tr(\hat{P}_n) \quad = \quad 1.$$

Операторы $\hat{P}_n$ можно представить следующим образом. Пусть векторы $|v_r> \equiv v_n^{(r)}$ образуют ортонормированный базис пространстве $\mathcal{H}$. Это означает, что справедливы равенства

$$\sum_n v^{*}{}_n^{(r)} v_n{}^{(s)} \quad = \quad \delta_{rs} \quad -$$

ортонормированность векторов базиса,

$$\sum_r v_m^{(r)} v^{*}{}_n^{(r)} \quad = \quad \delta_{mn} \quad -$$

полнота базиса.

Пусть $\Delta_n = \{i_1, ..., i_n\}$ – наборы положительных целых чисел, причем среди различных наборов нет общих чисел, $\Delta_m \cap \Delta_n = 0$ при $m \neq n$, а среди всех этих наборов один и только один раз можно найти любое положительное число. Операторы

$$\hat{P}_n|\Psi> \quad = \quad \sum_{i \in \Delta_n} |v_i>< v_i|\Psi> .$$

Совокупность всех $\hat{P}_n$ образует искомый набор операторов. Пусть числа p_n удовлетворяют неравенствам

$$0 \leq p_n \leq 1, \qquad \sum_n p_n Tr \hat{P}_n \quad = \quad 1.$$

Матрицу плотности можно представить в форме

$$\hat{\rho} \quad = \quad \sum_n p_n \hat{P}_n.$$

Среднее значение величины $\hat{K}$ в состоянии ρ равно

$$< \hat{K} >_\rho \quad = \quad \sum_n p_n (\sum_{s \in \Delta_n} < v_s|\hat{K} v_s >).$$

Если $\hat{K} \quad = \quad \hat{T}^+ \hat{T}$, то

$$< v_s|\hat{K} v_s >= ||\hat{T} v_s||^2.$$

Дисперсия величины $\hat{F}$ в состоянии $\hat{\rho}$ равна

$$D_\rho(\hat{F}) \quad = \quad \sum_n \sum_{s \in \Delta_n} p_n ||\hat{T} v_s||^2,$$

где

$$\hat{T} \quad = \quad \hat{F} - < \hat{F} >_\rho \hat{E}.$$

Если дисперсия равна нулю, то должны выполняться равенства

$$\forall n \qquad p_n (\sum_{s \in \Delta_n} ||\hat{T} v_s||^2).$$

Если $p_n \neq 0$, то

$$\hat{T} v_s \quad = \quad (\hat{F} - < \hat{F} >_\rho \hat{E}) v_s \quad = \quad 0,$$

т.е.

$$\hat{F} v_s \quad = \quad v_s < \hat{F} >_\rho \qquad \forall s \quad \in \quad \Delta_n.$$

Таким образом, если величина $\hat{F}$ имеет точное значение, то ее среднее значение равно одному из собственных значений оператора $\hat{F}$:

$$D_\rho(\hat{F}) \quad = 0 \quad \Longrightarrow \exists v : \hat{F} v \quad = \quad v < \hat{F} >_\rho .$$