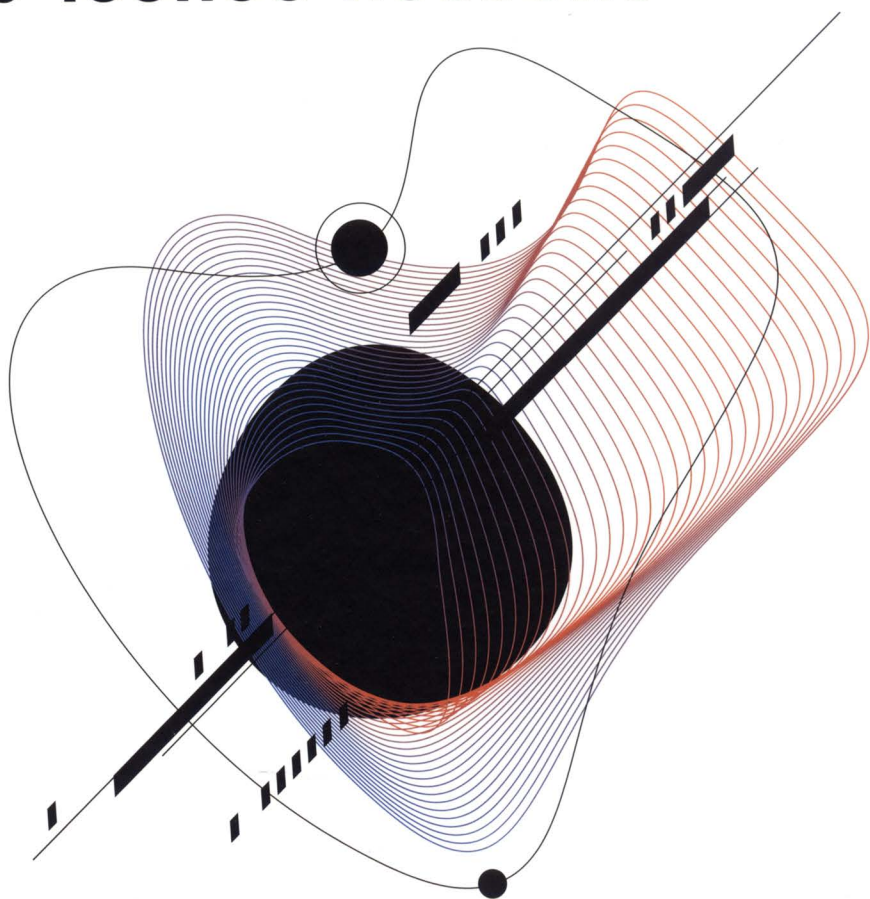


Отличная **КВАНТОВАЯ** **МЕХАНИКА**

Учебное пособие



Александр Львовский

АНО
АЛЬПИНА НОН-ФИКШН

Отличная КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Учебное пособие

QUANTUM PHYSICS

AN INTRODUCTION BASED ON PHOTONS

A. I. Lvovsky

Александр Львовский

Отличная КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Учебное пособие

Перевод с английского

АНО
АЛЬПИНА НОН-ФИКШН

Москва
2019

УДК 530.145
ББК 22.314
Л89

Переводчик Н. Лисова
Редактор А. Ростоцкая

Львовский А.

Л89 Отличная квантовая механика : Учеб. пособие : в 2 ч. / Александр Львовский ; Пер. с англ. — М.: Альпина нон-фикшн, 2019. — 422 с.

ISBN 978-5-91671-952-9

Ч. I. — 422 с.

Наряду с традиционным материалом, охватываемым курсом квантовой механики (состояния, операторы, уравнение Шрёдингера, атом водорода), в книге предлагается глубинное обсуждение таких концепций, как гильбертово пространство, квантовое измерение, запутанность и декогеренция. Эти концепции имеют решающее значение для понимания квантовой физики и ее связи с макроскопическим миром, но редко рассматриваются в учебниках начального уровня.

В книге применяется математически простая физическая система — поляризация фотонов — в качестве инструмента визуализации, что позволяет студенту увидеть запутанную красоту квантового мира с самых первых страниц. Формальные концепции квантовой физики проиллюстрированы примерами из современных экспериментальных исследований, таких как квантовые компьютеры, коммуникации, телепортация и нелокальность.

Материал книги успешно использовался в качестве основного учебного пособия в двухсеместровом курсе по квантовой механике для студентов-физиков. Однако потенциальный круг читателей много шире и охватывает как студентов и аспирантов, изучающих точные науки, так и всех интересующихся квантовой физикой и квантовыми технологиями. Математический аппарат, требующийся для понимания книги, не выходит за пределы курса технического вуза или математической школы.

Автор — профессор Оксфордского университета, экспериментатор с мировым именем в области квантовой оптики и квантовой информатики — применяет сократовскую педагогику: студенту предлагается самостоятельно разработать аппарат квантовой физики путем последовательного решения тщательно составленных задач. Подробные решения представлены во втором томе пособия.

УДК 530.145
ББК 22.314

Все права защищены. Никакая часть этой книги не может быть воспроизведена в какой бы то ни было форме и какими бы то ни было средствами, включая размещение в сети интернет и в корпоративных сетях, а также запись в память ЭВМ для частного или публичного использования, без письменного разрешения владельца авторских прав. По вопросу организации доступа к электронной библиотеке издательства обращайтесь по адресу tylib@alpina.ru.

© Львовский А., 2019

© Издание на русском языке, перевод, оформление.

ООО «Альпина нон-фикшн», 2019

ISBN 978-5-91671-952-9 (рус.)

ISBN 978-3-662-56582-7 (англ.)

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	11
Почему я написал эту книгу?	11
Квантовая механика или квантовая оптика?	14
Структура курса	16
Как пользоваться этой книгой (послание студенту)	18
ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОЯЗЫЧНОМУ ИЗДАНИЮ	21
ПРЕДИСЛОВИЕ РОССИЙСКОГО КВАНТОВОГО ЦЕНТРА ...	23
БЛАГОДАРНОСТИ	25

ГЛАВА 1. КВАНТОВЫЕ ПОСТУЛАТЫ	29
1.1. Предмет квантовой механики.....	29
1.2. Постулат гильбертова пространства	31
1.3. Поляризация фотона	34
1.4. Квантовые измерения.....	38
1.4.1. Постулат об измерениях.....	38
1.4.2. Измерения поляризации.....	43
1.5. Квантовая интерференция и дополнительность	47
1.6. Квантовая криптография	51
1.6.1. Протокол BB84	53
1.6.2. Практические вопросы квантовой криптографии	56
1.7. Операторы в квантовой механике	59
1.8. Проекционные операторы и ненормированные состояния	63
1.9. Квантовые наблюдаемые.....	64
1.9.1. Наблюдаемые операторы	64
1.9.2. Среднее значение и неопределенность наблюдаемого....	66
1.9.3. Принцип неопределенности	69
1.10. Квантовая эволюция	71
1.11. Задачи	76

ГЛАВА 2. ЗАПУТАННОСТЬ

2.1. Пространство тензорных произведений	83
2.1.1. Тензорное произведение состояний и запутанные состояния	83
2.1.2. Измерения в составных пространствах	86
2.1.3. Тензорное произведение операторов	89
2.1.4. Локальные операторы	91

2.2. Локальные измерения запутанных состояний	93
2.2.1. Удаленное приготовление состояния	93
2.2.2. Частичное скалярное произведение	95
2.2.3. Локальные измерения и причинность	100
2.2.4. Смешанные состояния	102
2.3. Квантовая нелокальность	104
2.3.1. Парадокс Эйнштейна — Подольского — Розена	104
2.3.2. Неравенство Белла	107
2.3.3. Нарушение неравенства Белла	111
2.3.4. Нелокальность Гринбергера — Хорна — Цайлингера (ГХЦ)	115
2.4. Взгляд на квантовые измерения	118
2.4.1. Измерения фон Неймана	118
2.4.2. Декогеренция	121
2.4.3. Интерпретации квантовой механики	125
2.4.4. Дерево суперпозиции*	129
2.5. Квантовые вычисления	134
2.6. Квантовая телепортация и ее приложения	139
2.6.1. Квантовая телепортация	139
2.6.2. Квантовый повторитель	144
2.7. Задачи	148

ГЛАВА 3. ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

3.1. Непрерывные наблюдаемые	153
3.2. Волна де Бройля	160
3.3. Координатный и импульсный базисы	163
3.3.1. Преобразование между координатным и импульсным базисами	163
3.3.2. Неопределенность координаты и импульса	166
3.3.3. Парадокс Эйнштейна — Подольского — Розена в первоначальном виде	168
3.4. Потенциал свободного пространства	170
3.5. Стационарное уравнение Шрёдингера	175
3.6. Связанные состояния	179
3.7. Несвязанные состояния	186
3.7.1. Потенциал-ступенька	187
3.7.2. Квантовое туннелирование	193
3.8. Гармонический осциллятор	198
3.8.1. Операторы уничтожения и рождения	199

3.8.2. Фоковские состояния	202
3.8.3. Когерентные состояния	210
3.9. Представление Гейзенберга	215
3.9.1. Эволюция оператора	216
3.9.2. Оператор смещения	222
3.9.3. Эволюция плотностей вероятности*	224
3.10. Преобразования состояний гармонического осциллятора	227
3.10.1. Когерентное состояние как смещенное вакуумное ...	227
3.10.2. Фазовый сдвиг	229
3.10.3. Сжатие	231
3.11. Задачи	239

ГЛАВА 4. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

4.1. Трехмерное движение	247
4.2. Центральнo-симметричный потенциал	250
4.2.1. Сферические координаты	250
4.2.2. Квантовый момент импульса	254
4.3. Собственные состояния момента импульса	259
4.3.1. Матричное представление момента импульса	259
4.3.2. Волновые функции собственных состояний момента импульса	266
4.3.3. Спин	269
4.4. Атом водорода	270
4.4.1. Радиальные волновые функции	270
4.4.2. Энергетический спектр и переходы	273
4.4.3. Периодическая система элементов	279
4.5. Сфера Блоха	283
4.6. Магнитный момент и магнитное поле	287
4.6.1. Момент импульса и магнитный момент	287
4.6.2. Прибор Штерна — Герлаха	289
4.6.3. Эволюция магнитных состояний	291
4.7. Магнитный резонанс	293
4.7.1. Вращающийся базис	293
4.7.2. Эволюция в приближении вращающейся волны	298
4.7.3. Площадь импульса	301
4.7.4. Приложения магнитного резонанса	302
4.8. Задачи	307

ГЛАВА 5. КВАНТОВАЯ ФИЗИКА СЛОЖНЫХ СИСТЕМ

5.1. Оператор плотности	313
5.1.1. Чистые и смешанные состояния	313
5.1.2. Диагональные и недиагональные элементы	316
5.1.3. Эволюция	320
5.2. След	322
5.3. Частичный след	325
5.4. Матрица плотности и вектор Блоха	328
5.5. Матрица плотности и магнитный резонанс.....	330
5.5.1. Декогеренция	330
5.5.2. Термализация	331
5.5.3. Релаксация и вектор Блоха	333
5.6. Обобщенные измерения.....	337
5.6.1. Реалистичный детектор.....	337
5.6.2. Положительная операторнозначная мера (POVM)	339
5.7. Квантовая томография	343
5.7.1. Томография квантового состояния.....	343
5.7.2. Томография квантового процесса	345
5.7.3. Томография квантового детектора	351
5.8. Задачи	352

ПРИЛОЖЕНИЕ А. ОСНОВЫ ЛИНЕЙНОЙ АЛГЕБРЫ

A.1. Линейные пространства.....	359
A.2. Базис и размерность	361
A.3. Скалярное произведение	363
A.4. Ортонормальный базис.....	365
A.5. Сопряженное пространство	367
A.6. Линейные операторы	369
A.6.1. Операции с линейными операторами.....	369
A.6.2. Матрицы.....	371
A.6.3. Внешние произведения.....	373
A.7. Сопряженные и самосопряженные операторы.....	376
A.8. Спектральное разложение	379
A.9. Коммутаторы	382
A.10. Унитарные операторы.....	383
A.11. Функции операторов.....	385

ПРИЛОЖЕНИЕ Б. ВЕРОЯТНОСТИ И РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Б.1. Математическое ожидание и дисперсия	389
Б.2. Условные вероятности	390
Б.3. Биномиальное распределение и распределение Пуассона ...	392
Б.4. Плотности вероятности	395

ПРИЛОЖЕНИЕ В. ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ

ОПТИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

В.1. Поляризация света	399
В.2. Поляризующий светоделитель	402
В.3. Волновые пластинки	403

ПРИЛОЖЕНИЕ Г. ДЕЛЬТА-ФУНКЦИЯ ДИРАКА

И ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

Г.1. Дельта-функция Дирака	407
Г.2. Преобразование Фурье	409

ОБ АВТОРЕ	413
------------------------	-----

ПРЕДМЕТНО-ИМЕННОЙ УКАЗАТЕЛЬ	415
--	-----

ПРЕДИСЛОВИЕ

Почему я написал эту книгу?

Впервые строгое определение квантовой механики (КМ) предложили Вернер Гейзенберг и Эрвин Шрёдингер почти век назад. С тех пор эта область науки претерпела громадные изменения. Направленная изначально на объяснение атомных спектров, сегодня квантовая механика является одной из основ почти всех разделов физики. Соответственно, КМ — неотъемлемая часть программы обучения любого студента-физика: какую бы специализацию ни избрали выпускники после окончания вуза, квантовая механика им почти наверняка потребуется в дальнейшей работе.

В то же время методы обучения студентов квантовой механике с годами почти не меняются. Мы начинаем с понятия волновой функции и пишем сначала стационарное, а затем временное уравнение Шрёдингера в координатном представлении. Мы определяем энергетические спектры и соответствующие им волновые функции в простых потенциальных ямах и рассматриваем эволюцию волновых пакетов, связанную с потенциальными барьерами. Наконец, мы вводим оператор момента импульса и вычисляем спектр атома водорода. Последние три четверти века именно так, с небольшими вариациями, выглядела программа первого семестра вузовского курса квантовой механики.

У этой традиции множество положительных сторон. Она работает с физической системой, с которой студент уже разобрался в курсе классической физики и которую ему нетрудно себе представить. Она позволяет увидеть различия между поведением классической и квантовой частицы и привлекает внимание к некоторым фундаментальным явлениям, характерным для квантового мира: туннелированию, квантованию и принципу неопределенности. Она снабжает студента инструментами для решения экспериментально значимых задач, с которыми невозможно справиться классическими методами: рассчитав в аудитории спектр водорода, студент отправляется в лабораторию и измеряет его!

Однако такой подход неидеален. Он дает студенту алгоритм для анализа конкретной физической системы, но не раскрывает внутреннего устройства квантовой физики и ее концептуальной логики.

Мы знакомим студентов с многочисленными фактами и преподаем вычислительные подходы, связанные с волновыми функциями, операторами и измерениями, но не выстраиваем жесткой логической связи между ними и не объясняем, какие из этих фактов являются постулатами, а какие — их следствиями и в какой именно логической последовательности эти следствия выводятся.

В результате студент — по крайней мере *думающий* студент — основательно запутывается. Почему достаточно всего лишь поставить над буквами крышечки, чтобы превратить классическую формулу в квантовую? Почему действие оператора импульса на волновую функцию эквивалентно взятию производной? Почему мы никогда не встречаем собственных состояний импульса (и кошек Шрёдингера) в практической реальности? Почему атомы, которые мы наблюдаем, переходят между энергетическими собственными состояниями, а не какими-нибудь другими? Как проективное измерение связано с измерением наблюдаемого оператора? Почему одни состояния описываются волновыми функциями, а другие — столбцами чисел? Если все состояния имеют норму 1, то как мы нормируем волны де Бройля? Если наблюдаемые представляют собой матрицы, то как выглядит матрица импульса?

На вершине всего этого — самый подлый вопрос. Если рассматривать квантовую физику как более общую теорию, чем физика классическая, то почему нужно обращаться к классическим представлениям, чтобы разобраться в концепции измерения? Почему это самое измерение, в отличие от всех прочих физических процессов, не описывается унитарной эволюцией? Если квантовые системы действительно в какой-то момент измерения становятся классическими, то в какой же именно момент это происходит?

Основополагающий образ мышления, который мы стараемся привить нашим студентам за годы обучения физике, можно сформулировать так: «Подвергай все сомнению!» В курсах квантовой физики наше послание студентам звучит, кажется, с точностью до наоборот: «Заткнись и считай!»¹

Поскольку я тоже когда-то был студентом и изучал квантовую механику, то со временем нашел ответы на эти вопросы, но во многих случаях это произошло через много лет после получения ученой степени. Когда же я пытался задавать подобные вопросы, будучи студен-

¹ Подробнее об этом лозунге, ошибочно приписываемом Фейнману, см. в разд. 2.4.

том, вокруг не было никого, кто мог бы не то что ответить мне на них, но хотя бы помочь правильно сформулировать.

Моя задача при написании этой книги состояла в том, чтобы изменить сложившуюся ситуацию. Я попытался выстроить ясную логическую структуру, в которой осталось бы как можно меньше дыр, которая позволила бы читателю по логической цепочке отследить любое заявление назад, до самых основ... Которая *не оставила бы вопросов без ответов*.

Итак, в определенном смысле я написал эту книгу *для себя*. Но не для сегодняшнего себя, а для того, каким я был в 18 лет. Таковую книгу, которую я счастлив был бы на третьем курсе иметь в своей библиотеке и которая избавила бы меня от многолетних мучительных поисков истины.

Естественно спросить: «Насколько реалистична такая цель? Некоторые из поставленных выше вопросов представляются достаточно сложными. Может быть, без научной степени в них и не разобратся?»

Я дам двойной ответ. Во-первых, с педагогической точки зрения: механика с ее гильбертовым пространством бесконечной размерности едва ли оптимальна для иллюстрации квантовых принципов. Во многих приведенных выше вопросах можно разобраться, если использовать вместо механической более простую физическую систему; чуть позже я расскажу об этом подробнее. Во-вторых, большую часть нестыковок и парадоксов вполне реально устранить, если правильно ввести понятие запутанности. Это понятие лежит в основе двух важных взаимосвязанных концепций: *измерения фон Неймана* и *декогеренции*. Первая из них обеспечивает способ избежать превращения измерения в некое исключительное явление в мире квантовой физики и таким образом устраняет логическую бутылку Клейна, характерную для копенгагенской интерпретации. Вторая описывает происходящие естественным образом «самопроизвольные» измерения, благодаря которым квантовый мир предстает перед макроскопическим и наблюдателями вроде нас в том виде, который мы знаем под именем «классическая физика».

Эти концепции не слишком сложны. Математически они намного проще многих элементов традиционного квантового курса, таких как уже упоминавшийся атом водорода или теория рассеяния. Главная трудность в понимании запутанности — не недостаток у студента необходимых математических навыков; она связана скорее с его вооб-

ражением. Чтобы стать хорошим физиком, необходимо эту способность у себя развить; как говорил Эйнштейн, воображение на самом деле важнее знаний.

Квантовая механика или квантовая оптика?

Название нашей дисциплины — квантовая механика — подразумевает, что мы изучаем применение квантовых принципов к законам движения. На самом же деле рамки квантовой теории не ограничены механикой; она применима во всех областях физики. Если наша цель состоит в том, чтобы изучить общие принципы квантовой физики, то разумно ли выбирать именно механику в качестве физической системы для иллюстрации этих принципов?

Если мы задумаемся над этим вопросом всерьез, то вынуждены будем дать отрицательный ответ. Использование механики — в основном дань традиции, поскольку именно в механике исторически имело место первое успешное применение квантовых принципов в их современной форме. Но если говорить об обучении, то объяснение базовых квантовых принципов на примере механики — весьма неудачный подход. Гильбертово пространство, связанное с этой системой, имеет бесконечную размерность; более того, базис имеет мощность континуума. Студенту приходится иметь дело с незнакомым, чрезвычайно сложным и не всегда строгим математическим аппаратом, включающим в себя обобщенные функции, преобразование Фурье и функциональный анализ. В результате вместо того, чтобы сосредоточить усилия студентов на понимании физических концепций, мы заставляем их сражаться с математикой, а это зачастую ведет к путанице средств и целей. Трудно ожидать от подобного опыта сколько-нибудь глубокого понимания. Студент попросту не увидит за деревьями леса.

Если мы поставим перед собой выбор физической системы для иллюстрирования квантовой физики, нам следует взять ту, у которой гильбертово пространство обладает наименьшей нетривиальной размерностью, а именно — равной двум. Имеется множество таких систем, которые в настоящее время изучаются в контексте квантовых информационных технологий в качестве квантовых бит. Среди подобных систем выделяется одна как наиболее тщательно исследованная и интуитивно понятная: поляризация фотона. Как правило, студент, приступающий к изучению квантовой физики, успел уже освоить

оптическую волновую поляризацию. Векторы поляризации Джонса напрямую транслируются в векторы состояния фотонной поляризации, а матрицы, описывающие трансформацию этих векторов различными волновыми пластинками, превращаются в операторы. Принимая во внимание дискретную природу фотона, несложно обосновать постулат квантового измерения из классической картины измерения поляризации. Таким образом, основные квантовые принципы выводятся из классической поляризационной оптики (и студенческого лабораторного опыта обращения с ней) самым простым и естественным образом.

Фотонная поляризация оказывается полезной и позже, когда мы переходим к изучению запутанности. Огромное количество экспериментов по проверке принципиальных моментов в квантовой информатике было проделано с использованием именно данного объекта в качестве носителя квантового бита. Некоторые из этих экспериментов — в частности, по квантовой криптографии, телепортации и нелокальности — относятся непосредственно к концепциям, описанным в книге. Иллюстрируя теоретический материал данными экспериментов из актуальнейших на сегодняшний день исследовательских тем, эта книга сразу, с самого начала, вводит студентов в самое сердце квантовой физики. А что может придать изучению академической дисциплины больший интерес, чем свежие результаты из исследовательских лабораторий?

Раз уж мы заговорили о лабораториях, замечу, что опыт студентов не должен ограничиваться чтением материалов об экспериментах, проведенных кем-то другим. Огромное преимущество поляризационного кубита как иллюстрирующей системы состоит в том, что он позволяет усилить курс лабораторным компонентом. Почти весь материал главы 1 иллюстрируется классическим экспериментом с поляризацией, для которого требуются лазер, несколько поляризационных пластинок, поляризующий светоделитель и два детектора. Материал по запутанности можно подать наглядно при помощи серии лабораторных работ по удаленному приготовлению состояния, однофотонной интерференции и нелокальности Белла. Организовать такие эксперименты силами среднестатистической кафедры физики сложнее, но вполне по силам, о чем свидетельствует опыт множества колледжей по всему миру, в том числе и моего родного Университета Калгари. Дополнительные подробности на предмет возможных образовательных лабораторных работ можно найти на сайте книги.

Связь между квантовой физикой и квантовой оптикой в этой книге не ограничена использованием фотона для иллюстрации основных концепций соответствующей дисциплины. Она проявляется также в многочисленных примерах из оптики, обильно рассыпанных по всей книге, и в выборе предметов для более углубленного изучения (под-
робное описание гармонического осциллятора, представления Гейзен-
берга, сжатия, матриц плотности, двухуровневых систем, квантовой
томографии). Эти предметы будут особенно полезны тем, кто интере-
суется квантовой информатикой в целом и квантовой оптикой в част-
ности.

Структура курса

Книга содержит материал, который можно преподавать студентам в рамках двухсеместрового курса квантовой механики. В *главе 1* вво-
дятся главные принципы и постулаты КМ, которые иллюстрируются
кубитом поляризации фотона. Читатель, возможно, захочет изучать
эту главу параллельно с приложением А, в котором разобраны основы
линейной алгебры, необходимые в КМ, как показано в таблице ниже.

Понятие линейной алгебры (приложение А)	Квантовое понятие	Физическая иллюстрация
Линейное пространство, базис, размерность, внут- реннее произведение	Квантовое состояние, гильбертово простран- ство	Поляризация фотона (приложение В)
Ортонормальный базис	Проективное измерение, квантовая томография	Поляризационные изме- рения, томография поля- ризационных состояний, квантовая криптография
Линейный оператор, эрмитов оператор	Наблюдаемое, принцип неопределенности	Матрицы Паули как наблюдаемые в про- странстве поляризации
Унитарный оператор, функции операторов	Эволюция Шрёдингера	Эволюция фотона в двулучепреломляющей среде

Глава 2 целиком посвящена запутанности, ее следствиям и при-
ложениям. Сначала я ввожу пространство тензорных произведений

математически, затем рассказываю о частичных квантовых измерениях, удаленном приготовлении состояния и парадоксе нелокальности (в формах Белла и Гринбергера — Хорна — Цайлингера), иллюстрируя теорию экспериментами с запутанными фотонами. Нелокальность, пожалуй, главный парадокс квантовой механики, и после него естественно обсудить механизм квантовых измерений, их естественный аналог (декогеренцию) и интерпретации квантовой механики. В разд. 2.4 мы выясняем, когда и почему квантовая система становится классической в ходе измерения и почему мы не встречаем гуляющих по городу кошек Шрёдингера. После этого я весьма подробно рассматриваю приложения запутанности, такие как квантовые вычисления, телепортация и повторители. При преподавании этого материала имеет смысл предложить двум или трем студентам сделать презентации по свежим исследованиям в данной области.

Главы 3 и 4 представляют собой в некоторой степени реверанс в сторону «общепринятой» вузовской квантовой механики частицы в потенциальном поле. Там нам придется иметь дело с гильбертовым пространством, базисом которого является континуум, поэтому глава 3 сопровождается кратким курсом по дельта-функциям Дирака и преобразованию Фурье (приложение Г). Я надеюсь, что после того, как студенты уже усвоят базовые положения КМ, они смогут воспринимать технические особенности гильбертовых пространств с непрерывными переменными, не теряя из виду физические принципы. Вводя системы с непрерывными переменными я объясню, как и почему при этом изменяются правила нормирования. Затем я приведу обычные примеры потенциальных ям, потенциальных барьеров, туннелирования и гармонического осциллятора. На этом, как мне представляется, должна завершиться программа первого семестра курса.

Далее в главе 3 объясняется представление Гейзенберга и то, как оно согласуется с представлением Шрёдингера; все это иллюстрируется многочисленными примерами, связанными с физикой гармонического осциллятора (и продемонстрированными в квантово-оптических экспериментах): смещением, фазовым сдвигом, а также одно- и двумодовым сжатием. С помощью последнего я показываю первоначальный вариант парадокса Эйнштейна — Подольского — Розена.

В главе 4 я рассматриваю трехмерное геометрическое пространство (как тензорное произведение трех одномерных пространств) и рассказываю про момент импульса, спин и, наконец, атом водо-

рода. Затем обсуждается поведение спина в магнитном поле и магнитный резонанс, а также дается понятие о спиновом эхе и спектроскопии Рамзея.

В главе 5 мы вновь обращаемся к фундаментальным принципам квантовой механики, представив их на этот раз на языке операторов плотности, который имеет важнейшее значение во всех приложениях квантовой физики. Чтобы продемонстрировать полезность этого языка, я даю с его помощью строгое описание декогеренции и релаксации при ядерном магнитном резонансе. Затем я затрагиваю важные для современной квантовой информатики темы: обобщенные измерения, а также томографию квантового состояния, процесса и детектора.

Как пользоваться этой книгой (послание студенту)

Большую часть своей сознательной жизни я был вовлечен в процесс образования — сначала как школьник и студент, а затем как преподаватель и профессор. Этот опыт помог мне понять простую истину: почти невозможно изучить что бы то ни было, пассивно слушая лектора или читая книгу. Обучение требует активного участия студента. В случае теоретической физики это означает, что ты должен выводить формулы сам, а не наблюдать, как это проделывает кто-то другой на доске или в учебнике.

Помня об этом, я попытался написать этот текст, руководствуясь сократовским принципом: ученик приходит к истине, отвечая на вопросы учителя. Я лично познакомился с данным методом в старших классах. Мне повезло учиться в одной из лучших школ России с естественно-научным уклоном, где практиковался уникальный подход к обучению математике. Вместо объяснений нам давали листочки, состоявшие исключительно из определений, аксиом и задач. Справившись с задачами, мы обсуждали наше решение с преподавателем, который должен был убедиться, что мы верно поняли предложенный материал.

Эта книга устроена аналогичным образом. Вы наверняка заметите, что в ней необычно много упражнений. Некоторые из них представляют собой концептуальные теоремы; другие вставлены просто для практики; многие выступают в обеих ролях. Идея в том, что, выполнив их одно за другим, вы сами построите квантовую меха-

нику — с моей минимальной помощью. Соответственно, пропускать упражнения не рекомендуется. Пропуск упражнения равнозначен пропуску страницы-другой в традиционном учебнике: вы не сможете понять последующий материал.

Почти все упражнения имеют решения, которые приведены на сайте книги¹. Однако прошу не заглядывать туда до тех пор, пока вы хотя бы не попытаетесь выполнить упражнение самостоятельно. Даже при условии, что вам не удастся самому получить результат, вы поймете, на каком этапе ваше решение застопорилось, — и тогда готовое решение поможет вам, дав ответ на заранее сформулированный вопрос. Таким образом, семя упадет на уже удобренную почву.

Однако, даже если у вас есть собственное решение, я рекомендую вам все же заглянуть в мое. Таким образом вы получите представление об ошибках, которые вы (или я), возможно, сделали, или, скажем, об альтернативном подходе к решению той же задачи.

Упражнения, которые я считаю более сложными, помечены звездочкой*. Здесь есть тонкость. Дело в том, что многие из них содержат утверждения, важные для изучения последующего материала. Поэтому, хотя допустимо отложить выполнение этих упражнений (или подробный разбор их решений) на потом, вам следует по крайней мере разобраться в утверждениях, которые в них содержатся.

Некоторые из упражнений (они помечены символом параграфа §) даны без решений. Как правило, это происходит в тех случаях, когда я считаю задачу относительно простой; тогда я обычно привожу ответ сразу после упражнения. Очень редко встречаются упражнения, помеченные и звездочкой, и символом параграфа. Такие «упражнения», по сути, представляют собой независимые исследовательские проекты, которыми вам, возможно, захочется заняться в свободное время.

Какими знаниями вам, по моему мнению, следует уже обладать, прежде чем открывать эту книгу?

- Я исхожу из того, что вы знакомы с тригонометрией (знаете, например, как представить $\cos(\alpha + \beta)$ или $\cos \alpha \cos \beta$ в виде суммы).
- Вы умеете работать с комплексными числами, имеете представление о понятиях сопряженности, комплексной фазы и комплексной экспоненты (к примеру, можете упростить $|1 + e^{i\varphi}|^2$).

¹ Во втором томе русского издания. — *Прим. ред.*

- У вас есть общее представление о теории вероятностей. Здесь вам может помочь приложение Б, где содержатся некоторые основы этой области знания.
- То же относится к физике поляризации оптической волны: в приложении В кратко изложена необходимая информация, но его нельзя считать хорошей заменой соответствующего учебника.
- У вас есть навыки дифференциального исчисления и решения обыкновенных дифференциальных уравнений, которые необходимы при изучении всех частей книги, особенно главы 3 (квантовая физика систем с непрерывными переменными); это требование распространяется на анализ функций многих переменных (якобиан и т. п.) для главы 4. По дифференциальному исчислению нет специального приложения, но в приложении Г говорится о дельта-функции Дирака, а также о прямом и обратном преобразованиях Фурье, так что предварительные знания по математической физике не требуются.
- Первостепенное значение в квантовой физике играет линейная алгебра, включающая в себя понятия линейных пространств, базиса, размерности, скалярного произведения, ортонормального базиса, линейных операторов и матриц, спектральную теорему, функции операторов и т. п. Все это изложено в приложении А. Однако базовые методы работы с матрицами, такие как их перемножение, нахождение собственных векторов и собственных значений, не рассматриваются в этом приложении и должны быть знакомы вам до начала изучения данного курса.

ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОЯЗЫЧНОМУ ИЗДАНИЮ

Название этой книги — «Отличная квантовая механика» — отражает не только ее качество и даже не оценку, которую вы, возможно, получите на экзамене, изучив ее. Главное, что книга *отличается* от тех учебников квантовой физики, к которым мы привыкли. Вместо разбора волновых функций и потенциальных ям (с чего стартуют все курсы, начиная от Ландау и Лифшица) в этой книге речь пойдет о концептуально более простых и в то же время более сутевых и интересных вещах: пространстве состояний, сущности измерений, запутанности и нелокальности. Об этом я подробно рассказываю выше в предисловии к англоязычному изданию. Здесь же я хочу поговорить о другом.

«Дай бог побольше разных стран, не потеряв своей, однако». По мерке этих слов Евгения Евтушенко, я счастливый человек. Покинув Родину в двадцать лет, я обрел ее вновь в сорок, когда начал регулярно приезжать в Россию по делам, связанным с созданием Российского квантового центра и последующей научной работой в нем. Это возвращение подарило мне неутасающий душевный подъем, новую ступень для личностного роста и новый плацдарм для научных идей. Помимо этого, я смог увидеть и критически оценить — с высоты собственного преподавательского опыта — разницу в методах обучения физике в России и за рубежом.

У российско-советской школы немало заслуг перед мировой культурой — как в науке и технике, так и «в области балета». Одним из ее важнейших преимуществ является, как мне кажется, глубина рассмотрения материала, желание дойти до самой сути явления. Но у этой медали есть и обратная сторона. Очевидно, что любая учеба — тяжелый, мучительный труд. No pain, no gain. Однако в западной системе образования имеет место сознательное стремление помочь студенту в этом труде, минимизировать его мучения посредством множества примеров и иллюстраций (и порой, к сожалению, излишне поверхностного изложения). Вероятно, это следствие рыночной экономики в сфере образовательных услуг: если студенту станет слишком трудно, он просто купит другой учебник или уйдет в другой университет. В советской же школе подобные стремления со стороны преподавателей почти полностью отсутствуют. Более того, зачастую имеется подспудное убеждение, что чем болезненнее студенту дается гранит науки, тем ему больше пользы, тем лучше он выучится. Это хорошо показано

в фильме «Легенда № 17» на примере хоккея — но и в физике за примером далеко ходить не надо: достаточно открыть того же Ландафшица.

В своей книге я попытался взять лучшее из обеих школ. С одной стороны — постарался дойти до сути, дать ответы на все возможные вопросы, как бы сложны они ни были. С другой — «разжевать» материал, проиллюстрировать его в достаточной степени, сделать как можно меньше количество мест, где можно застопориться. Удалось ли мне это — судить вам.

Я хотел бы поблагодарить творцов русского перевода этой книги. Это в первую очередь директор по развитию Российского квантового центра Анна Шангина и генеральный директор Центра Руслан Юнусов, которые инициировали издание русской версии и его финансирование. Также благодарю руководителя проекта со стороны издательства Анну Тарасову — не только за пот и нервы, с которыми связана подготовка к печати любой книги, но и за внимание к моим авторским прихотям. Огромное спасибо редактору Анастасии Ростockой, проведшей со мной много вечеров на телефоне для совместного оттачивания формулировок. Удивительным образом Анастасия, не будучи профессиональным физиком, сумела найти ряд опечаток, которые я допустил в формулах (!) в английском оригинале. В чтении корректур решений к упражнениям оказали неоценимую помощь мои студенты и аспиранты: Дима Белобородов, Артем Иванов, Арсен Кузамуратов, Катя Сажина, Демид Сычев, Егор Тиунов, Саша Уланов и Митя Чермошенцев.

Несмотря на всю эту помощь, основная ответственность за опечатки и ошибки, которые могли остаться в переводе, лежит на мне. Я старался максимально тщательно вычитать его текст и гранки книги, но почти наверняка что-то упустил. Прошу сообщать мне о замеченных проблемах по электронной почте; адрес легко найти в интернете.

Вы без сомнения заметите, что всем главам предшествуют эпиграфы. Для них я использовал строки песен Михаила Шербакова. С его поэзией я познакомился больше двадцати лет назад и во многом благодаря ему сохранил живую связь с русским языком, которая совсем не помешала мне при подготовке этого текста. Включая эти эпиграфы в книгу, я хочу поделиться с вами своей любовью к творчеству этого автора, которая в моей душе не менее сильна, чем любовь к квантам, пусть и безответна — ибо в квантовую физику я могу внести хотя бы какой-то вклад.

Оксфорд,
27 июня 2019 г.

ПРЕДИСЛОВИЕ РОССИЙСКОГО КВАНТОВОГО ЦЕНТРА

Как много людей сталкивается в своей повседневной жизни со словосочетаниями «квантовая физика» или «квантовая механика». А сколько из них действительно понимают всю глубину, которая скрывается за этими понятиями? Думаю, ответ очевиден: немного (по крайней мере, меньше, чем хотелось бы). Квантовая механика является одной из самых сложных областей физики, которую приходится изучать студентам в технических вузах. В дополнение к далеко не самому простому математическому аппарату сложность этой дисциплины заключается в высокой степени абстракции рассматриваемых в ее рамках явлений. К тому же постулаты квантовой механики зачастую противоречат «здравому смыслу», что также не способствует быстрому освоению предмета. В результате существенная часть материала часто остается непонятой студентами, что значительно уменьшает их желание заниматься квантовой физикой в дальнейшем. В своем учебнике «Отличная квантовая механика» наш коллега и замечательный ученый Александр Львовский сделал вполне успешную попытку исправить сложившуюся ситуацию и, не теряя глубины изложения, объяснил многие сложные вещи простым языком, тем самым делая обучение живее и интереснее. На мой взгляд, Александр проделал титаническую работу по переосмыслению и структурированию одной из самых тяжелых областей физики, и я надеюсь, что эта книга вдохновит еще не одно поколение студентов на изучение столь сложной, многогранной, но при этом невероятно красивой науки — квантовой механики.

*Руслан Юнусов,
генеральный директор
Российского квантового центра*

БЛАГОДАРНОСТИ

Мне потребовалось 13 лет, чтобы написать эту книгу, — я начал ее в январе 2005 г., а закончил в декабре 2017 г. Дату окончания работы над книгой запоминают часто, поскольку это, как правило, срок, заданный издателем (в моем случае срок сдачи переносился много раз на протяжении нескольких лет). Причина того, что я помню также дату начала, вот в чем: она соответствует семестру, когда я приступил к преподаванию вводного курса квантовой механики в Университете Калгари. Я тогда только-только пополнял ряды профессоров университета и, строго говоря, еще не должен был заниматься преподаванием. Однако, когда заведующий кафедрой Барт Хикс однажды подошел ко мне и мило спросил «Алекс, не хотели бы вы начать преподавание чуть раньше? Я слышал, ваши интересы связаны с квантами, а у нас как раз есть место в расписании», я (наивный, романтично настроенный профессор-новичок) ответил «да». Вот тогда и появился первый рукописный конспект.

Но подлинная история плода начинается с корней. А поскольку эта книга во многом посвящена именно корням, имеет смысл следовать данному принципу и в этом разделе. Я могу проследить корни до 1962 г., когда мои родители Исай и Татьяна всего за несколько месяцев до того, как познакомились друг с другом в Москве, посмотрели «Девять дней одного года» — советский фильм о физиках, ставший в то время культовым. (Кстати говоря, вам тоже стоит посмотреть его, если будет возможность. Его несложно найти в онлайн-варианте с английскими субтитрами; он наверняка доставит вам удовольствие. И, между прочим, этот фильм проповедует вполне правильные ценности.) Культовость «Девяти дней...» быстро поблекла, но не для моих родителей. Так что моя будущая профессия была выбрана за 11 лет до моего рождения. Единственное, о чем не могли договориться родители, так это стоит ли мне стать академиком (в Советском Союзе это было аналогично статусу члена Королевского общества) или лауреатом Нобелевской премии. Мой дед примирил их, указав, что одно не мешает другому.

К счастью, мои природные наклонности не противоречили амбициям родителей — если не по величине, то по крайней мере по направлению. (Я иногда спрашиваю себя, кем мог бы стать, если бы был воспитан в другой семье. Мне кажется, либо автомехаником, либо программистом. Так что физик-экспериментатор представляется

неплохим компромиссом.) Поэтому через несколько лет я оказался учащимся знаменитой московской школы № 57 (у школ в Советском Союзе были номера, а не названия) с углубленным преподаванием математики и физики. Именно там я на себе испытал сократовский принцип преподавания, о котором говорил в предисловии и на котором основана моя книга. Метод этот придумал московский учитель Николай Николаевич Константинов, но в нашем классе преподавал — и, соответственно, познакомил меня с данным методом — Борис Михайлович Давидович. Сюжет первых двух разделов приложения А и некоторые упражнения оттуда взяты прямо из моих школьных архивов.

Затем институт. Профессором, который открыл для меня квантовую физику и увлек ею, был Юрий Михайлович Белоусов. Он искусно сочетал строгость «старой школы» Льва Ландау и Евгения Лифшица с ярким, глубоким и страстным стилем преподавания: «Что такое состояние? Неопределяемое понятие! Как в геометрии: вы же не определяете, что такое точка или прямая, правда? Так же и с состоянием. Каково ваше состояние? Вы пьяный? Трезвый? Усталый? Вот вам состояние. Множество состояний называется пространством состояний. Опять же — почему нет? Но затем мы говорим, что это пространство линейно. А вот это уже претензия...»

Тем не менее, как тоже говорилось выше, не все мои вопросы получили ответы (и даже были правильно заданы) в институте, и мне пришлось долго искать их самостоятельно, уже после выпуска. В этом поиске меня поддерживали многие блестящие ученые. Назову лишь некоторых: Ален Аспе, Конрад Банашек, Мауро д'Ариано, Хауке Хансен, Петер Марцлин, Филипп Гранжье, Миклош Гуиласси, Пол Квят, Миша Лукин, Юджин Ползик, Майк Реймер, Барри Сандерс, Кристоф Симон, Эфраим Стейнберг, Иан Уолмсли, Син Вэй и Антон Цайлингер. Два имени я должен упомянуть отдельно: моего институтского научного руководителя Анатолия Викторовича Масалова, который познакомил меня с исследовательской деятельностью, и научного руководителя моей диссертации Свена Хартмана, или мистера Фотонное Эхо. Свен научил меня не только многому из физики, но и искусству писать научные тексты. Если в этой книге есть какой-то стиль, то благодаря ему.

Хотя мне трудно назвать одного-единственного человека, который оказал бы наибольшее влияние на формирование моих представлений о квантовой физике, я могу точно назвать период своей жизни, когда

я достиг наибольшего прогресса. Я тогда работал постдоком в Университете Констанца, в институте, который возглавлял доктор Юрген Млынек. Этот институт в те годы был настоящей Меккой для квантовых физиков, там бывали лучшие умы, занимающиеся этой сферой науки. Иногда мне удавалось урвать несколько минут из их плотного расписания, чтобы обсудить с ними волновавшие меня вопросы, включая фундаментальные для квантовой физики (если только мне удавалось набраться храбрости и преодолеть страх показаться глупым или невежественным).

Теперь я хотел бы вновь вернуться к тому моменту, когда приступил к преподаванию Квантовой Механики I в Калгари и составил свои первые заметки. Впоследствии они переписывались и дополнялись десятки раз. Возможно, поворотным пунктом в превращении заметок в книгу стало добавление в них решений к упражнениям. Первоначально их там не было; я просто излагал решения устно на лекциях (я до сих пор не понимаю, как те студенты умудрялись сдавать экзамены). Но затем у меня состоялось два важных разговора. Во-первых, я поговорил с профессором Массачусетского технологического института Джеффом Шапиро, научившим меня многому в квантовой оптике во время наших (увы, кратких) встреч. Я сообщил Джеффу об идее превратить свои лекционные записи в книгу и о сократовском методе. Джефф серьезно посмотрел на меня и спросил: «Но ведь у задач будут и решения... Правда?» А во-вторых, почти чудесным образом, примерно в то же время, ко мне подошли два моих студента, Джефф Кэмпбелл и Даллас Хоффман. «С решениями ваши заметки станут намного лучше. Мы подумали, может быть, нам стоило бы написать некоторые из них?» И они сделали это — многие решения для упражнений из глав 1, 2 и приложения A принадлежат им, и я очень благодарен этим ребятам.

На самом деле поддержка студентов была чрезвычайно важна на всех этапах создания этого труда. Начиная с 2005 г. я преподавал Квантовую Механику I шесть раз примерно 200 студентам, и многие из них внесли в книгу важный вклад. Вот их имена: Рассел Бейт, Данте Бенчивенга, Трэвис Брэннан, Артур Бери-Джоунз, Авик Чандра, Хосе да Коста, Иш Дханд, Стефан Донса, Марк Жирар, Крис Хили, Катаня Кунтц, Кимберли Оуэн, Адарш Прасад, Мэттью Ричардс, Стивен Роговски, Мэттью Таунли-Смит, Раджу Валивартхи. Помощь студентов состояла не только в построении решений; они постоянно искали ошибки и задавали многочисленные вопросы, которые позволяли мне

увидеть, какие части текста недостаточно понятны и требуют пояснений. Опять же, я не смогу назвать всех, кто мне помогал, поэтому должен попросить прощения у тех, кого не упомянул.

Поскольку вдохновением для создания данного метода обучения во многом послужил мой собственный опыт в старшей школе, я всегда хотел опробовать его в той же обстановке. Мне это удалось в 2013 г., когда я взял академический отпуск в своем университете, чтобы помочь в создании Российского квантового центра в Москве. Я организовал кружок по квантовой физике для московских школьников. Вместе с командой преподавателей-энтузиастов во главе с Алексеем Федоровым мы еженедельно встречались с учащимися, чтобы выслушать, как они решили задачи из конспекта (решений мы им не давали), исправить их ошибки, объяснить тонкости и — что не менее важно — обсудить сам конспект. Отзывы, полученные в ходе этих дискуссий, сыграли важную роль в формировании настоящего текста, а несколько участников кружка, включая Алексея, теперь стали профессиональными учеными, занимающимися исследованиями квантовых технологий на постоянной основе.

Я хотел бы поблагодарить Стефана Лайла за тщательную вычитку книги и множество разумных замечаний.

Но самую свою горячую благодарность я выражаю своей жене Бхавии Равал. Сейчас, когда я пишу эти строки, она в пути — едет забирать нашу дочку Софи от бабушки. Это лишь одна из многих сотен ситуаций, в которых мне следовало бы, по идее, быть с семьей, а не прятаться за монитором, выводя на экране странные закорючки. Но теперь даже бесконечное терпение Бхавии, кажется, истощается. Вчера мы по ее совету посмотрели фильм «Париж подождет», в котором жена одного парня, который слишком много работает, позволяет соблазнить себя его коллеге-французу. Дорогая, намек понят. Париж больше не может ждать. И это последнее предложение, которое я добавляю в книгу!

Калгари, 10 декабря 2017 г.

ГЛАВА 1

КВАНТОВЫЕ ПОСТУЛАТЫ

А дальше — стоп.

А дальше, извини, стена.

1.1. Предмет квантовой механики

Пожалуй, первое, что нужно понять о квантовой механике, — это то, что к механике она имеет такое же отношение, как, скажем, к электродинамике, оптике, физике конденсированного состояния или высоких энергий. Квантовая механика, по существу, не описывает какой-то конкретный класс физических явлений; скорее, она обеспечивает *универсальную теоретическую основу*, которую можно использовать во всех областях физики, — так операционная система компьютера обеспечивает базу, на которой могут исполняться другие приложения. Употребление термина «квантовая механика» сложилось исторически, поскольку впервые квантовую основу удалось успешно применить при исследовании механического движения электронов в атоме. Более удачными терминами были бы «квантовая физика» или «квантовая теория».

Так что предмет квантовой механики (квантовой физики) глобален: она охватывает все физические явления во Вселенной. Однако применять квантовый подход *имеет смысл* только в случае очень маленьких (микроскопических) физических систем. Поведение более крупных систем очень хорошо аппроксимируется законами классической физики, намного более простыми и интуитивно понятными, по крайней мере для существ, эволюция которых проходила именно на этом масштабе величин.

Проиллюстрируем это примером. Вы, вероятно, слышали о принципе неопределенности Гейзенберга: $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$. То есть координату и импульс частицы невозможно измерить точно и одновременно: произведение неопределенностей составляет по крайней мере $\hbar/2 \approx 5 \times 10^{-35}$ кг·м²/с. Чтобы макроскопический объект с массой порядка килограмма достиг предела неопределенности, потребова-

лось бы измерить и координату объекта с точностью порядка $\sim 10^{-17}$ м и скорость с точностью $\sim 10^{-17}$ м/с. Это, разумеется, нереально, так что для всех практических целей мы можем просто забыть о принципе неопределенности и рассматривать координату и импульс как точные величины. Но для электрона массой $\sim 10^{-30}$ кг произведение неопределенностей координаты и скорости составит около 5×10^{-5} м²/с, что вполне укладывается в экспериментально доступную точность измерений и должно приниматься во внимание.

Таким образом, предсказания квантовой теории отличаются от классических только для относительно простых, микроскопических объектов. Это объясняет, почему квантовая механика была открыта лишь в начале XX в. До того времени мы (сами представляющие собой макроскопические тела) имели дело исключительно с макроскопическими предметами. Но стоило нам изобрести инструменты, позволяющие достаточно глубоко проникать в микроскопический мир, как сразу же проявились квантовые явления.

Это пример *принципа соответствия* — философской максимы, согласно которой любая новая, более современная теория должна воспроизводить результаты более старых, устоявшихся теорий в тех областях, где эти теории были проверены. Вот еще один пример для иллюстрации этого принципа. Пока мы имели дело только с объектами, движущимися намного медленнее света, для описания окружающего нас мира достаточно было ньютоновой механики. Но стоило нам получить возможность наблюдать тела, которые движутся быстро (например, Земля вокруг Солнца в эксперименте Майкельсона — Морли), мы начали замечать несоответствия и вынуждены были разработать теорию относительности. Эта теория заметно отличается от ньютоновой механики — но тем не менее согласуется с ней в предельном случае низких скоростей. Было бы неразумно использовать специальную теорию относительности для описания, например, трансмиссии трактора, потому что классическое приближение в данном случае и вполне достаточное, и многократно более простое в применении. Аналогичным образом использование квантовой физики для описания макроскопических явлений в большинстве случаев было бы переусложненным и ненужным.

В классической физике мы имеем дело с *величинами*: скоростью полета камня 10 м/с, силой протекающего по электрическому контуру тока 0,2 А и т.д. Даже если мы не знаем точного значения какой-то физической величины, мы можем работать над улучше-

нием нашей теории и эксперимента, чтобы предсказать и измерить эту величину со все более высокой точностью. Иными словами, *классический мир бесконечно познаваем*. В квантовой физике ситуация иная: некоторые знания (например, одновременные значения координаты и импульса) могут быть «священными»: их в принципе невозможно получить. И эту ситуацию уже нельзя описывать в терминах одних только величин. Вместо этого мы должны использовать концепцию *квантового состояния* физической системы. Как мы увидим, эта концепция содержит в себе границу между знанием, которое можно получить, и знанием, которое получить невозможно. Мы можем узнать точно, в каком состоянии находится система, но каждое состояние связано с фундаментальными ограничениями на точность, с которой физические величины могут быть определены.

Поскольку квантовая механика играет уже упомянутую роль общей основы, мы изучаем ее с известной степенью математической строгости. Я буду вводить определения и аксиомы, потом описывать явления, которые из них проистекают, а затем иллюстрировать эти явления примерами из разных областей физики, преимущественно из оптики.

Основной математический инструмент квантовой механики — линейная алгебра. В приложении А приводятся концепции этой дисциплины, важные для квантовой физики. Так что, если вы знакомы с линейной алгеброй и свободно себя в ней чувствуете, переходите сразу к следующему разделу. В противном случае я рекомендовал бы вам, прежде чем двигаться дальше, изучить первые четыре раздела приложения А.

1.2. Постулат гильбертова пространства

Я сначала сформулирую этот постулат¹, а затем объясню его смысл более подробно.

- а) Возможные состояния физической системы образуют гильбертово пространство над полем комплексных чисел.

¹ Общепринятых постулатов квантовой механики не существует. Если вы скажете «Это следует из второго закона Ньютона», вас поймут, но утверждения «Это следует из первого постулата квантовой механики» никто не поймет. Вместо этого следует сказать, к примеру, «Это следует из линейности квантового гильбертова пространства».

- б) Несовместимые квантовые состояния соответствуют ортогональным векторам.
- с) Все векторы, представляющие физические квантовые состояния, нормированы.

Данный постулат содержит два понятия, которые мы еще не определили: квантовое состояние и физическая система. Понятия эти настолько фундаментальны, что строгое определение им дать трудно¹. Поэтому я проиллюстрирую их интуитивно, на примерах.

Физическая система — это объект или даже одна либо несколько степеней свободы объекта, которые можно изучать независимо от остальных степеней свободы и других объектов. Например, если наш объект — атом, то квантовая механика может изучать его движение как целого (одна физическая система), а может исследовать движение его электронов вокруг ядра (другая физическая система). Но если мы хотим изучать образование из двух атомов молекулы, то нам следует учитывать, что динамические состояния обоих атомов и электронов в них влияют друг на друга, поэтому мы должны рассматривать все эти степени свободы как единую физическую систему. Если же речь идет о самой молекуле, то квантовая механика может изучать движение ее центра масс (одна физическая система), вращательное движение (другая физическая система), колебания ее атомов (третья система) или квантовые состояния ее электронов (четвертая система) и т. д.

Чтобы разобраться в понятии состояния, рассмотрим следующую физическую систему: массивную частицу, которая может двигаться вдоль координатной оси x . С одной стороны, возможно определить ее квантовое состояние, сказав, что «координата частицы — в точности $x = 5$ м». Это допустимое определение; мы будем обозначать такое состояние как $|x = 5 \text{ м}\rangle$. Еще одно допустимое состояние можно обозначить как $|x = 3 \text{ м}\rangle$. Эти состояния ортогональны ($\langle x = 5 \text{ м} | x = 3 \text{ м} \rangle = 0$), потому что «несовместимы»: если достоверно известно, что координата частицы равна 5 м, она не может быть обнаружена в состоянии $x = 3$ м. Еще один пример допустимого квантового состояния, в котором частица может находиться, — это «движется со скоростью $v = 4$ м/с». Поскольку в таком состоянии импульс частицы известен

¹ Как в геометрии, которая представляет собой чрезвычайно строгую науку, несмотря на то что первичные понятия в ней, такие как точка, прямая и плоскость, не определены.

точно, ее координата остается полностью неопределенной — т. е. данная частица может быть с некоторой вероятностью обнаружена в точке $x = 5$ м. Следовательно, скалярное произведение $\langle x = 5 \text{ м} | \psi = 4 \text{ м/с} \rangle$ не равно нулю; эти состояния не являются несовместимыми.

Данный постулат гласит также, что если $|x = 5 \text{ м}\rangle$ и $|x = 3 \text{ м}\rangle$ — допустимые квантовые состояния, то состояние $(|x = 5 \text{ м}\rangle + |x = 3 \text{ м}\rangle) / \sqrt{2}$ (где $1/\sqrt{2}$ — нормирующий множитель, объяснение см. в упр. 1.1) также является допустимым. Называется оно *суперпозицией* состояний. Для большей наглядности скажем, что если $|\text{кошка жива}\rangle$ и $|\text{кошка мертва}\rangle$ — допустимые состояния физической системы «кошка», то допустима и суперпозиция этих состояний¹.

Являются ли суперпозиции состояний математической абстракцией или они каким-то образом отражаются в физическом поведении системы? Верно, конечно же, второе. Как мы вскоре увидим, если подвергнуть, например, кошку в состояниях $(|\text{кошка жива}\rangle + |\text{кошка мертва}\rangle) / \sqrt{2}$, $(|\text{кошка жива}\rangle - |\text{кошка мертва}\rangle) / \sqrt{2}$ и просто случайную смесь состояний $|\text{кошка жива}\rangle$ и $|\text{кошка мертва}\rangle$ *квантовому измерению*, то результаты мы будем наблюдать совершенно разные.

Напрашивается еще один вопрос. Мы не видим состояний суперпозиции в повседневной жизни — хотя они полностью совместимы с канонами квантовой механики. Почему? Как мы узнаем из следующей главы, дело в том, что суперпозиции макроскопически различных состояний чрезвычайно хрупки и быстро переходят в один из своих компонентов — в случае кошки Шрёдингера та быстро становится либо живой, либо мертвой. В микроскопическом мире, однако, состояния суперпозиции относительно устойчивы и нужны для физического описания системы. Необходимость иметь дело с объектами, само существование которых вступает в противоречие с нашим повседневным опытом, — одна из причин того, почему квантовая механика так сложна для понимания.

Упражнение 1.1. Чему равен нормирующий множитель $\mathcal{N}$ состояния кошки Шрёдингера $|\psi\rangle = \mathcal{N}[2|\text{жива}\rangle + i|\text{мертва}\rangle]$, гарантирующий, что $|\psi\rangle$ — физическая система?

¹ Это состояние иногда называют кошкой Шрёдингера в честь одного из отцов-основателей квантовой физики Эрвина Шрёдингера. На самом деле Шрёдингер говорил о более сложном объекте, см. отступление 2.5.

Упражнение 1.2. Какова размерность гильбертова пространства, связанного с одной кинетической степенью свободы массивной частицы?

Подсказка: если вам кажется, что ответ очевиден, загляните в решение.

1.3. Поляризация фотона

Мы начнем изучение квантовой механики с одной из простейших физических систем: поляризации фотона¹. Размерность гильбертова пространства этой системы равна всего лишь двум, но этого вполне достаточно, чтобы показать, насколько поразительным может быть мир квантовой механики.

Предположим, что мы в состоянии выделить единичную частицу света — фотон — из поляризованной волны. Фотон — микроскопический объект, поэтому рассматривать его следует в рамках квантовой механики. Начнем с того, что определим связанное с ним гильбертово пространство. Для начала отметим, что горизонтально поляризованное состояние фотона, которое мы обозначим $|H\rangle$, несовместимо с его вертикально поляризованным состоянием $|V\rangle$: фотон $|H\rangle$ невозможно обнаружить в состоянии $|V\rangle$. То есть если мы приготовим горизонтально поляризованный фотон и прогоним его через поляризующий светоделитель (PBS, *polarizing beam splitter*) — оптический элемент, описанный в разд. В.2, то данный фотон во всех случаях будет проходить насквозь, а отражаться не будет никогда. Это означает, что состояния $|H\rangle$ и $|V\rangle$ ортогональны.

Мы постулируем, что световая волна, электрическое поле которой задано в виде функции координаты и времени [см. (В.2)]

$$\vec{E}(z, t) = \text{Re} \left[\left(A_H e^{i\varphi_H} \hat{i} + A_V e^{i\varphi_V} \hat{j} \right) e^{ikz - i\omega t} \right] \quad (1.1)$$

(с действительными $A_{H,V}$ и $\varphi_{H,V}$), состоит из фотонов в состояниях²

¹ Если вы не знакомы с понятием поляризации электромагнитной волны, то теперь самое время прочесть первые два раздела приложения В.

² Может показаться удивительным, что уравнение (1.2) не несет никакой информации о координате фотона по оси z . Причина в том, что этот фотон, будучи квантовой частицей, размазан в пространстве и времени. К факторам, влияющим на степень размазанности, относятся, в частности, характеристики источника, а также «объем квантования», выбранный для теоретического анализа. В случае лазерного луча длина фотона ограничивается длиной когерентности лазера, которая может составлять не один километр. В данной книге мы, как правило, будем считать, что фотоны размазаны на расстояние, намного превышающее размер любого прибора, и потому могут рассматриваться как бесконечно большие.

Отступление 1.1. Открытие фотона

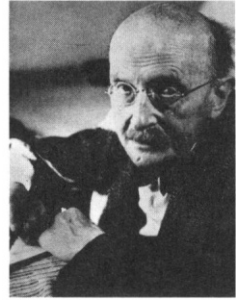
В 1900 г. *Макс Планк* объяснил экспериментально наблюдаемый спектр излучения абсолютно черного тела, введя понятие кванта света, который мы сегодня знаем как фотон*. Он обнаружил, что хорошее совпадение теории и эксперимента можно получить, если считать, что энергия фотона пропорциональна частоте ω световой волны. Коэффициент пропорциональности $\hbar = 1,05457148 \times 10^{-34}$ получил название постоянной Планка.

В 1905 г. *Альберт Эйнштейн* еще раз подтвердил обоснованность формулы Планка

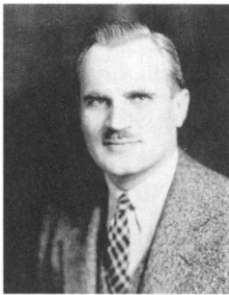
$$E = \hbar\omega,$$

воспользовавшись ей для количественного объяснения экспериментальных результатов по фотоэлектрическому эффекту (более подробно см. отступление 4.6)**. Позже, в 1916 г., Эйнштейн сделал вывод, что, поскольку из классической электродинамики*** известно, что электромагнитный волновой пакет, несущий энергию E , несет также импульс $p = E/c$, это же соотношение должно выполняться и для фотонов. По формуле Планка он нашел[†] $p = \hbar\omega/c$. Выразив частоту волны через ее длину, он получил $\omega = 2\pi c/\lambda$, а затем записал

$$p = 2\pi\hbar/\lambda.$$



Макс Планк



Артур Комптон

Артур Холли Комптон в 1923 г. использовал результаты Эйнштейна для теоретического объяснения собственных экспериментов, в которых он исследовал рассеяние рентгеновских лучей на свободных электронах^{††}. Рассматривая фотоны рентгеновского излучения как частицы высоких энергий, он применил законы сохранения энергии и импульса к столкновению между фотоном и электроном, чтобы рассчитать энергию рассеянных фотонов в зависимости от угла рассеяния. Затем он соотнес эту энергию с длиной волны — и получил теоретическое описание для своих экспериментальных данных. Увиденное им превосходное совпадение тех и других стало служить наглядным доказательством существования фотона.

Интересно отметить, что термина «фотон» в то время не существовало. Его ввел в 1926 г. специалист по физической химии *Гильберт Льюис*^{†††}.

* M. Planck, *Über das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum*, Annalen der Physik **4**, 553 (1901).

** A. Einstein, *Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt*, Annalen der Physik **17**, 132 (1905).

*** Это явление выражается, в частности, в эффекте давления света, который экспериментально наблюдал Петр Лебедев в 1900 г.

[†] Выражение для импульса фотона можно получить также следующим образом. Воспользовавшись знаменитым уравнением Эйнштейна $E = mc^2$ и формулой Планка, мы можем рассчитать массу фотона $M = \hbar\omega/c^2$. Фотон движется со скоростью света, следовательно, его импульс равен $p = Mc = \hbar\omega/c$.

^{††} A. H. Compton, *A Quantum Theory of the Scattering of X-Rays by Light Elements*, Physical Review **21** 483 (1923).

^{†††} G. N. Lewis, *The conservation of photons*, Nature **118**, 874 (1926).

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{A_H^2 + A_V^2}} \left(A_H e^{i\varphi_H} |H\rangle + A_V e^{i\varphi_V} |V\rangle \right) e^{-i\omega t}. \tag{1.2}$$

Например, если $A_H = A_V$ и $\varphi_H = \varphi_V = 0$, то соответствующая классическая волна выглядит как $\vec{E} = \text{Re} \left[A_H (\hat{i} + \hat{j}) e^{ikz - i\omega t} \right]$, т.е. линейно поляризована под углом $+45^\circ$. Соответственно, состояние $(|H\rangle + |V\rangle)/\sqrt{2}$ (где делитель $\sqrt{2}$ связан с нормированием) обозначает единичный фотон с линейной поляризацией под $+45^\circ$. В табл. 1.1 вы можете увидеть еще несколько примеров¹.

Из этого следует, что состояния $|H\rangle$ и $|V\rangle$ образуют в гильбертовом пространстве поляризационных состояний фотона ортонормальный базис — т.е. пространство двумерно. Действительно, прежде всего эти состояния ортогональны и потому линейно независимы (упр. А.17). Кроме того, любая поляризованная классическая волна может быть записана в виде (1.1), так что любое поляризационное состояние фотона тоже может быть записано аналогично (1.2), т.е. как линейная комбинация состояний $|H\rangle$ и $|V\rangle$. Мы будем называть базис $\{|H\rangle, |V\rangle\}$ *каноническим базисом* нашего гильбертова пространства.

Таблица 1.1. Важные поляризационные состояния

Состояние	Матрица	Описание	Обозначение
$ H\rangle$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	Горизонтальное	$ H\rangle$
$ V\rangle$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	Вертикальное	$ V\rangle$
$\cos\theta H\rangle + \sin\theta V\rangle$	$\begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix}$	Линейная поляризация под углом θ к горизонтали	$ \theta\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(H\rangle + V\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	Диагональная поляризация под $+45^\circ$	$ +45^\circ\rangle$ или $ +\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(H\rangle - V\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$	(Анти-) диагональная поляризация под -45°	$ -45^\circ\rangle$ или $ -\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(H\rangle + i V\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$	Правая круговая поляризация	$ R\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(H\rangle - i V\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$	Левая круговая поляризация	$ L\rangle$

¹ Обсуждение договоренностей, принятых для состояний с круговой (циркулярной), поляризацией, см. в сноске 1 на с. 402

Упражнение 1.3. Покажите, что:

- а) поляризационные состояния $\pm 45^\circ$ образуют ортонормальный базис;
- б) правое и левое круговые поляризационные состояния образуют ортонормальный базис.

Упражнение 1.4. Разложите $|H\rangle$ и $|V\rangle$ по базисам $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ и $\{|R\rangle, |L\rangle\}$.

Упражнение 1.5. Разложите $|a\rangle = | +30^\circ \rangle$ и $|b\rangle = | -30^\circ \rangle$ по базисам $\{|H\rangle, |V\rangle\}$, $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ и $\{|R\rangle, |L\rangle\}$. Найдите скалярное произведение $\langle \alpha | \beta \rangle$ во всех трех базисах, используя операцию перемножения матриц. Одинаковые ли получились результаты?

Здесь есть сложный момент, который следует прояснить. Множество углов поляризации линейно поляризованных фотонов — континуум. Но в случае одномерного движения частицы, о котором говорилось в предыдущем разделе, множество позиционных состояний — также континуум. Почему же мы говорим, что одно из этих гильбертовых пространств имеет размерность два, а другое — бесконечность?

Разница в том, что линейно поляризованные состояния могут быть записаны в виде (1.2), т. е. в виде суперпозиции других линейно поляризованных состояний. Если мы поместим поляризующий светоделитель (разд. В.2), пропускающий только горизонтально поляризованные фотоны, на пути диагонально поляризованной волны, часть ее пройдет сквозь светоделитель. Это означает, что диагонально поляризованный фотон может быть обнаружен в горизонтальном поляризационном состоянии.

Состояния же, связанные с разными положениями в пространстве, напротив, все ортогональны: частицу, приготовленную в состоянии $|x = 3 \text{ м} \rangle$, невозможно обнаружить в точке $x = 4 \text{ м}$. Также невозможно записать позиционное состояние в виде суперпозиции других позиционных состояний. Это значит, что соответствующее гильбертово пространство должно иметь намного более широкий базис, чем гильбертово пространство поляризационных состояний.

Для классической волны (1.1) сдвиг фаз одновременно горизонтального и вертикального компонентов на равную величину (т. е. $\varphi_H \rightarrow \varphi_H + \varphi_0$, $\varphi_V \rightarrow \varphi_V + \varphi_0$, что эквивалентно умножению правой части на $e^{i\varphi_0}$) не меняет ее поляризации.

Аналогичное правило применимо и к квантовым состояниям. Умножение вектора состояния на $e^{i\varphi}$ не меняет физической природы состояния. К примеру, $|V\rangle$, $i|V\rangle$ и $-|V\rangle$ представляют один и тот же физический объект, как и, скажем, $|R\rangle = (|H\rangle + i|V\rangle)/\sqrt{2}$ и $e^{-i\pi/2}|R\rangle = (|V\rangle - i|H\rangle)/\sqrt{2}$. По этой причине мы на время пренебрежем множителем $e^{-i\omega t}$ в (1.2).

Мы называем комплексную величину $e^{i\varphi}$ с действительным φ *фазовым множителем*. Умножение квантового состояния на фазовый множитель называется *применением фазового сдвига* на φ . Соответственно мы говорим, что применение фазового сдвига к квантовому состоянию не меняет его физических свойств. Как мы увидим в следующем разделе, это правило оказывается весьма общим: оно выполняется для всех физических систем, не только для электромагнитных волн. Разумеется, фазовый сдвиг должен быть *глобальной* природы (overall phase shift): если мы применим его только к части состояния, это состояние изменится. Например, если мы применим фазовый сдвиг на $\pi/2$ к вертикальному компоненту поляризованного под $+45^\circ$ фотона, $|+\rangle = (|H\rangle + |V\rangle)/\sqrt{2}$, то получим $(|H\rangle + i|V\rangle)/\sqrt{2} = |R\rangle$ — фотон с правой круговой поляризацией, т. е. физически отличный от первоначального объекта.

Поляризация фотона — это реализация *квантового бита (кубита)*. Данный термин используется для обозначения любой физической системы, гильбертово пространство которой двумерно, в контексте рассмотрения этой системы как носителя информации. Кубит — базовая единица квантовой информации, по аналогии с битом — единицей информации в классических компьютерах. В противоположность последнему квантовый бит может находиться не только в одном из двух базовых состояний, но и в их суперпозиции. Это открывает для нас множество новых технологических возможностей, которые мы будем обсуждать на протяжении всей книги.

1.4. Квантовые измерения

1.4.1. Постулат об измерениях

Второй постулат относится к *квантовым измерениям*, т. е. к экспериментам, цель которых — получить информацию о квантовом состоянии некоторой системы. В классической, макроскопической физике

измерения больше вопрос технологии, чем фундаментальной науки. Дело в том, что там мы можем точно измерить состояние и эволюцию системы, не потревожив ее. Так, футбольный мяч не полетит разными способами в зависимости от того, пуст стадион или заполнен до отказа восторженными болельщиками, — следовательно, нам не нужно знать, каким методом фиксируют траекторию мяча, чтобы изучить законы его движения.

В квантовом мире ситуация выглядит иначе: мы велики, а те объекты, которые мы хотим измерить, малы. Поэтому любое измерение, скорее всего, изменит квантовое состояние нашей системы. В более общем плане можно сказать, что квантовые измерения — это события, при которых состояние микроскопического квантового объекта влияет на состояние макроскопического прибора. Таким образом, измерение пересекает границу между квантовым и классическим царствами физики. А как мы знаем, законы, управляющие ими, сильно различаются между собой. Чтобы получить цельную картину мира, нам необходимо понять, когда и как происходит переход между этими двумя «юрисдикциями».

Далее, явления, при которых квантовое состояние чего-то микроскопического влияет на что-то макроскопическое, не ограничены стенами лабораторий. К ним относятся самые разные события — от термодинамических фазовых переходов и лазерной генерации до ураганов, рождения черных дыр и, возможно, рождения самой Вселенной. Физика подобных явлений аналогична физике квантовых измерений. Из этого следует, что разобраться в этой физике необходимо для понимания природы окружающего нас мира.

Основные принципы постулата об измерениях можно вывести интуитивно. Предположим, что фотон в состоянии (1.2) попадает в поляризующий светоделитель (PBS) — оптический элемент, который пропускает горизонтально поляризованный свет, но отражает вертикально поляризованный (рис. 1.2 а). Что произойдет с этим фотоном? Если бы мы имели дело с классической волной (1.1), то сказали бы, что она разделится: часть ее пройдет сквозь PBS, а остальное отразится. Доли энергии, попадающие в прямой и отраженный каналы, были бы пропорциональны A_H^2 и A_V^2 соответственно. Но фотон — это наименьшая порция энергии света, и его невозможно поделить на части.

Мы подошли к очевидному противоречию. Мы знаем, с одной стороны, что классическая волна, состоящая из фотонов, делится

на части. С другой — что каждый отдельный фотон неделим. Как могут два этих требования выполняться одновременно?

Представляется, что единственный способ разрешить данный парадокс состоит в том, чтобы постулировать, что результат в таком случае будет *случайным*: фотон пройдет через PBS с вероятностью $\text{pr}_H = A_H^2 / (A_H^2 + A_V^2) = |\langle H | \psi \rangle|^2$ и отразится с вероятностью $\text{pr}_V = A_V^2 / (A_H^2 + A_V^2) = |\langle V | \psi \rangle|^2$. Таким образом, если на PBS попадет большое число N фотонов, то численное соотношение пропущенной и отраженной энергий составит A_H^2 / A_V^2 , как и ожидалось в классическом случае (см. разд. В.2). И при этом ни один индивидуальный фотон не придется делить на части.

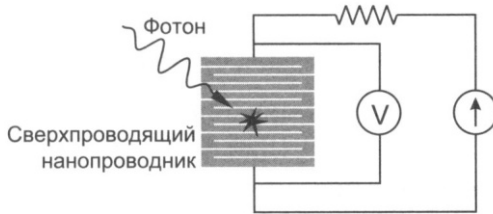
Как мы знаем, часть классической волны, проходящая через PBS, является горизонтально поляризованной, т. е. все фотоны, из которых состоит эта волна, находятся в состоянии $|H\rangle$. Аналогично все фотоны отраженной волны находятся в состоянии $|V\rangle$. Но тогда это же должно быть верно и в случае, когда фотоны попадают в PBS по одному. Фотон будет не только случайным образом выбирать свой путь, но также и, вполне в духе Оруэлла, *изменять свое состояние*, чтобы соответствовать выбранному пути. После PBS состояние фотона в прямом канале станет $|H\rangle$, а в отраженном — $|V\rangle$. Если мы поместим серию дополнительных PBS на пути фотона, прошедшего через первый светоделитель, то фотон пройдет также и через все эти PBS — никаких случайностей больше не будет.

Процесс, который я только что описал, представляет собой *измерение состояния поляризации* фотона. Чтобы его завершить, поместим по детектору одиночных фотонов (отступление 1.2) в оба выходящих канала PBS. Из этих двух детекторов один сработает («щелкнет» на квантовом жаргоне), снабдив нас информацией о характере поляризации фотона (рис. 1.2 а).

Описанный измерительный прибор предназначен для того, чтобы различать горизонтальную и вертикальную поляризации. Существуют и другие схемы. Например, наклонив PBS на 45° , мы заставим его пропускать состояние $|+\rangle$ и отражать $|-\rangle$, так что, если мы направим на такой PBS фотон в произвольном состоянии $|\psi\rangle$, он пройдет или отразится с вероятностями $\text{pr}_+ = |\langle + | \psi \rangle|^2$ и $\text{pr}_- = |\langle - | \psi \rangle|^2$ соответственно. Вообще, мы можем сконструировать измерительный прибор, различающий любые два состояния поляризации, при условии что эти состояния ортогональны друг другу.

Теперь мы готовы сформулировать наш постулат.

Отступление 1.2. Как обнаружить фотон?



Детектор фотонов представляет собой устройство, которое преобразует фотон в «щелчок» (click) — макроскопический импульс электрического тока или напряжения. Изготовить столь чувствительное устройство — непростая техническая задача. На рисунке схематично изображен один из современных способов выполнения этой задачи: сверхпроводящий детектор единичных фотонов.

Чувствительным элементом детектора является охлажденный до сверхпроводящего состояния нанопроводник, по которому течет небольшой постоянный ток. Нанопроводник настолько тонок, что при поглощении даже одного фотона он нагревается достаточно, чтобы стать резистивным на части длины. Ток, в соответствии с законом Джоуля — Ленца, начинает нагревать этот участок проводника, еще сильнее разрушая сверхпроводимость вокруг него. Развивается лавинообразный процесс, так что весь нанопроводник на какое-то время становится резистивным. Это сопротивление и дает на концах нанопроводника импульс напряжения, который несложно зарегистрировать.

У такого детектора есть несколько недостатков, типичных для реальных фотонных устройств. Во-первых, это *недискриминирующий* детектор: на пучок из множества фотонов он реагирует точно таким же импульсом, что и на одиночный фотон. Происходит это потому, что нанопроводник, сколько бы фотонов он ни поглотил, целиком теряет сверхпроводимость и приобретает одинаковое сопротивление (замечу, что в последнее время научились делать и дискриминирующие детекторы, использующие эту технологию). Во-вторых, фотон, попадающий на детектор, может отразиться — и тогда никакого щелчка не будет. Вероятность того, что на прилет одиночного фотона детектор отреагирует щелчком, известна как *квантовая эффективность* (quantum efficiency) детектора. В некоторых современных модификациях этот параметр превосходит 99%. И в-третьих, детектор может выдать щелчок даже в отсутствие фотона. Частота таких *темновых событий* (dark counts) — еще одна важная техническая характеристика прибора.

Постулат об измерениях. Всякий идеальный измерительный прибор связан с некоторым ортонормальным базисом $\{|v_i\rangle\}$. После измерения прибор случайным образом, с вероятностью

$$p_i = \left| \langle v_i | \psi \rangle \right|^2, \quad (1.3)$$

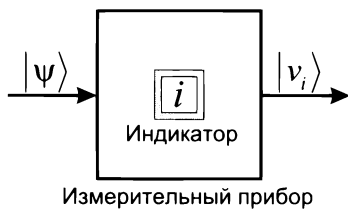


Рис. 1.1. Квантовое измерение глазами теоретика

где $|\psi\rangle$ — начальное состояние системы, укажет на одно из состояний $|v_i\rangle$. Система при этом, если не разрушится, перейдет в состояние $|v_i\rangle$ (*спроецируется* на него) (рис. 1.1).

Квантовое измерение, протекающее в соответствии с приведенным выше постулатом, называется *проективным измерением*. Проекция измеренного состояния на один из элементов базиса именуется также *коллапсом* квантового состояния. Уравнение (1.3) — это *правило Борна*.

Вероятностное поведение квантовых объектов вызывало множество споров в те времена, когда квантовая механика только зарождалась. Дело в том, что к концу XIX в. общепринятым считался принцип *детерминизма*: физики уверенно полагали, что, если бы начальные условия заданной квантовой системы были известны с достаточной точностью, ее развитие можно было бы предсказать сколь угодно хорошо. Квантовая физика разрушила данное фундаментальное убеждение, и многим физикам оказалось чрезвычайно трудно это принять. Например, Альберт Эйнштейн сделал по данному поводу свое знаменитое заявление, что «Бог не играет в кости», и предложил блестящий *Gedankenexperiment*¹, показывающий, что постулаты квантовой механики противоречат здравому смыслу. Мы разберем этот мысленный эксперимент в следующей главе и увидим, как квантовую случайность можно объяснить тем, что сами наблюдатели тоже являются квантовыми объектами, но не могут экспериментально убедиться в своей квантовой природе. Давайте, однако, пока примем квантовую случайность как постулат, который подтверждается большим объемом экспериментальных данных.

Упражнение 1.6. Покажите математически, что для состояния $|\psi\rangle$ сумма вероятностей регистрации (1.3) для всех элементов базиса составляет $\langle\psi|\psi\rangle$, т. е. равна единице, если состояние физическое.

¹ «Мысленный эксперимент» (нем.).

Упражнение 1.7. Покажите, что применение общего фазового множителя к квантовому состоянию не меняет вероятностей результатов его измерения — в согласии с тем фактом, что фаза никак не влияет на физику состояния, о чем говорилось в предыдущем разделе.

1.4.2. Измерения поляризации

Выше мы говорили о возможности повернуть PBS и изменить в результате этого прибор на рис. 1.2 *a* так, что он будет измерять поляризацию в неканоническом, линейно поляризованном базисе. Однако фотон, отраженный PBS, не станет распространяться в горизонтальном направлении, а это неудобно при проведении практического лабораторного эксперимента (отступление 1.3). Поэтому большинство экспериментаторов пользуется оптическим элементом, известным как волновая пластинка¹, который переводит поляризованные состояния фотона одно в другое. Вот несколько примеров.

Упражнение 1.8. Покажите, что:

- а) устройство на рис. 1.2 *b* выполняет измерение поляризации фотона в диагональном ($|\pm 45^\circ\rangle$) базисе;
- б) устройство на рис. 1.2 *c* выполняет это же измерение в круговом ($\{|R\rangle, |L\rangle\}$) базисе.

Подсказка: когда устройство, описанное в постулате об измерениях, измеряет одно из своих собственных базисных состояний $|v_i\rangle$, то результат измерения укажет на это состояние с вероятностью 1. Верно и обратное: если это устройство способно строго различить некий конкретный ортонормальный набор состояний, то мы можем сделать вывод, что этот набор является измерительным базисом данного устройства. Следовательно, чтобы выполнить это упражнение, достаточно показать, что базисные состояния [т.е. $|\pm 45^\circ\rangle$ в варианте а) и $|R\rangle, |L\rangle$ в варианте б)] после PBS дадут щелчки на разных фотонных детекторах.

¹ Сейчас подходящий момент, чтобы прочитать в приложении разд. В.3.

Отступление 1.3. Оптический стол



На этой фотографии вы видите типичный квантово-оптический эксперимент. Он выполняется на *оптическом столе* — массивной металлической плите, на которую устанавливаются различные оптические элементы, такие как линзы, зеркала, лазеры, кристаллы и детекторы. Лучи, как правило, проходят горизонтально, на одном уровне по всей длине стола.

Упражнение 1.9.[§] Каждое из состояний $|H\rangle$, $|V\rangle$, $|+\rangle$, $|-\rangle$, $|R\rangle$, $|L\rangle$ измеряется в

- а) каноническом,
- б) диагональном,
- с) круговом базисах.

Найдите вероятности возможных результатов для каждого случая.

Ответ: для каждого состояния, когда измерение производится в базисе, к которому принадлежит это состояние, вероятности составляют 0 и 1. Если же состояние не принадлежит к измерительному базису, то вероятность обоих результатов равняется $\frac{1}{2}$.

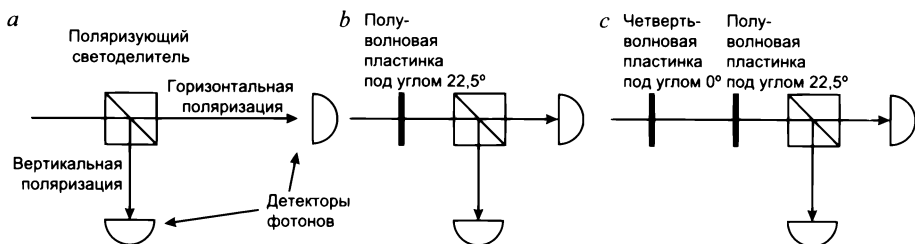


Рис. 1.2. Измерение поляризации фотона в каноническом $\{|H\rangle, |V\rangle\}$ (а), диагональном $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ (б) и круговом $\{|R\rangle, |L\rangle\}$ (с) базисах

Упражнение 1.10. Предложите схему для квантового измерения в базисе $\{|\theta\rangle, |\frac{\pi}{2} + \theta\rangle\}$.

Упражнение 1.11. Предложите схему для квантового измерения в базисе $\{|R\rangle, |L\rangle\}$, в которой использовалась бы только одна волновая пластинка.

Упражнение 1.12. Рассмотрим фотон, который находится в состоянии не суперпозиции, а случайной *статистической смеси*, или ансамбля¹ (statistical mixture/ensemble): либо $|H\rangle$ с вероятностью $1/2$, либо $|V\rangle$ с вероятностью $1/2$. Поляризация этого фотона измеряется в:

- а) каноническом,
- б) диагональном,
- с) круговом базисах.

Найдите вероятности возможных результатов для каждого случая.

Упражнение 1.13. Фотон приготовлен с линейной поляризацией 30° к горизонтали. Найдите вероятность каждого результата, если его поляризация измеряется в:

- а) каноническом,
- б) диагональном и
- с) круговом базисах.

Упражнение 1.14. Фотон в состоянии $|\psi\rangle = (|H\rangle + e^{i\varphi}|V\rangle)/\sqrt{2}$ измеряется в диагональном базисе. Найдите вероятность каждого результата как функцию от φ .

Это упражнение, так же как и упр. 1.7, еще раз демонстрирует важную разницу между фазовым множителем, примененным к части квантового состояния или к квантовому состоянию целиком. В первом случае добавочная фаза влияет на измеряемые свойства объекта, во втором — нет.

Хотя одиночное измерение дает нам некоторую информацию о начальном состоянии квантовой системы, информация эта очень ограничена. Предположим, например, что мы измерили фотон в каноническом базисе и обнаружили, что он прошел через PBS. Можем ли мы из этого сделать вывод, что первоначальный фотон находился в состоянии $|H\rangle$?

¹ Такие смешанные состояния не являются элементами квантового гильбертова пространства. Подробнее об этом см. подразд. 2.2.4.

Нет, не можем. Он мог находиться в любом состоянии $\psi_H |H\rangle + \psi_V |V\rangle$; коль скоро $\psi_H \neq 0$, существует некоторая вероятность получения щелчка в пропускающем канале. Поэтому единственное, что мы узнаем из данного измерения, — это то, что фотон не был вертикально поляризован.

Теперь предположим, что мы провели одно и то же измерение неоднократно, каждый раз приготавливая наш фотон в одинаковом состоянии¹. Теперь мы знаем намного больше! Мы знаем, сколько щелчков получено нами от «горизонтального» детектора, а сколько — от «вертикального», т.е. у нас появилась *статистика измерений*. По этим данным мы можем рассчитать, с некоторой ошибкой, $pr_H = |\psi_H|^2$ и $pr_V = |\psi_V|^2$, т.е. узнать кое-что об абсолютных величинах компонентов состояния. Но и ψ_H , и ψ_V — комплексные числа, и их аргументы (углы на комплексной плоскости) по-прежнему неизвестны. К примеру, если мы наблюдаем $pr_H = pr_V = 1/2$, то состояние $|\psi\rangle$ может быть или $|R\rangle$, или $|L\rangle$, или $|+\rangle$, или $|-\rangle$, или еще каким-нибудь из множества вариантов. Что нам с этим делать?

Как видно из следующего упражнения, надлежит провести дополнительные серии измерений в других базисах. Полученная статистика даст новые уравнения, которые можно решить и найти ψ_H и ψ_V с точностью до неопределенности, связанной с общим фазовым множителем.

Упражнение 1.15. Предположим, что множественные измерения поляризации фотонов, идентично приготовленных в состоянии $|\psi\rangle$, проводятся в каноническом, диагональном и круговом базисах и при этом определяются все шесть соответствующих вероятностей ($pr_H, pr_V, pr_+, pr_-, pr_R, pr_L$). Покажите, что этой информации достаточно, чтобы полностью определить $|\psi\rangle$ и выразить его разложение в каноническом базисе через pr_H, pr_+ и pr_R . Приведите пример, показывающий, что измерений только в каноническом и диагональном базисах для этого было бы недостаточно, — т.е. найдите два различных состояния, которые дадут одинаковые pr_H и pr_+ .

Метод получения полной информации о квантовом состоянии путем проведения серий измерений в нескольких разных базисах на множестве идентичных копий измеряемого состояния называется *томографией квантового состояния* (quantum state tomography).

¹ Хотя мы не знаем, каково это состояние, мы можем многократно приготавливать фотон в одном и том же состоянии путем сохранения постоянных условий эксперимента.

Его можно обобщить на другие квантовые системы, включая системы более высокой размерности. Мы подробнее поговорим о квантовой томографии в конце основного текста (разд. 5.7).

Упражнение 1.16. Предположим, вам дан *единственный* экземпляр квантовой системы, находящейся в одном из двух неортогональных состояний $|a\rangle$ и $|b\rangle$. Вам известно, что это за состояния, но вы не знаете, в каком именно из них находится система.

- а) Покажите, что невозможно построить устройство, которое всегда достоверно определяло бы состояние системы.
- б) * Покажите, что можно сконструировать измерительное устройство, которое будет выдавать, с некоторой вероятностью, результаты трех типов: «определенно $|a\rangle$ », «определенно $|b\rangle$ » и «не уверен», причем результаты первых двух типов всегда будут верными.

Подсказка: попробуйте использовать неполяризирующий светоделитель — оптический элемент, который случайным образом либо пропускает, либо отражает фотон вне зависимости от его поляризации.

1.5. Квантовая интерференция и дополнительность

Рассмотрим эксперимент, показанный на рис. 1.3. Единичный фотон, находившийся первоначально в диагонально поляризованном состоянии $|+\rangle = (|H\rangle + |V\rangle)/\sqrt{2}$, попадает в устройство, известное как *интерферометр*¹. Сначала PBS пропускает горизонтальный компонент состояния и отражает вертикальный. Затем отраженный компонент проходит через варьруемую линию задержки², и оба компонента вновь соединяются при помощи еще одного PBS. После этого состояние на выходе интерферометра подвергается измерению в диагональном базисе.

Линия задержки вводит разницу между оптической длиной пути вертикального и горизонтального компонентов. Если длина этой линии равна l , то вертикальный компонент получит сдвиг фазы на $\phi = kl$ по отношению к горизонтальному, где $k = 2\pi/\lambda$ есть волновое число. В результате фотон, выходя из интерферометра, будет в состоянии

$$|\psi\rangle = (|H\rangle + e^{i\phi}|V\rangle)/\sqrt{2}.$$

¹ Конкретнее, интерферометр Маха — Цендера.

² Считаем, что линия задержки много короче, чем длина светового импульса, так что изменение задержки не влияет на видность интерференции.

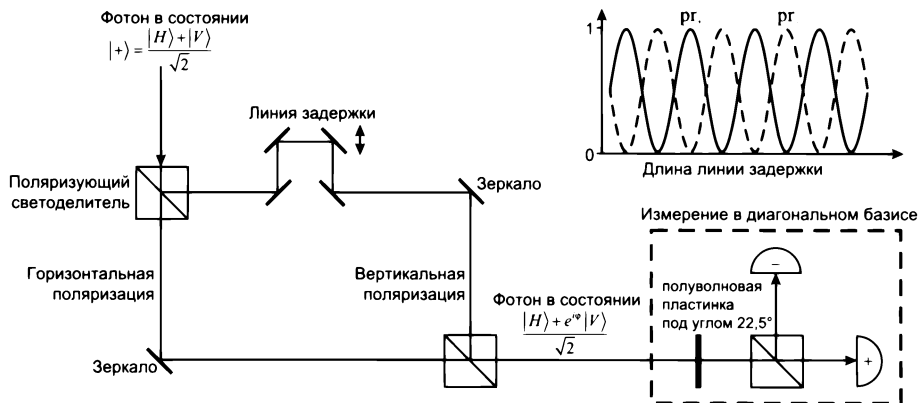


Рис. 1.3. Эксперимент по однофотонной интерференции. Вставка: зависимости срабатывания двух детекторов от разности длин путей в интерферометре.

Мы изучили измерение этого состояния в упр. 1.14 и выяснили, что вероятности срабатывания детекторов «+» и «-» составляют $pg_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \cos \varphi)$ соответственно. При изменении длины линии задержки вероятности меняются синусоидально. Иными словами, мы увидим *интерференционные полосы* — такие же, какие в таком оптическом устройстве образовала бы макроскопическая волна.

Что в этом выводе поистине замечательно (и, разумеется, целиком и полностью подтверждено экспериментально), так это то, что интерференционные полосы порождает один-единственный фотон. Это решительно противоречит нашим интуитивным представлениям. Действительно, в классическом эксперименте интерференция возникает потому, что две волны, проходящие по двум путям интерферометра, получают разные фазы и затем складываются когерентно на фотодетекторах. Но в нашем эксперименте присутствует всего один фотон! Фотон — неделимая элементарная частица света, поэтому он не может расщепиться¹ в интерферометре и породить две волны, необходимые для образования интерференционных полос. Он должен дви-

¹ Позже мы увидим, что на самом деле фотон может расщепиться на два фотона с меньшей энергией при нелинейном оптическом явлении, известном как параметрическое рассеяние. Однако этот довольно экзотический эффект возникает с низкой вероятностью и только в особых условиях. Наш интерферометр не содержит нелинейных оптических элементов, так что параметрическое рассеяние здесь ни при чем.

гаться в одиночестве *либо* по верхнему, *либо* по нижнему пути интерферометра — но не по двум путям одновременно.

Эти разумные и интуитивно понятные доводы противоречат и нашим расчетам, и экспериментальным наблюдениям. Как можно это объяснить?

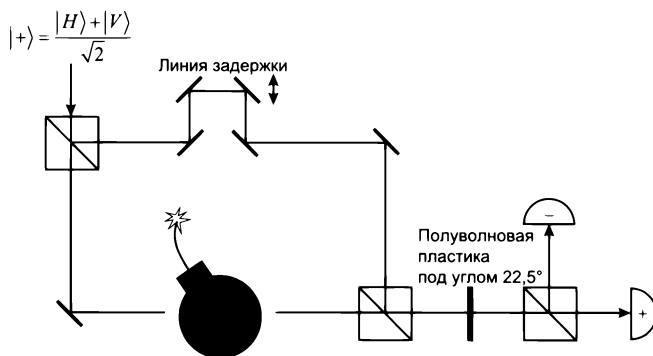
Фотон, попадающий в интерферометр, находится в суперпозиции состояний вертикальной и горизонтальной поляризации. После первого PBS он по-прежнему находится в состоянии суперпозиции — но теперь это также суперпозиция верхнего и нижнего путей интерферометра. После воссоединения путей она вновь превращается в суперпозицию состояний поляризации — но уже с фазовым сдвигом у одного из ее компонентов. Именно эти два компонента суперпозиции играют здесь роль двух волн из классического эксперимента и интерферируют друг с другом. Так проявляется *корпускулярно-волновой дуализм* (wave-particle duality) квантовых частиц¹.

Получается, что в определенном смысле фотон все-таки расщепляется между двумя каналами интерферометра. Однако такое волноподобное поведение возможно только в том случае, если компоненты остаются в состоянии суперпозиции. Чтобы это проиллюстрировать, предположим, что в обоих каналах интерферометра мы размещаем детекторы, способные регистрировать фотоны, не разрушая их. Всякий раз, когда какой-нибудь фотон попадает в интерферометр, один из этих детекторов срабатывает и показывает нам, по верхнему или по нижнему пути прошел фотон. Таким способом, как сказали бы отцы-основатели квантовой механики, мы получаем о фотоне информацию *Welcher Weg*².

Получение информации *Welcher Weg* означает *измерение* положения фотона. В предыдущем разделе мы узнали, что такое измерение схлопывает состояние суперпозиции и превращает его, в зависимости от результата, либо в фотон, находящийся на верхнем, либо в фотон, находящийся на нижнем пути интерферометра. Глядя на детектор *Welcher Weg*, наблюдатель может точно сказать, в каком состоянии — горизонтальном или вертикальном — фотон выйдет из интерферометра. Так или иначе, последующее измерение этого фотона в диа-

¹ Именно поэтому, вероятно, популярные книги по квантовой механике любят описывать состояния суперпозиции как состояния, в которых «объект находится в двух разных местах в одно и то же время».

² «Который путь» (нем.).

Отступление 1.4. Квантовая инспекция военной техники

Вот любопытный парадокс, связанный с экспериментом по однофотонной интерференции, обсуждающийся в разд. 1.5*. Пусть имеется бомба, оборудованная датчиком фотонов и настроенная так, что взорвется, даже если датчик провзаимодействует с одним-единственным фотоном. Можем ли мы обнаружить присутствие бомбы в одном из каналов нашего интерферометра, не подорвав ее при этом?

Установим линию задержки в нашем однофотонном интерферометре (рис. 1.3) так, чтобы иметь $\varphi = 0$. Тогда если бомбы *нет*, то каждый попадающий в интерферометр фотон будет выходить из него поляризованным под углом $+45^\circ$ и вызывать срабатывание детектора «+». Детектор «-» в таком случае не будет срабатывать никогда.

Если же бомба *есть*, как показано на рисунке выше, она может взорваться или не взорваться в зависимости от того, каким путем проследует фотон. В этом смысле бомба проводит измерение типа *Welcher Weg*. Соответственно, фотон будет вести себя как частица, которая проходит случайным образом либо по верхнему, либо по нижнему маршруту интерферометра. Если он пойдет по нижнему маршруту, бомба взорвется. Но, если он пойдет поверху, бомба останется нетронутой, а фотон выйдет из интерферометра в состоянии вертикальной поляризации. При измерении в диагональном базисе он с равной вероятностью будет вызывать срабатывание каждого из двух детекторов.

Следовательно, если бомба имеется, у нас будет ненулевая вероятность услышать щелчок в детекторе «-». Более того, этот детектор может сработать *только* при наличии бомбы. Если он сработает, мы будем точно знать, что бомба в интерферометре есть — не потревожив ее при этом!

Вышеописанное устройство нельзя считать идеальным инструментом по инспекции вооружений, поскольку оно не гарантирует ни однозначного результата, ни того, что бомба все-таки не взорвется (см. упр. 1.17). Однако если поместить бомбу не в интерферометр Маха — Цендера, а в высокодобротный интерферометр Фабри — Перо, то можно получить эффективность, близкую к 100%. В этом случае фотон с высокой вероятностью пройдет через интерферометр при отсутствии в нем бомбы, но отразится, если бомба в нем есть.

* A. C. Elitzur, L. Vaidman, *Quantum mechanical interaction-free measurements*, Foundations of Physics 23, 987 (1993).

гональном базисе выдаст тот или другой результат с вероятностью $1/2$ независимо от разности хода. Таким образом измерение *Welcher Weg* разрушает волновые свойства фотона и заставляет его вести себя как частица.

Конечно, дело обстоит именно так даже в том случае, если наблюдатель не смотрит на детекторы *Welcher Weg*. Тогда фотон находится в смешанном состоянии — он движется *либо* по верхнему, *либо* по нижнему пути интерферометра с вероятностью $1/2$, — но уже не в состоянии суперпозиции. То есть вместо ситуации упр. 1.14 мы оказываемся в ситуации упр. 1.12. Состояние фотона утратило свою *квантовую когерентность* — четко определенное соотношение фаз между членами суперпозиции. А такой фотон больше не может демонстрировать интерференцию.

Этот мысленный эксперимент демонстрирует *квантовую дополненность* (complementarity) — общий принцип квантовой физики, гласящий, что объекты могут обладать дополнительными свойствами, которые невозможно наблюдать или измерять одновременно. Мы можем получить либо информацию *Welcher Weg*, либо интерференцию, но не то и другое вместе.

Упражнение 1.17. В условиях, описанных в отступлении 1.4, чему равны вероятности:

- a) обнаружения бомбы без ее взрыва;
- b) взрыва бомбы;
- c) получения результата, не свидетельствующего однозначно о наличии бомбы?

1.6. Квантовая криптография

Теперь мы можем обсудить первое в этом курсе практическое приложение квантовой физики. Это приложение — *криптография*, обмен тайными сообщениями по незащищенным каналам.

Искусство тайнописи, известное с древности, сегодня представляет собой крупную отрасль индустрии телекоммуникаций, защищающую информационную безопасность отдельных лиц, предприятий и правительственных учреждений. В отступлении 1.5 описаны классические подходы к криптографии. В одном предложении ее содержание заключается в том, что в рамках классической физики мы вынуждены выбирать

Отступление 1.5. Классическая криптография

Криптографический обмен данными осуществить легко, если у обеих сторон, которые мы традиционно называем Алисой и Бобом, есть заранее оговоренный тайный набор данных (последовательность нулей и единиц), известный как *секретный ключ*, или *одноразовый шифровальный блокнот* (one-time pad). Тогда криптографический протокол может выглядеть следующим образом. Алиса берет фрагмент секретного ключа такой же длины (т.е. с тем же числом битов), что и послание, которое она хочет передать Бобу. Затем она применяет операцию XOR (исключающее ИЛИ, или побитное сложение по модулю 2) к каждому биту своего сообщения и соответствующему биту своего секретного ключа.

Первоначальное сообщение 01110011...
XOR
Секретный ключ 10011010...
Зашифрованное сообщение 11101001...

Таким способом Алиса приготавливает зашифрованное сообщение, которое можно безопасно передавать по незащищенному каналу, поскольку его нельзя расшифровать без доступа к секретному ключу. Боб, со своей стороны, может расшифровать полученное сообщение без труда. Для этого он применяет операцию XOR к его каждому биту и соответствующему биту секретного ключа.

Зашифрованное сообщение 11101001...
XOR
Секретный ключ 10011010...
Восстановленное первоначальное сообщение 01110011...

Этот протокол, известный как *одноключевое*, или *классическое*, *шифрование*, очень надежен и прост; он используется уже сотни лет. Проблема в том, что создать общий набор случайной информации, секретной для всех остальных, Алисе и Бобу достаточно просто. Как правило, единственный надежный способ сделать это — послать курьера с чемоданом, полным случайных данных. Это, разумеется, очень дорого. Поэтому одноключевая криптография используется только для наиболее секретной правительственной и коммерческой связи.

Для других приложений, таких как онлайн-шопинг, используется семейство протоколов, известных как *шифрование с открытым ключом* (public-key cryptography). Не вдаваясь в детали, скажу, что эти протоколы основаны на существовании «односторонних» функций, которые легко вычислить, но очень трудно инвертировать. Например, перемножение двух простых чисел, состоящих из нескольких десятков цифр каждое, на современном компьютере занимает пару-тройку микросекунд, но разложение числа аналогичной длины на простые множители займет месяцы, а то и годы. Протоколы шифрования с открытым ключом при помощи односторонних функций обеспечивают надежную связь между участниками, у которых не было возможности обменяться секретными ключами.

Протоколы с открытым ключом удобны и недороги, но не обеспечивают абсолютной секретности на фундаментальном уровне. Доступные нам вычислительные мощности удваиваются чуть ли не ежегодно, так что расчет, на который в настоящее время требуются годы, через несколько лет, возможно, будет занимать всего несколько часов. Более того, квантовые компьютеры (разд. 2.5) потенциально способны взламывать сообщения, зашифрованные по протоколам с открытым ключом, почти мгновенно.

между надежным, но дорогим одноключевым шифрованием и дешевым, но не полностью безопасным шифрованием с открытым ключом.

Квантовая механика предлагает нам решение проблемы, с которым и волки будут сыты, и овцы целы. С одной стороны, оно обеспечивает информационную безопасность с гарантией на уровне фундаментальных законов природы. С другой, это решение не требует обязательного предварительного обмена большим объемом случайной информации между сторонами.

1.6.1. Протокол BB84

Квантовая криптография, или, точнее, *квантовое распределение ключа* (quantum key distribution), основана на свойстве измерений изменять квантовое состояние, к которому они применяются. Идея в том, что отправляющая сторона (Алиса) высылает секретные данные принимающей стороне (Бобу) посредством единичных фотонов, в квантовых состояниях которых зашифрованы передаваемые данные. Всякий, кто попытается «подслушать» передачу, либо разрушит, либо изменит эти фотоны, выдав таким образом свое вмешательство.

Самый известный квантовый протокол шифрования называется «BB84» в честь его изобретателей Чарльза Беннета и Жиля Брассара¹. При его применении Алиса и Боб выполняют следующие операции.

1. Алиса случайно выбирает значение бита, 0 или 1, которое следует передать.
2. Алиса случайно выбирает базис шифрования — канонический или диагональный.
3. Алиса генерирует фотон и шифрует свой бит в поляризации этого фотона:

$$\begin{cases} 0 \rightarrow |H\rangle \\ 1 \rightarrow |V\rangle \end{cases} \text{ или } \begin{cases} 0 \rightarrow | +45^\circ \rangle \\ 1 \rightarrow | -45^\circ \rangle \end{cases}$$

После этого она отправляет фотон Бобу.

4. Боб случайно выбирает базис измерения — канонический или диагональный.
5. Боб измеряет полученный фотон в выбранном базисе:

¹ С.Н. Bennett, G. Brassard, “Quantum Cryptography: Public Key Distribution and Coin Tossing”, Int. Conf. on Computers, Systems and Signal Processing, Bangalore, India (IEEE, New York, 1984), p. 175.

- если он выбирает тот же базис, что и Алиса, то в результате измерения он получит то самое значение бита, которое отправила Алиса;
- если он выбирает другой базис, то получит случайное значение бита.

Эта процедура повторяется много раз. Конечно, и Алиса, и Боб должны тщательно все записывать: какие базисы использовали, какие состояния отправили или измерили, а также точное время, в которое фотоны были отправлены или получены. После того как окажутся собраны многие тысячи таких записей, Алиса и Боб сообщают друг другу (по классическому незащищенному каналу), какие базисы были выбраны для каждого фотона, но не конкретные значения отправленных или измеренных ими битов. Боб также сообщает Алисе о тех случаях, когда фотон ему измерить не удалось — если, например, тот был поглощен где-то в линии передачи (для этого нужно, конечно, чтобы время передач Алисы было точно известно Бобу, но эту информацию засекречивать не нужно). После обмена информацией Алиса и Боб отбрасывают данные по тем событиям, где были использованы разные базисы или фотон был потерян.

Теперь у Алисы и Боба имеется строка идентичных битов, которые они могут использовать как одноразовый блокнот в классическом протоколе. Чтобы понять, почему эта строка будет гарантированно секретной, предположим, что «шпион» (eavesdropper, Ева) перерезает линию передачи, перехватывает фотоны Алисы, измеряет их поляризацию и затем отправляет Бобу то, что измерила (рис. 1.4). Сможет ли она получить копию секретного ключа?

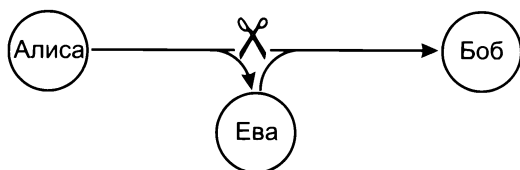


Рис. 1.4. Перехват сообщений в квантовой криптографии

Ответ отрицательный. Проблема Евы в том, что согласно постулату об измерениях она должна измерять в конкретном базисе и не знает, какой базис выбрать. Какой бы базис она ни выбирала, все равно будут

такие случаи, что Алиса и Боб работают в одном базисе, а Ева — в другом. Но в этом случае измерение Евы изменит состояние фотона и Боб, возможно, получит значение бита, не равное тому, которое отправила ему Алиса. Секретные ключи, записанные Алисой и Бобом, в конечном итоге окажутся разными, и это станет для них свидетельством возможного перехвата.

Предположим, например, что и Алиса, и Боб работают в каноническом базисе, а Ева — в диагональном. Алиса отправляет горизонтально поляризованный фотон, в котором зашифрован бит 0. Но Ева пользуется диагональным базисом, поэтому она увидит $|+\rangle$ или $|-\rangle$ с равной вероятностью. Если после перехвата она отошлет Бобу фотон в том состоянии, которое она задетектировала, Боб (измеряющий в каноническом базисе) с равной вероятностью увидит $|H\rangle$ или $|V\rangle$. Если это окажется $|V\rangle$, Боб запишет значение бита, отличное от того, которое отправила ему Алиса.

Чтобы проверить, не следит ли кто-нибудь за их перепиской, Алисе и Бобу нужно будет обмениваться по незащищенному каналу частью секретной битовой строки, полученной ими обоими. Если ошибок в ней нет (или очень мало), они могут использовать остальную часть строки в качестве одноразового блокнота.

Упражнение 1.18. Предположим, Ева перехватывает фотоны Алисы и измеряет их либо в каноническом, либо в диагональном базисе (базис она выбирает случайным образом). Затем она кодирует измеренный бит в том же базисе и посылает его Бобу. Какова средняя доля битов создаваемого ими секретного ключа, которая получится разной?

Ответ: 25%.

Это упражнение показывает, что если Алиса и Боб видят в получаемом ими секретном ключе определенную долю неидентичных битов, то они не могут больше быть уверены, что их сообщения не перехватываются. Однако значение доли ошибок, полученное в упр. 1.18, относится только к случаю одной конкретной стратегии перехвата (*атаки*) со стороны Евы. Выбрав более хитроумную атаку, Ева может получить копию секретного ключа, оставив при этом в записях Алисы и Боба даже более низкую долю ошибок.

Так насколько низкой должна быть доля ошибок у Алисы и Боба, чтобы они могли уверенно полагаться на безопасность своей связи?

Доказано¹, что граница проходит примерно по 11%. Какую бы стратегию ни выбрала Ева, если частота ошибок ниже этой величины, Алиса и Боб смогут, воспользовавшись процедурой *усиления секретности* (privacy amplification), «отфильтровать» для себя совершенно надежный и полностью идентичный секретный ключ из частично несовпадающей битовой строки, полученной посредством квантового протокола.

Упражнение 1.19. Как уже говорилось, значительная доля фотонов, отправленных Алисой, до Боба не доходит. Но Алиса и Боб не знают, были ли на самом деле эти фотоны потеряны из-за поглощения на линии или их «украл» перехватчик. Влияет ли это соображение на безопасность передачи ключа?

1.6.2. Практические вопросы квантовой криптографии

Квантовая криптография — не фантастика. Описанный выше протокол вполне реализуем современными техническими средствами. Мало того, существуют коммерческие квантово-криптографические серверы, которые можно подключать к коммерческим оптоволоконным линиям связи, где они будут реализовывать протокол BB84. Многие крупные города уже обзавелись своими квантовыми коммуникационными сетями. Квантовое шифрование использовалось для связи во время выборов в Федеральное собрание Швейцарии в 2007 г. и чемпионата мира по футболу 2010 г. в Южной Африке. Существуют такие сети и в Москве, Петербурге, Казани. За время, прошедшее с момента публикации этой книги, наверняка появились новые примеры.

Тем не менее мы пока не наблюдаем повсеместной замены классических криптографических протоколов квантовым распределением ключей. Что мешает? Существует ли здесь какое-то техническое препятствие или проблема в психологической инерции?

К сожалению, в этой области действительно имеются нерешенные практические вопросы, главный из которых — потери в линиях связи. Потери эти подчиняются закону Бугера — Ламберта — Бера

¹ P. W. Shor and J. Preskill, Simple Proof of Security of the BB84 Quantum Key Distribution Protocol, Physical Review Letters 85, 441 (2000).

(Beer's law): $n(L) = n_0 e^{-\beta L}$, где $n(L)$ — число непоглощенных фотонов на расстоянии L от Алисы, а β — коэффициент поглощения. Лучшие волокна, используемые в системах связи на сегодняшний день, дают потери около 5% на километр. Кажется, что это немного; тем не менее при передаче по небезопасной линии связи до Боба дойдет лишь крохотная часть фотонов; остальные будут утрачены.

Упражнение 1.20. Алиса отправляет фотон Бобу, который находится от нее на расстоянии 300 км, по оптоволоконной линии. Каждый километр волокна поглощает 5% энергии света, распространяющегося по нему.

а) Найдите коэффициент потерь β этого волокна.

Подсказка: ответ $0,05 \text{ км}^{-1}$ близок к верному, но не совсем точен.

б) Какая доля фотонов, отправленных Алисой, дойдет до Боба?

Помимо потерь существует еще проблема, связанная с темновым счетом (см. отступление 1.2). Может случиться так, что, например, фотон $|H\rangle$, отправленный Алисой, будет потерян и в это же время детектор Боба в канале вертикальной поляризации даст ложное срабатывание. Тогда Боб интерпретирует это срабатывание как фотон $|V\rangle$, полученный от Алисы, и сделает соответствующую запись. В результате Алиса и Боб увидят ошибку и, возможно, потеряют уверенность в безопасности связи.

Если линия передачи не слишком длинна, до Боба будет доходить достаточно фотонов, чтобы доля ошибок, связанных с темновым счетом, была невелика. Но доля дошедших фотонов с увеличением расстояния экспоненциально падает, тогда как частота темновых срабатываний остается постоянной. Так что в какой-то момент надежная передача данных станет попросту невозможной.

Этот эффект показан на рис. 1.5. Когда длина линии связи невелика, частота получения надежных битов (secure bit rate), отфильтрованных Алисой и Бобом (пунктирные линии), равна частоте получения фотонов Бобом (сплошные линии), умноженной на некоторый постоянный коэффициент. Но когда частота их получения снижается настолько, что доля ошибок, связанных с темновым счетом, становится значимой, число надежных битов начинает падать быстрее, а протокол усиления секретности становится все менее эффективным. Когда число фотонов, доходящих до Боба, падает ниже некоторого

критического уровня, соответствующего доле ошибок в 11%, передача перестает быть надежной.

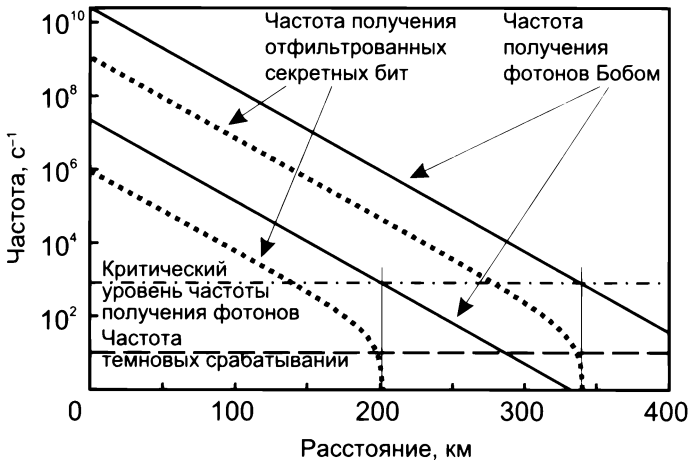


Рис. 1.5. Производительность установки квантового распределения ключа в зависимости от расстояния между Алисой и Бобом в условиях упр. 1.21

Упражнение 1.21. Полагая, что у Алисы есть идеальный источник единичных фотонов, постройте примерный график количества фотонов, получаемых Бобом, а также количества отфильтрованных битов секретного ключа в секунду в зависимости от расстояния передачи. На основании этого оцените максимальное возможное расстояние безопасной связи при следующих параметрах:

- потери фотонов в оптоволоконной линии: $\beta = 0,05 \text{ км}^{-1}$;
- частота эмиссии фотонов источником Алисы: $n_0 = 2 \times 10^7$ и 2×10^{10} фотонов в секунду;
- квантовая эффективность фотонных детекторов: $\eta = 0,1$;
- частота темновых срабатываний, синхронизированных с фотонами Алисы¹, в каждом из детекторов Боба: $f_d = 10 \text{ с}^{-1}$.

Ответ: см. рис. 1.5.

Дальность защищенной квантовой связи можно улучшить, повысив производительность источника фотонов на стороне Алисы или сни-

¹ На самом деле частота темновых срабатываний может быть выше. Но, поскольку Боб знает точные моменты передачи фотонов Алисой, на частоту ошибки будут влиять только те темновые события, которые произойдут синхронно с щелчками, ожидаемыми от фотонов Алисы.

жив частоту темновых срабатываний детектора. Однако это не приведет к принципиальному улучшению ситуации: экспоненциальная природа закона Бугера — Ламберта — Бера в любом случае ограничивает квантовую связь расстояниями, не превышающими несколько сотен километров. В условиях упр. 1.21 повышение производительности источника на три порядка позволит увеличить дистанцию всего в 1,7 раза (рис. 1.5).

Чтобы преодолеть этот предел — и создать «квантовый интернет», который пересек бы океаны и со временем покрыл бы своей сетью всю планету, — нам потребуется принципиально иная технология. Про эту технологию, известную как квантовый повторитель, речь пойдет в конце главы 2.

1.7. Операторы в квантовой механике

Теперь мы переходим к обсуждению линейных операторов, представляющих собой ключевой элемент квантовой физики¹. Они играют двоякую роль. Прежде всего операторы описывают эволюцию: с течением времени квантовые состояния изменяются, и это изменение математически выражается операторами. Второе, несколько менее очевидное, приложение линейных операторов состоит в формальном описании квантовых измерений. В этом разделе мы начнем с первой их роли.

Упражнение 1.22. Найдите матрицу оператора $|+\rangle\langle-|$ в каноническом базисе и базисе $\{|R\rangle, |L\rangle\}$.

Упражнение 1.23. Найдите в каноническом базисе матрицу линейного оператора $\hat{A}$, отображающего

- а) $|H\rangle$ на $|R\rangle$ и $|V\rangle$ на $2|H\rangle$;
- б) $|+\rangle$ на $|R\rangle$ и $|-\rangle$ на $|H\rangle$.

Примером физической операции, которую можно связать с квантовым оператором, может служить волновая пластинка, изменяющая состояние поляризации фотона. Чтобы рассчитать этот оператор, мы должны принять некоторое соглашение. Как сказано в разд. В.3,

¹ Более полное введение в линейные операторы и матрицы можно найти в разд. А.5 и А.6.

волновая пластинка изменяет относительную фазу необыкновенной (параллельной оптической оси) и обыкновенной (перпендикулярной оптической оси) поляризаций на угол $\Delta\varphi$, который равен π для полуволновой пластинки и $\pi/2$ для четвертьволновой. Кроме того, она вводит общий сдвиг фазы для всей волны.

Эти оптические фазовые сдвиги в применении к единичному фотону превращаются в квантовые фазовые сдвиги. Общим фазовым сдвигом, одинаковым для всех компонентов поляризации, можно пренебречь (см. разд. 1.3). Мы, однако, должны договориться, как с ним обращаться в наших выкладках. Будем считать, что волновая пластинка не дает фазового сдвига на обыкновенный компонент поляризации, тогда как необыкновенный ее компонент претерпевает фазовый сдвиг $\Delta\varphi$. Иными словами, волновая пластинка с оптической осью, ориентированной под углом θ к горизонтали, производит следующие преобразования:

$$|\theta\rangle \rightarrow e^{i\Delta\varphi}|\theta\rangle; \quad (1.4a)$$

$$\left|\frac{\pi}{2} + \theta\right\rangle \rightarrow \left|\frac{\pi}{2} + \theta\right\rangle. \quad (1.4b)$$

Упражнение 1.24. Найдите в каноническом базисе матрицы операторов, связанных с полуволновой и четвертьволновой пластинками с оптической осью, ориентированной под углом α к горизонтали, при помощи следующего пошагового алгоритма:

- Напишите оператор $\hat{A}_{\Delta\varphi}$, связанный с преобразованием (1.4), в виде уравнения (A.25).
- Выразите каждый бра- и кет-вектор в ответе пункта а) в матричной форме в каноническом базисе и вычислите матрицу результирующего оператора.
- Подставьте значения $\Delta\varphi$ для полуволновой и четвертьволновой пластинок.

Ответ:

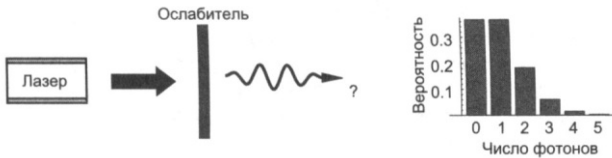
$$\hat{A}_{\text{HWP}}(\alpha) = \begin{pmatrix} -\cos 2\alpha & -\sin 2\alpha \\ -\sin 2\alpha & \cos 2\alpha \end{pmatrix}; \quad (1.5a)$$

$$\hat{A}_{\text{QWP}}(\alpha) = \begin{pmatrix} \sin^2 \alpha + i \cos^2 \alpha & (i-1) \sin \alpha \cos \alpha \\ (i-1) \sin \alpha \cos \alpha & i \sin^2 \alpha + \cos^2 \alpha \end{pmatrix}. \quad (1.5b)$$

Упражнение 1.25. Пользуясь результатом предыдущего упражнения, убедитесь в верности следующих утверждений:

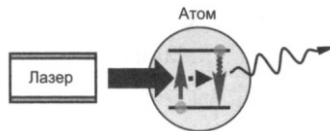
Отступление 1.6. Как получить фотон?

Вот самый очевидный, но неверный ответ на этот вопрос: использовать ослабленный сигнал лазера. Предположим, у нас есть импульсный лазер со средней мощностью P и частотой повторения импульсов R . Тогда каждый импульс лазера содержит $n = P/R\hbar\omega$ фотонов, где ω — частота излучения лазера. Поэтому можно, казалось бы, разместить на пути лазерного луча ослабитель (темное стекло), который уменьшал бы его мощность в n раз, так чтобы каждый импульс содержал ровно один фотон.



Эти рассуждения ошибочны, поскольку не учитывают, что реальное число фотонов в импульсах, проходящих через ослабитель, будет стохастическим в соответствии с распределением Пуассона (см. разд. Б.3). Хотя в среднем, возможно, действительно получится один фотон на импульс, это не означает, что каждый импульс будет содержать *ровно* один фотон. Иногда фотонов в импульсе вообще не окажется, иногда там будет один фотон, иногда два или больше.

Несмотря на это возражение, в некоторых случаях ослабленный лазер служит полезной заменой настоящего источника фотонов. В частности, в практической квантовой криптографии лазер ослабляется до чрезвычайно низкого уровня, так чтобы вероятность того, что каждый импульс содержит хотя бы один фотон, стала весьма малой. Тогда вероятность содержания в импульсе более одного фотона пренебрежимо мала, и безопасность связи не страдает.



Чтобы гарантировать генерацию единичного фотона «по требованию», нужны более хитроумные схемы. Например, единичный двухуровневый атом, будучи возбужденным, автоматически вернется в основное состояние, излучив при этом ровно один фотон. Практическая реализация такого источника, однако, представляет серьезные трудности. Во-первых, необходимо поймать единичный атом и неподвижно удерживать его в ходе всего эксперимента. Во-вторых, фотон будет излучен в случайном направлении. Чтобы заставить атом излучать в каком-то конкретном направлении, физики иногда окружают его резонатором Фабри — Перо. Этот метод развился в целое научное направление, называемое *квантовой электродинамикой в резонаторе*.

Чтобы обойти необходимость в захвате атома, эксперименты проводят с твердотельными атомоподобными источниками, такими как единичные дефекты кристаллической решетки или квантовые точки. Идея та же: взять объект, в котором возможен только один квант возбуждения с определенной энергией. Пока я пишу эту книгу, подобные эксперименты стремительно развиваются в сторону большей эффективности и лучшей воспроизводимости получаемых фотонов.



Многие физики используют мощный альтернативный подход к приготовлению единичных фотонов — *спонтанное параметрическое рассеяние* (spontaneous parametric down-conversion). Это нелинейный квантово-оптический процесс, который происходит, когда сильный лазерный луч проходит сквозь кристалл с нелинейными оптическими свойствами. Каждый фотон луча может при этом спонтанно расщепиться на два менее энергичных фотона. Данное событие имеет очень низкую вероятность. Однако у него есть фундаментальное свойство: в нем каждый раз рождается именно *пара* фотонов. Так что если мы зарегистрируем один из этих фотонов, то будем знать наверняка, что появилась также и его копия, — и можем с ней экспериментировать.

Такое устройство называется *источником объявленных одиночных фотонов* (heralded single photon source), потому что обнаружение одного фотона «объявляет» о присутствии второго. Этот источник не способен производить фотоны «по требованию»; он только сигнализирует о появлении спонтанно испущенного фотона, не разрушая его. Поэтому его применение в квантовых технологиях ограничено. Однако, поскольку у нас пока нет надежного способа приготовления единичных фотонов по заказу, источники объявленных фотонов широко используются в экспериментальных квантово-оптических исследованиях.

- при применении к фотону, линейно поляризованному под углом θ , полуволновая пластинка с оптической осью, ориентированной под углом α , дает фотон, линейно поляризованный под углом $2\alpha - \theta$, в соответствии с рис. В.4;
- четвертьволновая пластинка с оптической осью, ориентированной горизонтально или вертикально, превращает фотон с круговой поляризацией в фотон с поляризацией под $\pm 45^\circ$ и наоборот в соответствии с упр. В.9.

Упражнение 1.26. Операторы Паули¹ определяются как

$$\hat{\sigma}_x \equiv |H\rangle\langle V| + |V\rangle\langle H|; \quad (1.6a)$$

$$\hat{\sigma}_y \equiv -i|H\rangle\langle V| + i|V\rangle\langle H|; \quad (1.6b)$$

$$\hat{\sigma}_z \equiv |H\rangle\langle H| - |V\rangle\langle V|, \quad (1.6c)$$

¹ Значение индексов x , y и z проявится в главе 4, когда мы будем изучать квантование момента импульса.

или в матричной записи

$$\hat{\sigma}_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

Предложите реализацию этих операторов средствами волновых пластинок.

Подсказка: найдите состояния, на которые операторы Паули отображают $|H\rangle$ и $|V\rangle$, затем используйте упр. 1.24.

Упражнение 1.27. Матрица оператора Адамара $\hat{H}$ в каноническом базисе равна:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

- Выразите этот оператор в нотации Дирака.
- На какие состояния $\hat{H}$ отображает $|H\rangle$ и $|V\rangle$?
- Как можно реализовать этот оператор с помощью волновых пластинок?

1.8. Проекционные операторы и ненормированные состояния

Ранее мы постулировали, что физические квантовые состояния имеют норму 1. Давайте теперь расширим это соглашение. Норма вектора состояния $|a\rangle$ может быть меньше единицы; это означает, что состояние $|a\rangle$ существует не точно, а с вероятностью, равной квадрату его нормы:

$$\text{pr}_a = \| |a\rangle \|^2 = \langle a|a\rangle. \quad (1.8)$$

Такие состояния называют *ненормированными*.

Рассмотрим проективное измерение состояния $|\psi\rangle$ в базисе $\{|v_i\rangle\}$. Каноническая формулировка постулата об измерениях гласит, что измерение превращает $|\psi\rangle$ в одно из $|v_i\rangle$ с вероятностью (1.3). Воспользовавшись расширенным соглашением, мы можем сказать, что это измерение превращает $|\psi\rangle$ в набор ненормированных состояний $|\psi'_i\rangle = \langle v_i|\psi\rangle |v_i\rangle$. Каждое $|\psi'_i\rangle$ пропорционально $|v_i\rangle$, но вероятность его существования равна квадрату его нормы:

$$\langle \psi'_i|\psi' \rangle = |\langle v_i|\psi\rangle|^2 \stackrel{(1.3)}{=} \text{pr}_i. \quad (1.9)$$

Это можно записать иначе:

$$|\psi'_i\rangle = \hat{P}_i |\psi\rangle = \langle v_i | \psi \rangle |v_i\rangle, \quad (1.10)$$

где мы ввели *проекционный оператор* (projection operator или projector):

$$\hat{P}_i = |v_i\rangle \langle v_i|. \quad (1.11)$$

Например, неразрушающее измерение состояния $|\psi\rangle = (2|H\rangle + |V\rangle)/\sqrt{5}$ в каноническом базисе дает следующие ненормированные состояния:

$$\begin{aligned} |\psi'_H\rangle &= \hat{P}_H |\psi\rangle = |H\rangle \langle H | \psi \rangle = 2|H\rangle/\sqrt{5}; \\ |\psi'_V\rangle &= \hat{P}_V |\psi\rangle = |V\rangle \langle V | \psi \rangle = |V\rangle/\sqrt{5}. \end{aligned}$$

Состояние $|\psi'_H\rangle$ представляет горизонтально поляризованный фотон, существующий с вероятностью $\text{pr}_H = 4/5$, а состояние $|\psi'_V\rangle$ — вертикально поляризованный фотон, существующий с вероятностью $\text{pr}_V = 1/5$.

Интерпретировать измерения на языке проекционных операторов часто оказывается удобным, как мы увидим позже.

Упражнение 1.28. Найдите матрицу проекционного оператора, связанного с базисным состоянием $|v_2\rangle$ в базисе $\{|v_i\rangle\}$ для гильбертова пространства размерности $N = 4$.

1.9. Квантовые наблюдаемые

1.9.1. Наблюдаемые операторы

Постулат квантовой физики об измерениях, определенный нами в разд. 1.4, гласит, что квантовое измерение выполняется в ортонормальном базисе, а результат этого измерения есть случайный элемент этого базиса. Сделаем еще шаг вперед и свяжем с каждым элементом $|v_i\rangle$ базиса действительное число v_i . Тогда вместо «результатом измерения является состояние $|v_i\rangle$ » мы будем говорить «результатом измерения является величина v_i ».

Для некоторых измерений такая связь естественна. Например, состояние с определенным положением, такое как $|x_i\rangle = |x = 3 \text{ м}\rangle$, естественным образом связано со значением координаты частицы ($x_i = 3 \text{ м}$). Для других измерений, вроде измерения поляризации фотона, естественной связи между элементами базиса и числами не существует, но такую связь можно ввести искусственно. К примеру, если мы измеряем в каноническом базисе, то можем связать число 1 с состоянием $|H\rangle$, а число -1 с состоянием $|V\rangle$.

Информацию о базисе измерения и связанных с ним величинах удобно выразить, скажем, в виде оператора:

$$\hat{V} = \sum_i v_i |v_i\rangle\langle v_i|. \quad (1.12)$$

Этот оператор называется *наблюдаемым оператором*, или просто *наблюдаемым* (observable). Как мы знаем (разд. А.8), элементы $|v_i\rangle$ базиса измерений (*собственного базиса* наблюдаемого) представляют собой *собственные состояния*, или *собственные векторы* наблюдаемого, а соответствующие им величины v_i являются его *собственными значениями*. Воспользовавшись (1.12), можно ввести наблюдаемый оператор для почти любого измерения или измеряемой величины: положения, импульса, момента импульса, энергии и т. п. Как мы увидим в ближайших разделах, наблюдаемые операторы в квантовой физике имеют первостепенное значение.

Из этого общего утверждения есть одно важное исключение. *Время* в квантовой физике никогда не рассматривается как оператор. Не существует ни собственных состояний времени, ни квантов времени. Время — это просто непрерывная переменная.

Упражнение 1.29. Найдите наблюдаемые, связанные с базисами $\{|H\rangle, |V\rangle\}$, $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ и $\{|R\rangle, |L\rangle\}$ (т. е. с измерительными приборами на рис. 1.2) и собственными значениями ± 1 (соответственно) в нотации Дирака. Найдите матрицы этих операторов в базисе $\{|H\rangle, |V\rangle\}$.

Ответ: операторы Паули (1.6):

$$|H\rangle\langle H| - |V\rangle\langle V| = \sigma_z; \quad (1.13a)$$

$$|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -| = \sigma_x; \quad (1.13b)$$

$$|R\rangle\langle R| - |L\rangle\langle L| = \sigma_y. \quad (1.13c)$$

Итак, мы увидели обе роли операторов в квантовой механике: это преобразования квантовых состояний и описания измерительных приборов. Естественно спросить, схожи ли физические реализации одних и тех же операторов в разных ролях. Пример выше показывает, что это не так. Измерительные приборы, реализующие оператор Паули, показаны на рис. 1.2. При этом операторы Паули как средства преобразования состояния реализованы в упр. 1.26. Видно, что конфигурации в том и другом случаях совершенно различны.

Упражнение 1.30. Покажите, что:

- а) операторы, соответствующие физическим наблюдаемым (1.12), являются эрмитовыми;
- б) любой эрмитов оператор может быть связан с некоторым физическим наблюдаемым, т.е. его можно выразить в виде (1.12) с действительными собственными значениями и собственными состояниями, образующими ортонормированный базис.

Упражнение 1.31. Выполните спектральное разложение матриц Паули (1.7) с использованием методов линейной алгебры. Проверьте соответствие вашего результата определению, данному в упр. 1.29.

Мы видим, что каждое измерение может быть связано с некоторым эрмитовым оператором и каждый эрмитов оператор может быть связан с некоторым измерением. Более того, наблюдаемый оператор содержит в компактной форме полную информацию о базисе измерения и связанных с ним собственных значениях. Если дается эрмитова матрица наблюдаемого оператора, мы можем извлечь из нее эту информацию посредством спектрального разложения¹.

1.9.2. Среднее значение и неопределенность наблюдаемого

Предположим, мы измеряем наблюдаемое $\hat{V} = \sum_i v_i |v_i\rangle\langle v_i|$ в состоянии $|\psi\rangle$. Результат этого измерения имеет вероятностный характер: мы будем наблюдать каждую величину v_i с вероятностью $\text{pr}_i = |\langle v_i|\psi\rangle|^2$.

¹ Важное исключение здесь — случай, когда матрица имеет вырожденные собственные величины. В этом случае решение для собственного базиса не единственно. Пример см. в упр. А.68.

Мы можем отнести к измеренной величине наблюдаемого как к случайной величине (приложение Б) и найти ее статистические характеристики: математическое ожидание и дисперсию.

Упражнение 1.32. Наблюдаемое $\hat{V}$ измеряется в состоянии $|\psi\rangle$.

- а) Покажите, что *математическое ожидание* этого измерения равно

$$\langle V \rangle = \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle. \quad (1.14)$$

Выражение в правой части этого уравнения называется также *квантовым средним значением* наблюдаемого $\hat{V}$ в состоянии $|\psi\rangle$.

- б) Покажите, что *дисперсия* величины $\hat{V}$ равна:

$$\langle \Delta V^2 \rangle = \langle \psi | \left(\hat{V} - \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle \right)^2 | \psi \rangle \quad (1.15)$$

и что эта дисперсия может быть вычислена по формуле:

$$\langle \Delta V^2 \rangle = \langle \psi | \hat{V}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle^2. \quad (1.16)$$

Как и в теории вероятностей, *неопределенность* квантовой величины равна квадратному корню из его дисперсии.

Странное понятие наблюдаемого оператора, введенное в предыдущем подразделе, оказывается весьма полезным. Оно не только несет в себе полную информацию об измерении, но и обеспечивает простой способ вычисления статистических свойств этого измерения в применении к заданному состоянию. Решим простой пример.

Упражнение 1.33^s. Вычислите среднее значение, дисперсию и неопределенность наблюдаемого $\hat{\sigma}_z$ в состоянии $|+\rangle$.

Ответ: $\langle \sigma_z \rangle = 0$; $\langle \Delta \sigma_z^2 \rangle = \langle \sigma_z^2 \rangle = 1$; $\sqrt{\langle \Delta \sigma_z^2 \rangle} = 1$.

Чтобы интерпретировать приведенный ответ, вспомним, что наблюдаемое $\hat{\sigma}_z$ может быть измерено с использованием установки на рис. 1.2 а. Наблюдаемое принимает значение +1, если фотон проходит (проецируется на состояние горизонтальной поляризации), и -1, если фотон отражается (проецируется на состояние вертикальной поляризации). Диагонально поляризованный фотон имеет равные шансы как пройти,

так и отразиться, так что среднее значение результата измерений будет равно нулю. Что касается дисперсии, то в каждом измерении мы получаем величину либо $+1$, либо -1 , так что среднеквадратичное отклонение от нуля должно быть равно единице.

Это хороший пример перехода между классическими и квантовыми измерениями. Квантовые измерения имеют вероятностный характер: в данном случае каждый фотон будет случайным образом пропущен или отражен. В классической же физике все имеет детерминистский характер: если мы направим поляризованную под 45° классическую волну на PBS, она расщепится ровно пополам, безо всякой неопределенности. Принцип соответствия требует, чтобы квантовое поведение в макроскопическом пределе становилось классическим. Этот переход от квантового к классическому поведению можно проследить в следующем упражнении.

Упражнение 1.34. Группа из N поляризованных под $+45^\circ$ фотонов направляется в PBS. Вычислите среднее значение и неопределенность разности N_- между числом пропущенных и отраженных фотонов.

Подсказка: воспользуйтесь упр. Б.5.

Ответ: среднее равно нулю, неопределенность равна $\sqrt{\langle \Delta N_-^2 \rangle} = \sqrt{N}$.

На первый взгляд это может показаться странным: по мере того как наш эксперимент становится более макроскопическим, неопределенность в нем не снижается, а, напротив, повышается. Как это согласуется с классической физикой? Дело в том, что здесь имеет значение не абсолютная неопределенность, а относительная, т.е. $\sqrt{\langle \Delta N_-^2 \rangle} / N = 1/\sqrt{N}$. Чем больше N , тем выше относительная точность фотометрии в двух каналах, требуемая для обнаружения квантовых флуктуаций.

Например, если $N = 10^4$, то статистическое отклонение равно $\sqrt{N} = 100$, так что относительная неопределенность равна $1/100$. Но если $N = 10^6$, эта неопределенность становится в 10 раз меньше, $1/1000$. А теперь напомним, что энергия фотона очень мала ($\sim 4 \times 10^{-19}$ Дж для видимого спектра), так что в любом эксперименте с участием макроскопически значимого количества света — даже в масштабе наноджоулей — задействовано громадное число фотонов. Относительная разность между прошедшей и отраженной энергиями ничтожна, и для ее регистрации требуются фотометры чрезвычайно высокой точности.

1.9.3. Принцип неопределенности

Упражнение 1.35. Покажите, что наблюдаемое $\hat{V}$ в некотором квантовом состоянии $|\psi\rangle$ имеет нулевую неопределенность тогда и только тогда, когда $|\psi\rangle$ является собственным состоянием наблюдаемого (т. е. $\hat{V}|\psi\rangle = v|\psi\rangle$).

Упражнение 1.36. Рассмотрим два эрмитовых оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Покажите, что существует базис, в котором они одновременно диагонализуются, тогда и только тогда¹, когда $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Подсказка: доказательство будет проще, если предположить, что один из операторов не имеет вырожденных собственных значений.

Последнее упражнение показывает, что любые два коммутирующих наблюдаемых могут быть измерены одновременно. То есть можно построить устройство, выполняющее измерения в ортонормальном базисе, который можно связать одновременно с обоими этими наблюдаемыми.

Коммутирующие наблюдаемые «совместимы»: существует собственный базис $\hat{A}$, такой, что если система приготовлена в одном из его элементов $|v_i\rangle$, то она останется в этом состоянии при измерении наблюдаемого $\hat{B}$ и результат измерения будет вполне определенным, а именно $|v_i\rangle$ ². Если же $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не коммутируют, то система, приготовленная в собственном состоянии наблюдаемого $\hat{A}$, при измерении $\hat{B}$ может дать случайный результат³. Степень этой случайности количественно оценивается принципом неопределенности Гейзенберга, который мы сейчас выведем.

¹ Чтобы узнать о коммутаторах, загляните в разд. А.9.

² Это не означает, однако, что *любое* собственное состояние наблюдаемого $\hat{A}$ даст определенный результат при измерении $\hat{B}$. Если у $\hat{A}$ есть вырожденные собственные величины, его собственный базис не является единственным (см. разд. А.8), так что не каждый собственный вектор оператора $\hat{A}$ гарантированно является также собственным вектором $\hat{B}$. К примеру, если $\hat{A} = \hat{I}$, а $\hat{B} = \hat{\sigma}_z$, состояние $|+\rangle$ является собственным состоянием $\hat{A}$, но не $\hat{B}$, так что наблюдаемое $\hat{B}$ при измерении в этом состоянии будет проявлять неопределенность, несмотря на то что $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

³ Даже если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не коммутируют, это не означает, что измерение наблюдаемого $\hat{B}$ в собственном состоянии наблюдаемого $\hat{A}$ *всегда* дает случайный результат.

Упражнение 1.37. Покажите, что для любых эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$

$$\langle \{ \hat{A}, \hat{B} \} \rangle = 2 \operatorname{Re} \langle \hat{A} \hat{B} \rangle; \quad (1.17)$$

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = 2i \operatorname{Im} \langle \hat{A} \hat{B} \rangle; \quad (1.18)$$

$$\left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2 \leq 4 \left| \langle \hat{A} \hat{B} \rangle \right|^2, \quad (1.19)$$

где квантовое среднее вычисляется в произвольном состоянии $|\psi\rangle$.

Упражнение 1.38. Покажите, что для любых двух эрмитовых операторов $\hat{A}$, $\hat{B}$ и любого состояния $|\psi\rangle$

$$\langle \hat{A}^2 \rangle \langle \hat{B}^2 \rangle \geq \left| \langle \hat{A} \hat{B} \rangle \right|^2. \quad (1.20)$$

Подсказка: введите $|a\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ и $|b\rangle = \hat{B}|\psi\rangle$ и примените неравенство Коши — Буняковского.

Упражнение 1.39. Докажите принцип неопределенности Гейзенберга (Heisenberg uncertainty principle): для эрмитовых $\hat{A}$, $\hat{B}$ и любого состояния $|\psi\rangle$

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \langle \Delta \hat{B}^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2, \quad (1.21)$$

считая для простоты, что $\langle A \rangle = \langle B \rangle = 0$. (1.22)

Упражнение 1.40. Повторите доказательство без предположения (1.22). Остался бы принцип неопределенности (1.21) в силе, если бы правая часть уравнения равнялась $\frac{1}{4} \left| \langle \{ \hat{A}, \hat{B} \} \rangle \right|^2$ или $\left| \langle \hat{A} \hat{B} \rangle \right|^2$?

Упражнение 1.41. Покажите, что если $[\hat{A}, \hat{B}] = \varepsilon \cdot \hat{1}$, то правая часть неравенства неопределенностей не зависит от $|\psi\rangle$:

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \langle \Delta \hat{B}^2 \rangle \geq \frac{|\varepsilon|^2}{4}. \quad (1.23)$$

Упражнение 1.42. Для $\hat{A} = \hat{\sigma}_x$ и $\hat{B} = \hat{\sigma}_y$:

- а) найдите $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$, $\langle \psi | \Delta \hat{A}^2 | \psi \rangle$, $\langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle$, $\langle \psi | \Delta \hat{B}^2 | \psi \rangle$ и $\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle$ для $|\psi\rangle = |H\rangle$;

- б) убедитесь, что принцип неопределенности действует для $\hat{A}$, $\hat{B}$ и $|\psi\rangle = |H\rangle$;
- с) приведите пример состояния $|\psi\rangle$, для которого произведение неопределенностей наблюдаемых $\hat{A}$ и $\hat{B}$ равно нулю.

Принцип неопределенности Гейзенберга — одно из важнейших следствий квантовой физики и одно из главных ее отличий от физики классической. В те времена, когда квантовая механика только зарождалась, этот принцип был одной из самых противоречивых идей. Как и постулат об измерениях, принцип неопределенности прямо противоречил детерминистской картине мира, принятой тогда в классической физике. Согласно этой картине, любая неопределенность, полученная в ходе измерений, являлась следствием несовершенства измерительной техники, и путем усовершенствования этой техники ее можно было снижать до бесконечности. В рамках квантовой механики это не так: если создать устройство, способное точно измерить одно наблюдаемое в каком-то конкретном состоянии системы, то эта установка, какой бы замечательной она ни была, обязательно покажет плохой результат при измерении другого наблюдаемого.

Особенно интересен случай из упр. 1.41. Если коммутатор двух наблюдаемых пропорционален единичному оператору, то произведение их неопределенностей имеет нижнюю границу для *всех* состояний. Пример такой пары — координата и импульс, которые мы будем изучать в главе 3. Их коммутатор равен $i\hbar$, из чего следует, что произведение неопределенностей для любого состояния не может быть меньше $\sqrt{\hbar^2/4} = \hbar/2$.

1.10. Квантовая эволюция

Наша цель в этом разделе — выяснить, как меняются (эволюционируют) квантовые состояния со временем: при заданном начальном состоянии $|\psi(0)\rangle$ физической системы нам нужно определить ее состояние $|\psi(t)\rangle$ в произвольный момент времени. В классической физике полный набор уравнений движения можно получить из *гамильтониана* (полной энергии) системы. В гамильтониане заключена вся информация о зависящем от времени поведении системы, для любого

ее начального состояния. Как мы увидим, это верно и для квантовой физики.

Правила квантовой эволюции невозможно вывести из тех постулатов, которые мы изучали до сих пор. Поэтому применим здесь ту же тактику, которую использовали при выработке постулата об измерениях. Сначала проведем интуитивные физические рассуждения об эволюции конкретной физической системы — фотона. Затем обобщим их на остальные системы и придадим им строгий вид.

Посмотрим еще раз на уравнение (1.2). Эволюция состояния фотона здесь заключена в общем фазовом множителе $e^{-i\omega t}$:

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle e^{-i\omega t}. \quad (1.24)$$

До сих пор мы не обращали на него внимания, потому что, согласно нашим рассуждениям, он никак не влияет на физические свойства состояния. Но теперь давайте рассмотрим этот множитель подробнее.

Вспомнив, что энергия фотона равна $E = \hbar\omega$, мы можем записать (1.24) в виде

$$|\psi_E(t)\rangle = |\psi_E(0)\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad (1.25)$$

где индекс E напоминает нам, что мы имеем дело с состоянием определенной энергии (в данном случае с фотоном определенной частоты).

Следующий наш шаг заключается в привлечении гипотезы де Бройля; согласно ей, не только фотоны, но и все свободно движущиеся частицы могут быть связаны с волнами, пространственно-временное поведение которых описывается множителем $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, где $k = p/\hbar$. В главе 3 мы обсудим данную гипотезу несколько глубже; пока же заметим лишь, что зависимость от времени у волны де Бройля такая же, как в уравнении (1.25). Это приводит нас к выводу о том, что (1.25) справедливо не только для фотонов, но и для всех свободно движущихся квантовых частиц. Мы постулируем, что такое поведение даже более универсально, т. е. что оно верно для *всех* нерелятивистских квантовых объектов во Вселенной, при условии что они находятся в состоянии с определенной энергией — т. е. в одном из собственных состояний оператора энергии (гамильтониана).

Поговорим об этом операторе подробнее. Поскольку он соответствует некоторому физическому наблюдаемому, он эрмитов и потому допускает спектральное разложение

$$\hat{H} = \sum_j E_j |E_j\rangle\langle E_j|, \quad (1.26)$$

где собственные состояния с определенной энергией $\{|E_j\rangle\}$ образуют базис, в котором может быть разложено любое произвольное состояние:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_j \psi_j |E_j\rangle. \quad (1.27)$$

Каждый компонент данного разложения меняется во времени согласно (1.25). Поскольку эта эволюция линейна, мы можем записать:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j \psi_j |E_j\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t}. \quad (1.28)$$

Мы постулируем, что это уравнение универсально и применимо к эволюции всех квантовых состояний.

Упражнение 1.43. Пусть начальное состояние некоторой системы есть суперпозиция двух энергетических собственных состояний $|\psi(0)\rangle = (|E_1\rangle + |E_2\rangle)/\sqrt{2}$. Найдите наименьшее положительное значение момента времени t , в который состояние $|\psi(t)\rangle$ будет физически эквивалентным $(|E_1\rangle - |E_2\rangle)/\sqrt{2}$.

Мы видим, что в то время как для энергетических собственных состояний (например, в случае состояний поляризации фотона определенной частоты) квантовая эволюция соразмеряется с нефизичным фазовым множителем, другие состояния все же меняют со временем свои физические свойства.

Поскольку энергетические собственные состояния физически не меняются, их называют *стационарными*. Еще один пример стационарных состояний — атом в рамках модели Бора. Согласно этой модели, если электрон находится на «орбитали», соответствующей определенной величине энергии, то он может оставаться на ней в течение долгого времени.

Уравнение (1.28) можно использовать для вычисления эволюции квантового состояния непосредственно. Однако иногда практичнее

бывает представить эволюцию в более компактном виде *оператора эволюции*, отображающего любое начальное состояние на его изменившийся вариант:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle. \quad (1.29)$$

Получим оператор эволюции в явном виде.

Упражнение 1.44. Пользуясь уравнениями (1.27) и (1.28):

а) получите матрицу оператора эволюции в собственном базисе гамильтониана;

б) покажите, что¹ $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$. (1.30)

Убедитесь, что этот оператор является унитарным.

Унитарность оператора эволюции неудивительна. Данный оператор должен отображать одно физическое состояние на другое физическое состояние, а это означает, что он должен сохранять норму.

Упражнение 1.45^s. Убедитесь, что операторы преобразования (1.5), задаваемые волновыми пластинками, унитарные.

Как мы знаем (упр. А.82), все унитарные операторы обратимы и оператор, обратный унитарному, также является унитарным. У этого есть одно глубокое следствие. Если мы знаем оператор эволюции и состояние, которое является результатом этой эволюции, то мы можем воспроизвести начальное состояние, применив оператор, обратный оператору эволюции, к конечному состоянию.

Уравнение (1.30) показывает нам в явном виде, как применять эту инверсию. Замена $\hat{H}$ на $-\hat{H}$ в (1.30) эквивалентна замене t на $-t$, т.е. она обращает эволюцию вспять во времени, в конечном итоге приводя систему к ее начальному состоянию. Это явление, известное как *обратимость времени* (time reversibility) в квантовой механике, имеет множество интересных приложений, например спиновое эхо (подразд. 4.7.4).

В ходе эволюции замкнутой квантовой системы никогда не теряется никакая информация. На языке статистической физики это означает, что энтропия физической системы не увеличивается в ходе ее эволюции.

¹ О функциях операторов см. разд. А.11.

Упражнение 1.46. Для любого состояния $|\psi(t)\rangle$ покажите, что

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (1.31)$$

Уравнение (1.31) называется *уравнением Шрёдингера*. Это еще один способ описать закон эволюции квантовой системы, причем исторически этот способ был первым.

Наша следующая задача — попрактиковаться в нахождении временной эволюции квантовых состояний. Физическая система, которую мы использовали до сих пор, — поляризация фотона — не слишком подходит для этой цели, поскольку энергия фотона равна $\hbar\omega$ вне зависимости от его поляризации. Однако для тренировки (пока мы не познакомимся с другими физическими системами с невырожденным энергетическим спектром) будем предполагать, что при определенных условиях энергия фотона может стать зависимой от поляризации, и посмотрим, как меняется эта поляризация.

Предположим, нам дано начальное состояние $|\psi(0)\rangle$ системы и ее гамильтониан $\hat{H}$ и нужно предсказать состояние этой системы $|\psi(t)\rangle$ в произвольный момент времени. Для этой цели мы можем воспользоваться тремя методами:

- I. Разложить $|\psi(0)\rangle$ в энергетический собственный базис в соответствии с уравнением (1.27), а затем применять простое уравнение эволюции (1.28) к каждому элементу базиса, чтобы найти $|\psi(t)\rangle$.
- II. Вычислить оператор эволюции из (1.30) с помощью приемов, освоенных в разд. А.11, а затем применить этот оператор к начальному состоянию в соответствии с (1.29).
- III. Решить задачу Коши, состоящую из дифференциального уравнения Шрёдингера (1.31) и начального состояния $|\psi(0)\rangle$. В этом подходе уравнение Шрёдингера можно записать в матричной форме

$$\begin{pmatrix} \dot{\psi}_H(t) \\ \dot{\psi}_V(t) \end{pmatrix} = -\frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} H_{HH} & H_{HV} \\ H_{VH} & H_{VV} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_H(t) \\ \psi_V(t) \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

и решить как систему из двух дифференциальных уравнений для пары функций $(\psi_H(t), \psi_V(t))$.

Упражнение 1.47. Напишите уравнение Шрёдингера для следующих гамильтонианов:

a) $\hat{H} = \hbar\omega\hat{\sigma}_z$;

b) $\hat{H} = \hbar\omega\hat{\sigma}_x$.

Для каждого случая найдите состояние поляризации фотона в момент t , если его начальное состояние равно либо $|\psi(0)\rangle = |H\rangle$, либо $|\psi(0)\rangle = |\pm 45^\circ\rangle$, с использованием каждого из трех перечисленных выше методов. Выразите ответ в каноническом базисе.

Упражнение 1.48. Найдите величины t в упр. 1.47, для которых действие оператора эволюции эквивалентно действию полуволновой и четвертьволновой пластинок на угле 0° для части (a) и 45° для части (b) соответственно.

Мы видим, что эволюция фотонов, исследованная в упр. 1.47, эквивалентна тому, что происходит в двулучепреломляющих материалах. Однако физика происходящего не совсем аналогична. В двулучепреломляющих материалах собственные состояния оператора эволюции накапливают разные фазы из-за разных коэффициентов преломления для обыкновенной и необыкновенной поляризации (приложение В). В эволюции же гамильтониана сдвиг фазы объясняется разными энергиями энергетических собственных состояний.

1.11. Задачи

Задача 1.1. Найдите коммутатор $\left[(\hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_y)^2, \hat{\sigma}_z \right]$.

Задача 1.2. Два состояния раскладываются в круговом базисе в соответствии с

$$|\psi\rangle = \frac{2|R\rangle + i|L\rangle}{\sqrt{5}}, \quad |\phi\rangle = \frac{i|R\rangle + 2|L\rangle}{\sqrt{5}}. \quad (1.33)$$

- Покажите, что эти состояния образуют ортонормальный базис.
- Найдите разложения этих состояний в каноническом базисе с использованием двух методов:
 - выразив $|R\rangle$ и $|L\rangle$ в каноническом базисе и подставив в (1.33);
 - найдя матричные формы состояний $|\psi\rangle$, $|\phi\rangle$, $|H\rangle$ и $|V\rangle$ в круговом базисе и использовав скалярное произведение.

- с) Убедитесь, что состояния $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ образуют ортонормальное множество, воспользовавшись скалярным произведением в каноническом базисе.
- д) Разложите состояния $|H\rangle, |V\rangle, |R\rangle, |L\rangle, (|H\rangle + 2i|V\rangle)/\sqrt{5}$ в базисе $\{|\psi\rangle, |\phi\rangle\}$. Напишите ответ как в нотации Дирака, так и в матричной нотации.
- е) Состояния $|H\rangle, |V\rangle, |R\rangle, |L\rangle, (|H\rangle + 2i|V\rangle)/\sqrt{5}$ измерены в базисе $\{|\psi\rangle, |\phi\rangle\}$. Каковы вероятности результатов?

Задача 1.3. Повторите упр. 1.12 для фотона, который находится в случайном статистически смешанном состоянии, описываемом следующим ансамблем:

- а) либо $|+\rangle$ с вероятностью $1/2$, либо $|-\rangle$ с вероятностью $1/2$;
 б) либо $|R\rangle$ с вероятностью $1/2$, либо $|L\rangle$ с вероятностью $1/2$.

Задача 1.4. Рассмотрите модифицированный протокол BB84, в котором Алиса посылает, а Боб анализирует фотон в поляризационном базисе, выбранном случайно, с равной вероятностью для каждого варианта из следующих трех: $(0^\circ, 90^\circ)$, $(30^\circ, 120^\circ)$, $(60^\circ, 150^\circ)$. Найдите долю битовых ошибок, которые увидят Алиса и Боб в случае прямолинейной атаки, в которой Ева перехватывает фотон, измеряет его в одном из трех приведенных выше базисов (выбранном случайно и равновероятно) и отправляет Бобу то, что измерила. Потеря в линии нет, все оборудование идеально.

Задача 1.5. Рассмотрим оператор $\hat{A}$, выполняющий следующее преобразование:

$$|H\rangle \rightarrow \frac{2|H\rangle + i|V\rangle}{\sqrt{5}}; \quad (1.34)$$

$$|+\rangle \rightarrow \frac{2+i}{\sqrt{5}}|+\rangle. \quad (1.35)$$

- а) Как состояние вертикальной поляризации преобразуется оператором $\hat{A}$?¹
- б) Напишите матрицу $\hat{A}$ в каноническом базисе.

¹ В данном случае общая фаза в правой части уравнения (1.35) имеет значение. Дело в том, что нас интересует не только преобразование самого состояния $|+\rangle$, но и вся линейная операция, определенная этим преобразованием. Чтобы увидеть действие этой общей фазы, вы можете попытаться решить часть а), заменив (1.35) на $|+\rangle \rightarrow |+\rangle$.

- с) Выразите $\hat{A}$ в нотации Дирака через внешнее произведение состояний $|H\rangle$ и $|V\rangle$.
- д) Используя тот факт, что для любого линейного оператора $\hat{A}(\lambda|a\rangle + \mu|b\rangle) = \lambda\hat{A}|a\rangle + \mu\hat{A}|b\rangle$, определите, как $\hat{A}$ действует на состояния с круговой поляризацией.
- е) Пользуясь предыдущим результатом, найдите матрицу $\hat{A}$ в базисе круговой поляризации.
- ф) Найдите матрицу $\hat{A}$ в каноническом базисе по его матрице в круговом базисе при помощи разложения (A.26) единичного оператора. Соплассуетс ли ваш результат с результатом пункта б)?
- г) Является ли $\hat{A}$ эрмитовым? Если нет, то каков оператор, сопряженный с ним?

Задача 1.6. Выполните упр. 1.24 с использованием альтернативного метода.

- а) Напишите матрицу оператора волновой пластинки в базисе $\{|\alpha\rangle, |90^\circ + \alpha\rangle\}$
- б) Переведите эту матрицу в канонический базис при помощи разложения (A.26) единичного оператора.

Задача 1.7. Используя уравнение (1.5), покажите, что $\hat{A}_{\text{QWP}}^2(\alpha) = \hat{A}_{\text{HWP}}(\alpha)$, т.е. две четвертьволновые пластинки с параллельными оптическими осями, сложенные вместе, составляют одну полуволновую пластинку.

Задача 1.8. Используя перемножение матриц, покажите, что четвертьволновая пластинка, ориентированная под любым углом, при применении к состоянию круговой поляризации дает состояние линейной поляризации.

Задача 1.9. Найдите базис измерения, связанный с устройством, которое состоит из:

- а) полуволновой пластинки,
- б) четвертьволновой пластинки

с оптической осью, ориентированной под углом α , за которой следует поляризующий светоделитель и два детектора фотонов.

Задача 1.10. Оператор $\hat{A}$ имеет в каноническом базисе следующую матрицу:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 41 & -12i \\ 12i & 34 \end{pmatrix}$$

- а) Представьте этот оператор в виде $\hat{A} = v_1|v_1\rangle\langle v_1| + v_2|v_2\rangle\langle v_2|$, где $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$ — ортонормальный базис. Найдите v_1 , v_2 , а также матрицы $|v_1\rangle$ и $|v_2\rangle$ в каноническом базисе.
- б) Напишите матрицы внешних произведений $|v_{1,2}\rangle\langle v_{1,2}|$ в каноническом базисе и убедитесь явно, что $\hat{A} = v_1|v_1\rangle\langle v_1| + v_2|v_2\rangle\langle v_2|$.
- с) Наблюдаемое $\hat{A}$ измеряется в состоянии круговой поляризации $|R\rangle$. Каковы вероятности возможных результатов?
- д) Вычислите математическое ожидание результата измерения:
 - используя определение математического ожидания из теории вероятностей;
 - используя выражение для квантового среднего.
 Убедитесь, что результаты одинаковы.
- е) Вычислите дисперсию наблюдаемого $\hat{A}$ в состоянии $|R\rangle$.

Задача 1.11. Рассмотрите устройство для измерения поляризации фотона, имеющее следующие свойства:

- всякий раз, когда фотон, линейно поляризованный под углом θ , попадает в устройство, индикатор устройства показывает «2»;
 - всякий раз, когда фотон, линейно поляризованный под углом $\pi/2 + \theta$, попадает в устройство, индикатор устройства показывает «3».
- а) Найдите собственные значения и собственные состояния оператора $\hat{A}$, связанные с наблюдаемым, измеренным этим устройством.
 - б) Найдите матрицы оператора $\hat{A}$ в его собственном базисе и базисе $\{|H\rangle, |V\rangle\}$.
 - с) Найдите вероятность каждого результата измерения для фотона, линейно поляризованного под некоторым углом ϕ .
 - д) Найдите среднее и дисперсию этого измерения.

Задача 1.12. Напишите принцип неопределенности для наблюдаемых $\hat{\sigma}_x$ и $\hat{A} = |R\rangle\langle R| - 2|L\rangle\langle L|$, измеренных в состоянии $|H\rangle$. Убедитесь явно, что он выполняется.

Задача 1.13. Измерения наблюдаемого $\hat{A}$ в состоянии $|H\rangle$ дают результаты 0 либо 1, каждый с вероятностью 1/2. Измерения наблюдаемого $\hat{B}$ в состоянии $|H\rangle$ дают результат 2 с вероятностью 3/4 и результат 4 с вероятностью 1/4. Известно также, что $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar\hat{\sigma}_z$. Найдите верхнюю границу абсолютной величины x .

Задача 1.14. Найдите $e^{i\frac{\pi}{4}(3|H\rangle\langle H| + \sqrt{3}i|H\rangle\langle V| - \sqrt{3}i|V\rangle\langle H| + |V\rangle\langle V|)}$.

Задача 1.15. Атом описывается в некотором базисе $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$ гамильтонианом

$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 3i \\ -3i & 9 \end{pmatrix}.$$

- Найдите собственные состояния и собственные значения энергии.
- Энергия этого атома измеряется в состоянии

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|v_1\rangle + i|v_2\rangle).$$

Найдите вероятности обнаружения каждого собственного значения энергии, а также среднего арифметического и дисперсии этого измерения.

- Первоначально этот атом находится в состоянии $|v_1\rangle$. Найдите его состояние $|\psi(t)\rangle$ в произвольный момент времени t . Сколько пройдет времени, прежде чем атом вновь окажется в состоянии $|v_1\rangle$ (с точностью до фазового множителя)?

Задача 1.16. Предположим, что оператор (1.5a), связанный с полуволновой пластинкой под углом α , соответствует эволюции под некоторым гамильтонианом в течение времени t_0 .

- Найдите матрицу этого гамильтониана в каноническом базисе.
- Убедитесь, что эволюция за время $t_0/2$ породит оператор четвертьволновой пластинки (1.5b).
- Для гамильтониана, найденного в пункте а), и $\alpha = 30^\circ$ решите дифференциальное уравнение Шрёдингера (1.31) для начального состояния $|H\rangle$. Соплассует ли результат для $t = t_0$ с тем, что можно было бы ожидать от физики преобразования поляризации?

Задача 1.17. Квантовая система может быть обнаружена в одном из трех ортогональных состояний $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle$. Эти три состояния образуют ортонормальный базис. $\hat{A}$ представляет собой оператор, который циклически переставляет эти состояния, т.е. $\hat{A}|a\rangle = \hbar\omega|b\rangle$, $\hat{A}|b\rangle = \hbar\omega|c\rangle$, $\hat{A}|c\rangle = \hbar\omega|a\rangle$ (где ω действительно). Гамильтониан равен $\hat{H} = \hat{A} + \hat{A}^\dagger$.

- Найдите собственные значения и собственные состояния энергии системы.

- b) Найдите эволюцию системы, первоначально находившейся в состоянии $|c\rangle$.

Задача 1.18. Атом имеет два энергетических собственных состояния $|v_1\rangle, |v_2\rangle$ с собственными значениями 0 и $3\hbar\omega$ соответственно, где $\omega > 0$.

- а) Напишите матрицу соответствующего гамильтониана $\hat{H}_0$.
- б) В момент времени $t = 0$ включается поле, которое делает гамильтониан равным $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где $\hat{V} = 2i\hbar\omega|v_1\rangle\langle v_2| - 2i\hbar\omega|v_2\rangle\langle v_1|$. Напишите матрицу нового гамильтониана и связанный с ней оператор эволюции в базисе $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$.
- в) В момент времени $t = 0$ атом находится в состоянии $|v_1\rangle$. Найдите все значения времени t , в которые вероятность обнаружения атома в состоянии $|v_2\rangle$ максимальна.

ЗАПУТАННОСТЬ

И лишь тогда, а вовсе не до того, не загодя, не вначале

2.1. Пространство тензорных произведений

2.1.1. Тензорное произведение состояний и запутанные состояния

Рассмотрим две физические системы, разделенные в пространстве и /или во времени, но взаимодействующие между собой или по крайней мере взаимодействовавшие в прошлом. Чтобы исследовать состояния, возникающие после такого взаимодействия, работать с каждой системой в отдельности недостаточно. С ними надлежит иметь дело как с единым гильбертовым пространством, объединяющим гильбертовы пространства, связанные с отдельными системами.

Предположим, например, что у Алисы на Венере имеется¹ горизонтально поляризованный фотон $|H\rangle$, а у Боба на Марсе — фотон в состоянии $|V\rangle$. Тогда мы говорим, что совместное состояние фотонов Алисы и Боба описывается выражением

$$|H\rangle_A \otimes |V\rangle_B \equiv |H\rangle|V\rangle \equiv |HV\rangle. \quad (2.1)$$

Такие совместные состояния называются *тензорными произведениями*².

¹ Это, конечно, фигура речи. Фотоны движутся со скоростью света, и никто не может «иметь» их на протяжении сколько-нибудь продолжительного периода времени. Утверждения о том, что у Алисы и Боба «имеется» фотон, относятся, как правило, к моменту времени непосредственно перед измерением.

² Три эквивалентные части соотношения (2.1) представляют собой альтернативные варианты записи для состояний, представляющих собой тензорные произведения; мы будем считать эти варианты взаимозаменяемыми и использовать попеременно. Обратите внимание: индекс А (Алиса) или В (Боб), отмечающий принадлежность гильбертова пространства, помещается снаружи от кет-скобки. Если эти индексы опущены, то считается, что первый компонент тензорного произведения всегда относится к Алисе, а второй — к Бобу.

Однако совместное гильбертово пространство содержит не только тензорные произведения. Так, поскольку оно включает в себя состояния $|HV\rangle$ и $|VH\rangle$ и является линейным, то должно также содержать состояние, к примеру, $(|HV\rangle - |VH\rangle)/\sqrt{2}$. Это физическое состояние, поскольку его норма равна единице. Но его уже нельзя интерпретировать как тензорное произведение, т.е. комбинацию фотона Алисы в одном состоянии и фотона Боба в другом. Это уже *нелокальная суперпозиция*, или *запутанное* (entangled) состояние. А именно квантовая суперпозиция двух ситуаций: в одной из них у Алисы горизонтальный фотон, а у Боба вертикальный, в другой — наоборот. Если они измерят поляризацию своих фотонов в каноническом базисе, то обнаружат ортогональные поляризации.

Мы видим, что объединение двух гильбертовых пространств порождает совершенно новый класс состояний, который дает начало новой физике — физике *нелокальных квантовых явлений*. Это основная тема настоящей главы. Некоторые из таких явлений не только немислимы с точки зрения классической физики, но и выглядят противоречащими фундаментальному здравому смыслу.

Прежде чем мы начнем изучать эту новую физику, нам придется заточить карандаши и обновить наш теоретический аппарат, чтобы его можно было применять к таким составным пространствам. Мы будем все рассуждения проводить для *двусоставных* (bipartite) пространств, но они могут быть расширены прямолинейным образом на системы с тремя и более частями.

Пространство тензорных произведений (мы также будем применять термин «*составное пространство*») $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$ гильбертовых пространств $\mathbb{V}_A$ и $\mathbb{V}_B$ есть гильбертово пространство, состоящее из элементов $|a\rangle \otimes |b\rangle$ (где $|a\rangle \in \mathbb{V}_A$ и $|b\rangle \in \mathbb{V}_B$) и их линейных комбинаций. Вот правила, которым подчиняются операции в этом пространстве:

1. Умножение на число:

$$\lambda (|a\rangle \otimes |b\rangle) = (\lambda |a\rangle) \otimes |b\rangle = |a\rangle \otimes (\lambda |b\rangle). \quad (2.2)$$

2. Распределительный закон:

$$(|a_1\rangle + |a_2\rangle) \otimes |b\rangle = |a_1\rangle \otimes |b\rangle + |a_2\rangle \otimes |b\rangle; \quad (2.3a)$$

$$|a\rangle \otimes (|b_1\rangle + |b_2\rangle) = |a\rangle \otimes |b_1\rangle + |a\rangle \otimes |b_2\rangle. \quad (2.3b)$$

3. Скалярное произведение двух состояний $|a\rangle \otimes |b\rangle$ и $|a'\rangle \otimes |b'\rangle$ в $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$ задается формулой

$$\langle ab | a'b' \rangle = \langle a | a' \rangle \langle b | b' \rangle. \quad (2.4)$$

Элементы $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$, которые могут быть представлены в виде тензорного произведения $|a\rangle \otimes |b\rangle$, называют *разделимыми*, или *сепарабельными* (separable). Остальные *запутаны*.

Упражнение 2.1. Для любых двух векторов $|a\rangle \in \mathbb{V}_A$ и $|b\rangle \in \mathbb{V}_B$ покажите, что $|\text{zero}\rangle_{\mathbb{V}_A} \otimes |b\rangle = |a\rangle \otimes |\text{zero}\rangle_{\mathbb{V}_B} = |\text{zero}\rangle_{\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B}$.

Упражнение 2.2. Если заданы ортонормальные базисы $\{|v_i\rangle\}_{i=1}^N$ и $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^M$ в $\mathbb{V}_A$ и $\mathbb{V}_B$ соответственно, постройте ортонормальный базис в $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$. Какова размерность $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$?

Ответ: множество тензорных произведений $\{|v_i\rangle \otimes |w_j\rangle\}$ есть ортонормальный базис. Размерность составного пространства есть произведение NM размерностей его компонентов.

Например, гильбертово пространство, представляющее поляризации двух фотонов, четырехмерно. Канонический ортонормальный базис в этом пространстве таков: $\{|HH\rangle, |HV\rangle, |VH\rangle, |VV\rangle\}$.

Упражнение 2.3. Найдите разложение в каноническом базисе для состояния, в котором Алиса имеет фотон, поляризованный под 30° , а фотон Боба находится в состоянии правой круговой поляризации. Напишите матричное представление для этого состояния. Разделимое оно или запутанное?

Упражнение 2.4. Найдите скалярное произведение $\langle \Pi | \Omega \rangle$, где:

- a) $|\Pi\rangle = 5 |HH\rangle + 6i |R-\rangle$ и $|\Omega\rangle = 2 |+L\rangle + 3 |RR\rangle$;
- b) $|\Pi\rangle = i(2 |H\rangle + i |V\rangle) \otimes |R\rangle$ и $|\Omega\rangle = (2i |H\rangle - 3i |V\rangle) \otimes |+\rangle$.

Упражнение 2.5^s. Образуют ли множества

- a) $\{|++\rangle, |+-\rangle, |+-\rangle, |--\rangle\}$,
- b) $\{|RR\rangle, |RL\rangle, |LR\rangle, |LL\rangle\}$,
- c) $\{|H-\rangle, |H+\rangle, |V-\rangle, |V+\rangle\}$,
- d) $\{|H-\rangle, |H+\rangle, |VR\rangle, |VL\rangle\}$,
- e) $\{|H-\rangle, |HH\rangle, |VR\rangle, |VL\rangle\}$

базисы в двухфотонном гильбертовом пространстве? Ортонормальны ли эти базисы?

Ответ: все пять множеств образуют базисы; все они, кроме последнего, ортонормальны.

Упражнение 2.6. Покажите, что *белловские состояния*

$$|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle + |VH\rangle) \quad (2.5a)$$

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle - |VH\rangle) \quad (2.5b)$$

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HH\rangle + |VV\rangle) \quad (2.5c)$$

$$|\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HH\rangle - |VV\rangle) \quad (2.5d)$$

запутаны.

Упражнение 2.7. Покажите, что эти четыре белловских состояния образуют ортонормальный базис.

Упражнение 2.8. Перепишите белловские состояния (2.5) в диагональном базисе.

Упражнение 2.9. Пусть $|\theta\rangle$ — состояние линейной поляризации под углом θ к горизонтали. Покажите, что для любого θ состояние $|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle - |VH\rangle)$ может быть выражено в виде:

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\theta\rangle \otimes \left| \frac{\pi}{2} + \theta \right\rangle - \left| \frac{\pi}{2} + \theta \right\rangle \otimes |\theta\rangle \right). \quad (2.6)$$

Это означает, что состояние $|\Psi^-\rangle$ *изотропно*, т. е. остается неизменным вне зависимости от того, какое направление мы определим как горизонтальное (при условии что оно перпендикулярно направлению движения фотонов, разумеется). Этим свойством из всех белловских состояний обладает только $|\Psi^-\rangle$.

2.1.2. Измерения в составных пространствах

Постулат о квантовых измерениях применим к тензорным произведениям гильбертовых пространств в обычном режиме. Базис измерения может состоять как из разделимых, так и из запутанных состо-

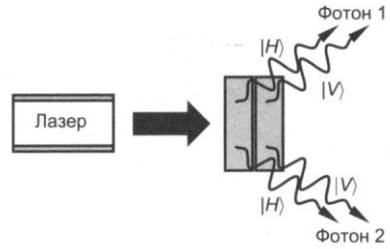
Отступление 2.1. Как создать запутанное состояние?

Рассмотрим параметрическое рассеяние (отступление 1.6) на последовательности двух нелинейных кристаллов, как показано на рисунке*. Кристаллы построены таким образом, что первый из них выдает только пары горизонтально поляризованных фотонов $|H\rangle \otimes |H\rangle$, а второй — только пары вертикально поляризованных $|V\rangle \otimes |V\rangle$. Вероятность появления пары мала в обоих кристаллах. Тогда любая пара, если она есть, может находиться либо в состоянии $|HH\rangle$, либо в состоянии $|VV\rangle$. Поскольку расстояние между кристаллами постоянно, постоянна и оптическая фаза между этими двумя парами. Так что состояние двух фотонов, выданных кристаллами, есть

$$|HH\rangle + e^{i\varphi}|VV\rangle.$$

Выбирая величину φ , можно получить любое из белловских состояний $|\Phi^+\rangle$ или $|\Phi^-\rangle$. Чтобы превратить эти состояния в $|\Psi^+\rangle$ или $|\Psi^-\rangle$, достаточно поместить в один из выходных каналов полуволновую пластинку.

* В первый раз эта схема была предложена и реализована в: P. G. Kwiat, E. Waks, A. G. White, I. Appelbaum, and P. H. Eberhard, *Ultrabright source of polarization-entangled photons*, Physical Review A **60**, R773 (R) (1999).



аний. Если базис построен в виде тензорного произведения базисов в V_A и V_B , как в упр. 2.2, то Алисе и Бобу нужно просто провести измерения в этих базисах в своих гильбертовых пространствах (рис. 2.1).

Упражнение 2.10. Для двух фотонов, приготовленных в состоянии $|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle - |VH\rangle)$, найдите вероятность обнаружить состояние:

- $|R\rangle \otimes |-30^\circ\rangle$;
- $\frac{1}{3}(|HV\rangle + 2|VH\rangle + 2|VV\rangle)$.

Считаем, что измерение выполняется в некотором ортонормальном базисе, в который входит интересующее нас состояние.

Упражнение 2.11. Алиса и Боб имеют общее состояние

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle + e^{-i\varphi}|VH\rangle).$$

- а) Найдите вероятности всех результатов, если Алиса и Боб измерят $|\Psi\rangle$ в (1) каноническом и (2) диагональном $\{|+\rangle, |-\rangle, |-\rangle, |-\rangle\}$ базисах.
- б) Алиса и Боб имеют общую единственную копию одного из белловских состояний, $|\Psi^-\rangle$ или $|\Psi^+\rangle$, но не знают, какого именно. Могут ли они выяснить это при помощи измерений в каноническом базисе? А в диагональном?

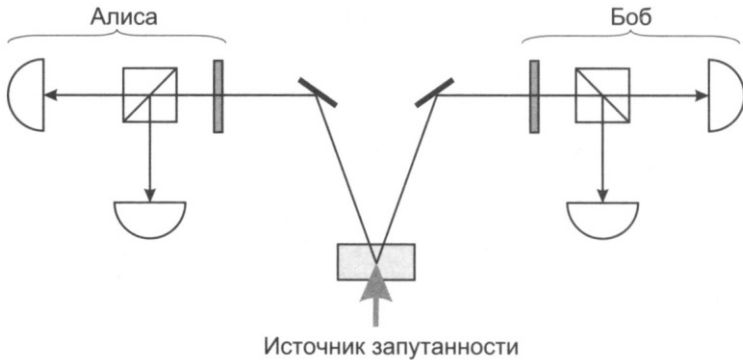


Рис. 2.1. Измерение поляризованной запутанной фотонной пары в базисе, состоящем из тензорных произведений. Устройства и у Алисы, и у Боба включают в себя волновые пластинки (одну или две), поляризующий светоделитель и два детектора единичных фотонов.

Важный вывод, который мы можем сделать из этого упражнения, состоит в том, что, хотя запутанные состояния могут возникать только при взаимодействии двух физических систем, их измерение (например, с целью отличить одно от другого) не требует не только взаимодействия, но даже проекции на запутанные состояния. Более того, можно провести полную квантовую томографию квантового состояния в составном гильбертовом пространстве при помощи измерений в базисах, содержащих только разделимые состояния. Мы покажем это строго в конце основного текста (упр. 5.78).

Упражнение 2.12*. Предложите процедуру выполнения измерения в базисе $\{|H-\rangle, |H+\rangle, |V-\rangle, |V+\rangle\}$.

Подсказка: считайте, что Алиса и Боб связаны классическим каналом связи.

2.1.3. Тензорное произведение операторов

Расширим понятие тензорного произведения на операторы. Это расширение относительно прямолинейно: в операторе $\hat{A} \otimes \hat{B}$ компонент $\hat{A}$ действует на гильбертово пространство Алисы, а компонент $\hat{B}$ — на гильбертово пространство Боба. Приведем формальное определение и выполним несколько упражнений.

Тензорное произведение оператора $\hat{A}$, который действует на $\mathbb{V}_A$, и оператора $\hat{B}$, который действует на $\mathbb{V}_B$, определяется как линейный оператор $\hat{A} \otimes \hat{B}$ на $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$, такой, что для любого вектора $|\Psi\rangle = \sum_i \lambda_i |a_i\rangle \otimes |b_i\rangle$

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})|\Psi\rangle = \sum_i \lambda_i (\hat{A}|a_i\rangle) \otimes (\hat{B}|b_i\rangle). \quad (2.7)$$

Упражнение 2.13. Выразите матрицу тензорного произведения оператора $\hat{C} = \hat{A} \otimes \hat{B}$ в базисе $\{|v_i\rangle \otimes |w_j\rangle\}$ через матрицы операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ в соответствующих базисах $\{|v_i\rangle\}$ и $\{|w_j\rangle\}$.

Ответ: для каждого элемента матрицы¹

$$C_{ij'} = \langle v_i w_j | \hat{C} | v_i w_j \rangle = A_{ii'} B_{jj'}. \quad (2.8)$$

Упражнение 2.14. Найдите математическое ожидание и неопределенность оператора $\hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_y$ в состоянии $|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle - |VH\rangle)$.

Упражнение 2.15[§]. Предположим, что $|v\rangle$ и $|w\rangle$ — собственные состояния операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ с собственными значениями v и w соответственно. Покажите, что состояние $|v\rangle \otimes |w\rangle$ является собственным состоянием оператора $\hat{A} \otimes \hat{B}$ с собственным значением vw .

Упражнение 2.16. Покажите, что для операторов $\hat{A}_1, \hat{A}_2$ в $\mathbb{V}_A$ и $\hat{B}_1, \hat{B}_2$ в $\mathbb{V}_B$

$$\hat{A}_1 \hat{A}_2 \otimes \hat{B}_1 \hat{B}_2 = (\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_1) (\hat{A}_2 \otimes \hat{B}_2).$$

¹ Как правило, мы будем использовать интуитивно понятные двухиндексные обозначения для матриц состояний и операторов в составных гильбертовых пространствах. То есть каждый элемент $|v_i\rangle \otimes |w_j\rangle$ базиса тензорного произведения идентифицируется парой индексов (i, j) , как в (2.8). Это означает, в частности, что матрица оператора имеет четыре, а не два, индекса.

Упражнение 2.17^s. Покажите, что тензорное произведение операторов не может сделать запутанное состояние из разделимого.

Упражнение 2.18. Для двух операторов внешнего произведения $\hat{A} = |a_1\rangle\langle a_2|$ и $\hat{B} = |b_1\rangle\langle b_2|$ в $\mathbb{V}_A$ и $\mathbb{V}_B$ соответственно покажите, что

$$\hat{A} \otimes \hat{B} = |a_1 b_1\rangle\langle a_2 b_2|. \quad (2.9)$$

Понятие о тензорном произведении операторов красиво иллюстрируется таким значительным результатом, как *теорема о запрете клонирования* (no-cloning theorem)¹. Предположим, у нас имеется два объекта, представленные идентичными гильбертовыми пространствами $\mathbb{V}_A$ и $\mathbb{V}_B$, причем объект, представленный $\mathbb{V}_A$, находится в некотором произвольном квантовом состоянии $|a\rangle$. *Квантовое клонирование* — гипотетическая операция, которая создавала бы копию $|a\rangle$ в $\mathbb{V}_B$, сохраняя при этом оригинал в $\mathbb{V}_A$. Иными словами, она соответствует некоторому оператору на $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$, такому, что для любого $|a\rangle \in \mathbb{V}_A$ и некоторого $|0\rangle \in \mathbb{V}_B$

$$|a\rangle \otimes |0\rangle \rightarrow |a\rangle \otimes |a\rangle. \quad (2.10)$$

Упражнение 2.19. Покажите, что квантовое клонирование в том виде, как оно определено выше, невозможно.

Подсказка: воспользуйтесь тем фактом, что любая физически возможная эволюция в квантовой механике описывается линейным оператором.

Сопряженное пространство тензорного произведения определяется аналогично тому, как мы определили прямое, т. е. для любого состояния тензорного произведения $|a\rangle \otimes |b\rangle^2$

$$\text{сопр}(|a\rangle \otimes |b\rangle) \equiv \text{сопр}(|a\rangle) \otimes \text{сопр}(|b\rangle) \equiv {}_A\langle a| \otimes {}_B\langle b| \equiv \langle ab|. \quad (2.11)$$

Упражнение 2.20. Покажите, что для $\hat{A}$ в $\mathbb{V}_A$ и $\hat{B}$ в $\mathbb{V}_B$: $(\hat{A} \otimes \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger \otimes \hat{B}^\dagger$.

¹ W. Wootters, W. Zurek, A Single Quantum Cannot be Cloned, Nature 299, 802 (1982); D. Dieks, Communication by EPR devices, Physics Letters A 92, 271 (1982).

² Порядок символов внутри бра-вектора такой же, как и внутри кет-вектора: первый символ относится к Алисе, второй — к Бобу. Индексы A и B, указывающие на конкретные гильбертовы пространства, если они есть, обычно помещаются слева от бра-векторов.

Упражнение 2.21. Покажите, что:

- тензорное произведение двух эрмитовых операторов эрмитово;
- тензорное произведение двух унитарных операторов унитарно.

2.1.4. Локальные операторы

Операторы тензорного произведения вида $\hat{A} \otimes \hat{1}$ или $\hat{1} \otimes \hat{B}$ называются *локальными операторами*, потому что действуют только на один компонент гильбертовых пространств. Примером может служить волновая пластинка, которая располагается на пути фотона Алисы и поворачивает его поляризацию, оставляя при этом фотон Боба нетронутым. Локальные операторы часто записываются в упрощенной нотации: пишут просто $\hat{A}$ вместо $\hat{A} \otimes \hat{1}$ и $\hat{B}$ вместо $\hat{1} \otimes \hat{B}$.

Упражнение 2.22. Покажите, что локальный унитарный оператор не может сделать разделимое состояние запутанным, и наоборот.

Упражнение 2.23. Предположим, что $|a\rangle$ — собственное состояние оператора $\hat{A}$ на гильбертовом пространстве Алисы с собственным значением a . Покажите, что для любого вектора $|b\rangle$ в гильбертовом пространстве Боба вектор $|ab\rangle$ есть собственное состояние локального оператора $\hat{A} \otimes \hat{1}$ с тем же собственным значением.

Упражнение 2.24. Пусть $\hat{A}$ и $\hat{B}$ — наблюдаемые в пространствах Алисы и Боба соответственно. Двусоставное состояние $|\Psi\rangle$ является собственным состоянием $\hat{A} \otimes \hat{B}$ с собственным значением x , но не является собственным состоянием локальных операторов $\hat{A}$ или $\hat{B}$.

- Приведите пример такой ситуации.
- Покажите, что всякий раз, когда Алиса измеряет $\hat{A}$, а Боб — $\hat{B}$ в состоянии $|\Psi\rangle$, произведение полученных ими величин равно x .

Подсказка: воспользуйтесь упр. А.66.

Упражнение 2.25. Предположим, Алиса и Боб располагают белловским состоянием $|\Psi^-\rangle$. Алиса производит локально над своим кубитом операцию, соответствующую одному из трех операторов Паули. Покажите, что:

- $(\hat{\sigma}_z)_A |\Psi^-\rangle = |\Psi^+\rangle$;
- $(\hat{\sigma}_x)_A |\Psi^-\rangle = -|\Phi^-\rangle$;
- $(\hat{\sigma}_y)_A |\Psi^-\rangle = i|\Phi^+\rangle$.

Данный результат имеет интересное приложение в квантовом протоколе связи, известном как *квантовое сверхплотное кодирование* (quantum superdense coding, см. отступление 2.2).

Отступление 2.2. Граница Холево и квантовое сверхплотное кодирование

Предположим, что Алиса и Боб связаны неким каналом связи (например, оптоволоконным). Алиса хочет послать Бобу классическое сообщение из n бит, зашифровав информацию в некотором наборе квантовых частиц, каждая из которых несет в себе кубит*. Сможет ли она достичь своей цели, используя меньше, чем n квантовых частиц?

Простое рассуждение показывает, что на этот вопрос следует ответить отрицательно. В самом деле, n кубитов соответствуют 2^n -мерной квантовой системе (упр. 2.2). Как бы Алиса ни кодировала свои биты в кубитах, Боб при измерении этой системы сможет получить не более 2^n возможных результатов, так что полное количество различных сообщений, которые можно зашифровать в n кубитов, равно 2^n . Емкость n бит классической информации точно такая же. Это ограничение — пример так называемой границы Холево в квантовой информатике.

Однако если у Алисы и Боба есть заранее приготовленные общие запутанные кубиты, то границу Холево можно обойти при помощи протокола, известного как *квантовое сверхплотное кодирование*. Предположим, Алиса хочет послать Бобу два бита классической информации. Протокол тогда выглядит следующим образом:

1. Алиса и Боб заранее готовят общее состояние $|\Psi\rangle$ из двух кубитов (к примеру, фотонов).
2. В зависимости от значения своих двух битов Алиса производит над своим кубитом операцию $\hat{I}$, $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ или $\hat{\sigma}_z$, превращая таким образом общее запутанное состояние в одно из четырех белловских состояний, как в упр. 2.25. Реализовать это можно при помощи волновых пластинок (см. упр. 1.26).
3. Алиса отправляет свой кубит Бобу.
4. Теперь у Боба два кубита. Он измеряет их в базисе Белла и получает одно из четырех состояний, что соответствует двум классическим битам.

Таким способом Алиса может передать два бита классической информации, переслав всего один кубит.

* Напоминание: кубит есть любое двумерное гильбертово пространство. Примером кубита может служить поляризация фотона.

Упражнение 2.26. Предположим, что гамильтониан в $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$ задается суммой

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B$$

гамильтонианов, которые представляют собой локальные операторы в своих пространствах-компонентах. Покажите, что:

а) если начальное состояние в $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$ есть тензорное произведение

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_A(0)\rangle \otimes |\psi_B(0)\rangle,$$

то в ходе шрёдингеровой эволюции это состояние остается тензорным произведением

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_A(t)\rangle \otimes |\psi_B(t)\rangle,$$

где каждое $|\psi_{A,B}(t)\rangle$ есть решение уравнения Шрёдингера для соответствующего гамильтониана $\hat{H}_{A,B}$;

б) если некоторые $|\psi_A\rangle$ и $|\psi_B\rangle$ являются собственными состояниями своих гамильтонианов с энергиями E_A и E_B соответственно, то состояние $|\Psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ в $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$ есть собственное состояние полного гамильтониана $\hat{H}$ с энергией $E = E_A + E_B$;

с) * любое собственное состояние гамильтониана, соответствующего энергии E , может быть записано как линейная комбинация произведений вида $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$, где $|\psi_{A,B}\rangle$ — собственные состояния гамильтониана для отдельных гильбертовых пространств, $\hat{H}_{A,B} |\psi_{A,B}\rangle = E_{A,B} |\psi_{A,B}\rangle$, с $E = E_A + E_B$.

2.2. Локальные измерения запутанных состояний

Как мы видели в последнем упражнении, расширение постулата об измерениях на двусоставные системы достаточно прямолинейно, если два наблюдателя производят измерения на своих гильбертовых пространствах одновременно. Однако, поскольку эти два наблюдателя независимы, может оказаться, что только один из них (например, Алиса) производит измерение, тогда как другой (Боб) этого не делает. Мы называем это *локальным измерением*.

2.2.1. Удаленное приготовление состояния

Предположим, что Алиса измеряет состояние $|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle - |VH\rangle)$ в каноническом базисе. Поскольку $|\Psi^-\rangle$ содержит состояния $|HV\rangle$ и $|VH\rangle$ с амплитудами $\pm 1/\sqrt{2}$, Алиса с равной вероятностью ($\text{pr}_H = \text{pr}_V = 1/2$) увидит либо горизонтальную, либо вертикальную поляризацию. Если она видит горизонтально поляризованный фотон,

то мы можем с уверенностью утверждать, что фотон Боба вертикально поляризован, так что его состояние становится $|V\rangle$, и наоборот.

Такая корреляция сама по себе не так уж удивительна. Даже в обычной жизни мы можем представить себе игру, в которой Алисе дается одна туфля из пары, а Бобу — вторая. Каждая туфля упакована в непрозрачную коробку, так что их «ориентацию» увидеть нельзя. Затем Алиса летит к Венере, а Боб — к Марсу, где они открывают свои коробки. Предположим, Алиса обнаруживает в своей коробке левую туфлю. При этом она мгновенно узнает, что у Боба в коробке лежит правая туфля, хотя того при этом отделяют от нее миллионы километров.

Но свойства квантовых суперпозиций идут дальше этой простой картины. Помимо поляризационных корреляций в них существует определенное *фазовое соотношение* (*когерентность*), которое обозначается знаком «минус» между $|HV\rangle$ и $|VH\rangle$. Этим состояние $(|HV\rangle - |VH\rangle)/\sqrt{2}$ отличается от, скажем, $(|HV\rangle + |VH\rangle)/\sqrt{2}$, хотя оба они демонстрируют схожие корреляции при измерении в каноническом базисе. Чтобы увидеть следствия этого фазового соотношения, попытайтесь решить следующую задачу.

Упражнение 2.27. Предположим, что Алиса и Боб располагают состоянием $|\Psi^-\rangle$. Алиса измеряет свою часть состояния в базисе $\{|\theta\rangle, |\pi/2 + \theta\rangle\}$. Покажите, что:

- если Алиса обнаруживает $|\theta\rangle$, то состояние Боба становится $|\pi/2 + \theta\rangle$;
- если Алиса обнаруживает $|\pi/2 + \theta\rangle$, то состояние Боба становится $|\theta\rangle$;
- каждый из этих результатов наблюдается с вероятностью $1/2$.

Подсказка: используйте свойство изотропности состояния $|\Psi^-\rangle$ (упр. 2.9).

Это поистине замечательный результат. Выбрав угол наклона базиса измерения θ , Алиса может удаленно приготовить произвольное состояние линейной поляризации (с точностью до $\pm 90^\circ$) в локации Боба. Так происходит несмотря на то, что Алиса и Боб находятся, возможно, в миллионах километров друг от друга и не имеют возможности общаться между собой. Более того, все происходит мгновенно, т. е. быстрее скорости света!

На первый взгляд, такое *удаленное приготовление состояния* (remote state preparation) откровенно противоречит специальной тео-

рии относительности и, мало того, принципу *причинности* (causality), который правит всей известной нам физикой и следует из самого того, что ни на есть фундаментального здравого смысла. Как можно менять что-то мгновенно на огромном расстоянии от себя, да еще при отсутствии какой-либо возможности взаимодействовать с той локацией?

Наверное, каждый прилежный студент-физик в этот момент первым делом спросит, был ли данный вывод проверен экспериментально. Ответ положительный. Чтобы провести этот эксперимент, исследователь многократно подготавливает состояние $|\Psi\rangle$ и проводит измерение Алисы, все время в одном и том же базисе. Каждый раз, когда Алиса обнаруживает, скажем, $|\theta\rangle$, экспериментатор измеряет поляризацию фотона Боба. По статистике этих измерений он может восстановить искомое состояние при помощи квантовой томографии (см. упр. 1.15) со сколь угодно высокой точностью.

За последнюю четверть века физики исследовали самые разные варианты эффекта удаленного приготовления состояния. Некоторые из экспериментов были организованы так, что лаборатории Алисы и Боба разделялись несколькими километрами, а измерения происходили гарантированно в пределах пространственноподобного интервала, чтобы исключить даже теоретическую возможность для Алисы повлиять на состояние Боба посредством каких бы то ни было известных в природе взаимодействий. Все эти эксперименты недвусмысленно подтверждают верность квантовых предсказаний.

Но как же примирить полученные данные с причинностью? Чтобы ответить на данный вопрос, дадим сначала формальное описание локального измерения.

2.2.2. Частичное скалярное произведение

Предположим, что Алиса и Боб располагают некоторым запутанным состоянием и что Алиса проводит локальное измерение своей части этого состояния в некотором базисе. Каковы вероятности возможных результатов и какое состояние будет удаленно подготовлено в локации Боба в случае каждого результата? Прежде чем ответить на этот вопрос в общем случае, рассмотрим пример. Пусть общее состояние

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{3}(|HH\rangle - 2|HV\rangle + 2|VV\rangle), \quad (2.12)$$

и предположим, что Алиса проводит измерение в диагональном базисе.

Упражнение 2.28. Перепишите состояние (2.12), выразив векторы состояния, соответствующие фотону Алисы, в диагональном базисе.

Ответ:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{18}}(|+\rangle \otimes |b_+\rangle + \sqrt{17}|- \rangle \otimes |b_-\rangle), \quad (2.13)$$

где

$$|b_+\rangle = |H\rangle, \quad |b_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{17}}(|H\rangle - 4|V\rangle)$$

суть нормированные векторы в гильбертовом пространстве Боба.

Поскольку векторы $|+\rangle$ и $|-\rangle$ ортогональны, ортогональны также $|+\rangle \otimes |b_+\rangle$ и $|-\rangle \otimes |b_-\rangle$ в соответствии с уравнением (2.4). Это означает, что мы можем построить в $V_A \otimes V_B$ ортонормальный базис, содержащий упомянутые состояния в качестве элементов. Если мы измерим $|\Psi\rangle$ в этом базисе, то получим $|+\rangle \otimes |b_+\rangle$ с вероятностью $\frac{1}{18}$ и $|-\rangle \otimes |b_-\rangle$ с вероятностью $\frac{17}{18}$. Но это, в свою очередь, означает, что если *только Алиса* будет проводить измерение на своем фотоне, то она увидит состояние $|+\rangle$ с вероятностью $\frac{1}{18}$ и $|-\rangle$ с вероятностью $\frac{17}{18}$. Действительно, если Алиса наблюдает у себя $|+\rangle$, то состояние фотона Боба с *определенностью* становится $|b_+\rangle$, а если Алиса наблюдает $|-\rangle$, оно становится $|b_-\rangle$.

Мы видим, что для ответа на вопрос, поставленный в начале этого подраздела, достаточно переписать начальное запутанное состояние в виде линейной комбинации таких тензорных произведений, в каждом из которых компонент Алисы представляет собой элемент ее измерительного базиса. Проведем то же рассуждение в более общем виде.

Предположим, начальное состояние

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} \Psi_{ij} |v_i\rangle \otimes |w_j\rangle, \quad (2.14)$$

где $\{|v_i\rangle\}$ — ортонормальный базис, в котором Алиса будет проводить свое измерение, а $\{|w_j\rangle\}$ — некоторый ортонормальный базис в гильбертовом пространстве Боба. Перепишем это в виде:

$$|\Psi\rangle = \sum_i \frac{1}{\mathcal{N}_i} |v_i\rangle \otimes |b_i\rangle, \quad (2.15)$$

где $|b_i\rangle = \mathcal{N}_i \sum_j \Psi_{ij} |w_j\rangle$ есть вектор в гильбертовом пространстве Боба и

$$\mathcal{N}_i = \frac{1}{\sqrt{\sum_j |\Psi_{ij}|^2}} \quad (2.16)$$

есть нормирующий множитель, такой что $\| |b_i\rangle \| = 1$ для любого i (в сумме (2.15) мы опускаем слагаемые с $\sum_j \Psi_{ij} |w_j\rangle = 0$, так что все $\mathcal{N}_i$ конечны).

Таким образом, мы выразили состояние, которое предстоит измерить, в виде суммы ортогональных компонентов $|v_i\rangle \otimes |b_i\rangle$. Амплитуды этих компонентов равны $1/\mathcal{N}_i$, так что вероятность, с которой Алиса увидит соответствующий $|v_i\rangle$, равна $\text{pr}_{A,i} = 1/\mathcal{N}_i^2$. Всякий раз, когда это происходит, система Боба принимает соответствующее состояние $|b_i\rangle$.

Упражнение 2.29. Для физического состояния $|\Psi\rangle$ покажите, что в (2.15) $\sum_i (1/\mathcal{N}_i^2) = 1$.

Упражнение 2.30. Для состояния $|\Psi\rangle = \mathcal{N}(|RV\rangle + |H+\rangle)$:

- найдите множитель $\mathcal{N}$ такой, при котором $|\Psi\rangle$ нормировано;
- представьте это состояние в виде (2.15), где $\{|v_i\rangle\}$ — канонический базис;
- найдите вероятности возможных результатов при проведении Алисой локального измерения в каноническом базисе и напишите удаленно приготовленное состояние фотона Боба для каждого из результатов Алисы.

Мы разработали метод предсказания результатов локальных измерений на запутанном состоянии. Этот метод функционален, но несколько неуклюж, так что мы сейчас введем понятие, которое позволит нам существенно упростить процедуру.

Частичное скалярное произведение (partial inner/scalar product) локального состояния $|a\rangle$ в гильбертовом пространстве $\mathbb{V}_A$ и двусоставного состояния $|\Psi\rangle = \sum_{ij} \Psi_{ij} |v_i\rangle |w_j\rangle$ в гильбертовом пространстве $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$ (где $\{|v_i\rangle\}$ и $\{|w_j\rangle\}$ — ортонормальные базисы в $\mathbb{V}_A$ и $\mathbb{V}_B$ соответственно) есть состояние в гильбертовом пространстве $\mathbb{V}_B$, заданное

$$\langle a|\Psi\rangle \equiv \sum_{ij} \Psi_{ij} \langle a|v_i\rangle |w_j\rangle; \quad (2.17a)$$

$$\langle \Psi|a\rangle \equiv \sum_{ij} \Psi_{ij}^* \langle v_i|a\rangle \langle w_j|. \quad (2.17b)$$

Определение для частичного скалярного произведения $|\Psi\rangle$ и локального состояния в пространстве $\mathbb{V}_B$ дается аналогично.

Упражнение 2.31. Для $|\psi\rangle = 2|H\rangle + i|\mathbb{V}\rangle$ найдите ${}_B\langle\psi|\Omega\rangle$ и $\langle\Pi|\psi\rangle_A$, где $|\Omega\rangle = 2|HH\rangle + 3|H\mathbb{V}\rangle + 4|\mathbb{V}H\rangle$, $|\Pi\rangle = (2|H\rangle + i|\mathbb{V}\rangle) \otimes (i|H\rangle - |\mathbb{V}\rangle)$, а индексы A и B на состояниях $|\psi\rangle$ указывают, что оно локализовано в пространстве Алисы или Боба соответственно.

Упражнение 2.32. Покажите, что для любого разделимого состояния $|ab\rangle \in \mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$ и любого состояния $|a'\rangle \in \mathbb{V}_A$

$$\langle a' | ab \rangle = \langle a' | a \rangle | b \rangle. \quad (2.18)$$

Упражнение 2.33. Предположим, что $|\Psi\rangle$ — состояние в пространстве тензорных произведений, а $|a\rangle$ и $|b\rangle$ — состояния в пространствах Алисы и Боба соответственно. Покажите, что

$$\langle a | (\langle b | \Psi \rangle) = \langle b | (\langle a | \Psi \rangle) = \langle ab | \Psi \rangle. \quad (2.19)$$

Упражнение 2.34. Покажите, что для любых двух ортонормальных базисов $\{|v_i\rangle\} \otimes \{|w_j\rangle\}$ и $\{|v'_i\rangle\} \otimes \{|w'_j\rangle\}$ в $\mathbb{V}_A \otimes \mathbb{V}_B$ локального состояния $|a\rangle \in \mathbb{V}_A$ и двусоставного состояния

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} \Psi_{ij} |v_i\rangle \otimes |w_j\rangle = \sum_{ij} \Psi'_{ij} |v'_i\rangle \otimes |w'_j\rangle \quad (2.20)$$

частичное скалярное произведение $\langle a | \Psi \rangle$ не зависит от выбора базиса, т. е.

$$\sum_{ij} \Psi_{ij} \langle a | v_i \rangle |w_j\rangle = \sum_{ij} \Psi'_{ij} \langle a | v'_i \rangle |w'_j\rangle. \quad (2.21)$$

Упражнение 2.35. Покажите, что в уравнении (2.15):

- a) $|b_i\rangle = \mathcal{N}_i \langle v_i | \Psi \rangle$;
- b) $\| \langle v_i | \Psi \rangle \| = 1/\mathcal{N}_i$.

Последнее упражнение предлагает прямолинейный способ вычислить разложение (2.15) для заданного состояния и базиса измерения Алисы и, следовательно, вычислить также результаты локальных измерений. И в самом деле, частичное скалярное произведение дает не только состояние $|b_i\rangle$, которое будет приготовлено удаленно в локации Боба, но и вероятность каждого результата $\text{pr}_{A,i} = 1/N_i^2$ на стороне Алисы.

Мы можем рассматривать этот результат как обобщение постулата квантовой физики об измерениях на локальные измерения. Резюмируем его. Локальное измерение Алисы на двусоставном состоянии $|\Psi\rangle$ в базисе $\{|v_i\rangle\}$ вызовет коллапс $|\Psi\rangle$ на одно из случайно выбранных состояний $\mathcal{N}_i |v_i\rangle \otimes \langle v_i | \Psi\rangle$ с вероятностью

$$\text{pr}_{A,i} = \langle \Psi | v_i \rangle \langle v_i | \Psi \rangle. \quad (2.22)$$

Это можно переформулировать на языке проекционных операторов (разд. 1.8): измерение Алисы превращает состояние $|\Psi\rangle$ в множество ненормированных состояний $\{\hat{\Pi}_i |\Psi\rangle\}$, где $\hat{\Pi}_i = |v_i\rangle\langle v_i|$, а квадрат нормы каждого состояния в этом множестве есть вероятность соответствующего результата.

После локального измерения запутанное двусоставное состояние коллапсирует в разделимое состояние. Если Алиса разрушит в процессе измерения свою систему, то результирующее состояние $\mathcal{N}_i \langle v_i | \Psi\rangle$ будет локализовано у Боба.

Упражнение 2.36. Выполните упр. 2.30 c) с использованием частичных скалярных произведений.

Упражнение 2.37. Для каждого белловского состояния покажите, что локальное измерение Алисы в *любом* ортонормальном базисе выдаст тот или иной результат с вероятностью $1/2$.

Упражнение 2.38^s. Предположим, Алиса измеряет

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle - |VH\rangle)$$

в базисе круговой поляризации. На какое состояние проецируется фотон Боба для каждого из результатов Алисы?

Упражнение 2.39. Предположим, что Алиса и Боб располагают состоянием $|\Psi^-\rangle$. Алиса хочет удаленно приготовить в локации Боба некоторую линейную суперпозицию $\alpha|H\rangle + \beta|V\rangle$, где α и β произвольны, но $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ (т.е. результирующее состояние нормировано). В каком базисе ей следует измерять? Какова вероятность успеха?

2.2.3. Локальные измерения и причинность

Вернемся теперь к нашему недавнему обсуждению того, противоречит ли эффект удаленного приготовления принципу причинности. Тот факт, что измерение Алисы влияет на состояние фотона Боба, сам по себе не содержит такого противоречия, ибо квантовое состояние — понятие вполне абстрактное. Вопрос, которым нам следует задаться, звучит так: изменятся ли *физические свойства* фотона Боба — т. е. его поведение при измерениях — после измерения Алисы?

Налицо искушение дать положительный ответ. И в самом деле, до измерения состояние Боба было частью полностью изотропного двусоставного состояния; после измерения это уже состояние с определенным углом поляризации — т. е. с кардинально другими физическими свойствами.

Однако при таком ответе упускается один важный момент. Локальное измерение Алисы не всегда приготавливает одно и то же состояние в локации Боба: иногда это $|\theta\rangle$, а иногда $|\pi/2 + \theta\rangle$. Чтобы узнать, какое именно возникло состояние, Бобу нужно принять от Алисы классическое сообщение о результате, полученном ею при измерении. До этого момента Боб знает лишь, что у него имеется одно из двух возможных состояний — и благодаря этой неопределенности измеряемые свойства фотона Боба остаются полностью идентичными тем, что были до измерения. Прежде чем доказать это утверждение строго, рассмотрим пример.

Упражнение 2.40. В условиях упр. 2.27 Боб измеряет поляризацию своего фотона в каноническом базисе после измерения Алисы. Какова вероятность каждого результата при условии, что Боб не знает результата измерения Алисы?

Ответ: $\text{pr}_{\text{Боб},H} = \text{pr}_{\text{Боб},V} = 1/2$ независимо от базиса, который использовала Алиса.

Упражнение 2.41. Алиса и Боб выполняют измерения на своих частях двусоставного состояния $|\Psi\rangle$ в базисах $\{|v_i\rangle\}$ и $\{|w_j\rangle\}$ соответственно. Эти измерения могут проходить по трем альтернативным сценариям:

1. Алиса и Боб выполняют свои измерения одновременно, так что к проективному измерению состояния $|\Psi\rangle$ в базисе $\{|v_i\rangle \otimes |w_j\rangle\}$ применим оригинальный постулат об измерениях.

2. Алиса выполняет свое измерение первой, а затем Боб измеряет удаленно приготовленное состояние.
3. Боб выполняет свое измерение первым, а затем Алиса измеряет удаленно приготовленное состояние.

Покажите, что вероятность ситуации, в которой Алиса обнаружит $|v_i\rangle$, а Боб — $|w_j\rangle$, одинакова для каждого из этих сценариев: $\text{pr}_{ij} = |\langle v_i w_j | \Psi \rangle|^2$.

Упражнение 2.42. Проверьте утверждение из предыдущего упражнения на примере состояния $|\Psi\rangle$ из упр. 2.30 и измерений, проведенных обеими сторонами в канонических базисах:

- a) Найдите вероятности pr_{HH} , pr_{HV} , pr_{VH} и pr_{VV} для случая, когда Алиса и Боб производят свои измерения одновременно.
- b) Считая, что Алиса производит свое измерение первой, найдите вероятности и удаленно приготовленные состояния фотона Боба для каждого из ее результатов. Затем предположите, что Боб измеряет каждое из этих удаленно приготовленных состояний и определите соответствующие вероятности. Используйте эту информацию, чтобы оценить pr_{HH} , pr_{HV} , pr_{VH} и pr_{VV} и убедитесь, что они получились такими же, как в пункте a).
- c) ^s Повторите пункт b) для случая, когда Боб производит свое измерение первым.

Упражнение 2.43. Для каждого из сценариев упр. 2.41 покажите, что для Боба суммарная вероятность увидеть состояние $|w_j\rangle$ составляет $\|\langle w_j | \Psi \rangle\|^2$.

Приведенные результаты означают, что без знания результата измерения Алисы физические свойства фотона Боба не меняются, так что Боб не может извлечь *вообще никакой информации* о действиях Алисы. Хотя мгновенное удаленное приготовление состояния предсказывается теорией и подтверждается экспериментом, оно не может быть использовано для сверхсветовой бесконтактной связи. Квантовая механика наводит нас на противоположную мысль, утверждая, что *состояние* Боба после измерения Алисы зависит от условий измерения. Но квантовое состояние — это чисто теоретический конструкт, его невозможно непосредственно наблюдать в эксперименте. Мы можем получить информацию о состоянии только *косвенным* путем, из статистики, полученной в многочисленных измерениях.

Так, может быть, от всех этих парадоксов получится уйти, вообще отказавшись от концепции квантового состояния и придумав другую теорию, которая столь же хорошо объясняла бы экспериментальные результаты, но не содержала бы теоретических концепций, противоречащих здравому смыслу? Ответ на этот вопрос мы найдем в разд. 2.3. А пока давайте обсудим еще один парадокс, который позволяет взглянуть на проблему под еще более острым углом. Рассмотрим следующий сценарий:

1. Алиса и Боб имеют множество общих копий состояния $|\Psi\rangle$.
2. Над каждой копией *сначала* Боб производит измерение в каноническом, диагональном или круговом базисе (он выбирает случайным образом). *Затем* Алиса измеряет свой фотон в базисе $\{|\theta\rangle, |\pi/2 + \theta\rangle\}$ и сообщает результат Бобу.
3. После того как все измерения завершены, Боб восстанавливает квантовое состояние своего фотона по данным, которые он записал с использованием метода квантовой томографии (упр. 1.15), принимая «задним числом» во внимание (*постселектируя*) только те события, в которых Алиса измерила $|\theta\rangle$.

Если бы измерения Боба происходили после измерений Алисы, то он благодаря явлению удаленного приготовления состояния восстановил бы состояние как $|\pi/2 + \theta\rangle$. Но мы уже знаем из упр. 2.41, что коррелирующие вероятности результатов Алисы и Боба не зависят от порядка измерений. То есть Боб получит в точности ту же статистику результатов своих измерений — те же $pr_H, pr_V, pr_+, pr_-, pr_R, pr_L$ — вне зависимости от того, делаются его измерения до или после измерений Алисы, и восстановит, следовательно, то же состояние $|\pi/2 + \theta\rangle$. Получается, что эффект удаленного приготовления состояния наблюдается даже *после* того, как Боб измерил и тем самым разрушил свой фотон.

Упражнение 2.44*. Покажите, что, если бы квантовое клонирование было возможно, возможна была бы и сверхсветовая связь.

Подсказка: используйте удаленное приготовление и квантовую томографию.

2.2.4. Смешанные состояния

Теперь рассмотрим ситуацию, в которой Алиса теряет свою долю запутанного состояния или просто отказывается сообщить нам о результа-

тах своих измерений. Фотон поглощается на пути к детектору Алисы, или детектор отказывается, или фотон попросту улетает от Алисы в окно лаборатории и дальше в небо, где его, возможно, измерят какие-нибудь инопланетяне. Что мы можем сказать в этом случае о квантовом состоянии фотона¹ Боба?

Мы знаем одно (упр. 2.41): что бы ни происходило с фотоном Алисы, экспериментально измеряемые свойства фотона Боба не меняются. Поэтому если нас интересует описание фотона Боба, то мы можем сделать любое удобное нам предположение о судьбе фотона Алисы. Будем считать, что Алиса измерила свой фотон в каноническом базисе и не сообщила нам результат.

Предполагая еще раз, что начальным состоянием является $|\Psi^-\rangle$, мы знаем, что Алиса может обнаружить при этом либо $|H\rangle$ (в таком случае фотон Боба проецируется на $|V\rangle$), либо $|V\rangle$ (а в этом случае фотон Боба проецируется на $|H\rangle$). Но, поскольку результат Алисы нам неизвестен, мы можем описать состояние фотона Боба только словесно как ансамбль «либо $|H\rangle$ с вероятностью $1/2$, либо $|V\rangle$ с вероятностью $1/2$ ».

Это самое большее из того, что возможно. Предполагая, что Алиса могла проводить измерения в других базисах, мы можем описать фотон Боба как «либо $|+45^\circ\rangle$ с вероятностью $1/2$, либо $|-45^\circ\rangle$ с вероятностью $1/2$ » (упр. 2.9) или «либо $|R\rangle$ с вероятностью $1/2$, либо $|L\rangle$ с вероятностью $1/2$ » (упр. 2.38) и т.д. Все эти описания эквивалентны (упр. 1.12). Поляризация фотона Боба *полностью смешанная* — аналогично поляризации естественного света. *Его состояние не представлено в гильбертовом пространстве никаким определенным вектором.*

В главе 5 мы будем изучать свойства смешанных состояний и способы их математического описания. Пока же важно понять, что если мы теряем часть запутанного состояния, то оставшаяся часть *теряет когерентность*: она уже не находится в состоянии суперпозиции, а представляет собой просто статистическую смесь. В этом случае она описывается на языке классической теории вероятностей, а не квантовой механики.

¹ Возможно, кому-то захочется ответить, что когда фотон Алисы пропадает из состояния, к примеру, $|\Psi^-\rangle = (|HV\rangle - |VH\rangle)/\sqrt{2}$, то фотон Боба приобретает состояние $(|V\rangle - |H\rangle)/\sqrt{2} = |-\rangle$. Это, разумеется, неверно. Чтобы убедиться в этом, вспомните упр. 2.9, где мы выяснили, что $|\Psi^-\rangle$ можно также записать, как $(|+-\rangle - |-+\rangle)/2$. Это означает, что фотон Боба с равной вероятностью может находиться в состояниях $|+\rangle$ и $|-\rangle$.

Замечу, что мы уже говорили о потере квантовой когерентности в контексте измерений *Welcher Weg* в эксперименте с квантовой интерференцией (разд. 1.5). Более того, это явление той же природы, что и те, которые мы изучаем сейчас, как мы увидим в разд. 2.4.

Упражнение 2.45. Алиса и Боб имеют общее запутанное двухфотонное состояние:

$$\text{а) } |\Psi\rangle = (|HH\rangle + 2|VV\rangle)/\sqrt{5};$$

$$\text{б) } |\Psi\rangle = (|HH\rangle + |HV\rangle + |VV\rangle)/\sqrt{3}.$$

Опишите в виде ансамбля состояние фотона Боба, считая, что Алиса измеряет поляризацию своего фотона (1) в каноническом и (2) в диагональном базисе, но не сообщает Бобу результат измерения.

В каждой части этого упражнения ансамбль, описывающий смешанное состояние Боба, зависит от базиса, в котором Алиса проводит свое измерение. Но подчеркну еще раз: эти разные ансамбли соответствуют одному и тому же набору вероятностей в случае, если Боб будет проводить измерение на своей части состояния. Если бы дело обстояло не так, Боб мог бы строить выводы о действиях Алисы — а это, как мы выяснили в подразд. 2.2.3, невозможно¹.

2.3. Квантовая нелокальность

2.3.1. Парадокс Эйнштейна — Подольского — Розена

В разд. 2.2 мы говорили о локальных измерениях на запутанных состояниях. Мы обнаружили, что локальное измерение Алисы вызывает мгновенный коллапс нелокального состояния в некое состояние, которое находится в локации Боба и зависит от измерения, которое Алиса решает выполнить. Мы показали, что удаленное приготовление состояния не нарушает причинности, т. е. что на измеряемые свойства фотона Боба измерение Алисы никак не влияет. Затем мы порассуждали о том, что квантовое состояние — это чисто теоретический конструкт, так что ему «разрешается» демонстрировать нефизичные на первый взгляд свойства на бумаге при условии, что это не вле-

¹ Тот факт, что ансамбли Боба, полученные для двух измерительных базисов Алисы, идентичны, мы покажем строго в упр. 5.40.

чет за собой никаких реальных следствий в эксперименте. Проблема, однако, все же не решена до конца: если в теоретической модели присутствуют абсурдные, контринтуитивные элементы, не имеющие отношения к измеряемой физике, то, может быть, эта модель не так уж хороша!

Этот парадокс был впервые строго сформулирован в 1935 г. в статье Альберта Эйнштейна, Бориса Подольского и Натана Розена (ЭПР)¹. Первоначально парадокс ЭПР был предложен для механического движения пары частиц, так что нам придется отложить его обсуждение до главы 3. Здесь же мы поговорим о его альтернативной формулировке, подобной той, что была предложена Дэвидом Бомом в 1951 г.²

Рассуждение ЭПР опирается на понятие *физической реальности*. Наблюдаемое определяется как элемент физической реальности, когда результат его измерения может быть верно предсказан еще до измерения. Предположим, например, что Алиса и Боб (две удаленные не взаимодействующие между собой стороны) располагают запутанным состоянием $|\Psi^-\rangle = (|HV\rangle - |VH\rangle)/\sqrt{2}$ двух фотонов. Пусть Алиса измеряет поляризацию своего фотона в каноническом базисе. Это измерение удаленно приготовит у Боба состояние $|H\rangle$ или $|V\rangle$. Если теперь Боб посчитает нужным измерить свой фотон в каноническом базисе, результат его измерения может быть предсказан точно, а это означает, что наблюдаемое $\hat{\sigma}_z$ — элемент физической реальности фотона Боба.

Если бы Алиса вместо этого измеряла в диагональном базисе, фотон Боба удаленно приготовился бы либо в $|+45^\circ\rangle$, либо в $|-45^\circ\rangle$. И затем, если бы Боб решил измерить свой фотон в диагональном базисе, результат его измерения можно было бы предсказать точно — так что в данном случае физической реальности фотона Боба соответствует наблюдаемое $\hat{\sigma}_x$.

Далее ЭПР рассуждали так: если два участника находятся далеко друг от друга и /или не могут взаимодействовать, то никакое действие одной из сторон не может изменить физическую реальность у второго участника. Они назвали это *принципом локальности*, или *локальным реализмом* (locality, или local realism). Применяв данный основанный на здравом смысле принцип в нашем случае, мы вынуждены заклю-

¹ A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be Considered Complete?, Physical Review 47, 777 (1935).

² D. Bohm, Quantum Theory, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1951.

чить, что *оба наблюдаемых* — и $\hat{\sigma}_x$, и $\hat{\sigma}_z$ — входят в состав физической реальности, если речь идет о фотоне Боба. Однако это невозможно, поскольку наблюдаемые $\hat{\sigma}_x$ и $\hat{\sigma}_z$ имеют непересекающееся множество собственных состояний (см. упр. 1.35).

Данное противоречие заставило ЭПР сделать вывод о том, что «квантово-механическое описание реальности... неполно». Под *полнотой* ЭПР понимали требование, что «каждый элемент физической реальности должен иметь отражение в физической теории»¹. В рассматриваемом случае два элемента физической реальности — $\hat{\sigma}_x$, и $\hat{\sigma}_z$ — могут иметь лишь один, и не более, эквивалент в квантовой теории.

ЭПР завершили статью так:

«Хотя мы и показали, что волновая функция не дает полного описания физической реальности, мы оставили открытым вопрос о том, существует ли такое описание или нет. Мы думаем, однако, что такая теория возможна»².

Иными словами, говорят ЭПР, когда-нибудь, наверное, будет разработана теория, которая сможет предсказывать экспериментальные результаты не хуже квантовой механики, не проявляя при этом никаких парадоксальных черт. Если говорить конкретно о нашем случае, то эта «новая» теория позволит предсказывать результаты измерения Боба в любом базисе, независимо от действий Алисы.

Можно возразить, что, согласно эксперименту, результаты Боба, если он не измеряет в том же базисе, что и Алиса, получаются случайными. Не исключает ли это всякую возможность существования детерминистической теории? Чтобы дать ответ на это возражение, вспомним наглядный пример, который мы придумали в подразд. 2.2.1: некто случайным образом отправляет одну туфлю из пары Алисе, а другую Бобу. С точки зрения Алисы и Боба, правость или левость полученной туфли будет абсолютно случайной. Тем не менее тот, кто упаковал туфли и разослал их, знает, какая из них ушла к какому наблюдателю: этому кому-то известен *скрытый параметр* (hidden parameter), к которому Алиса и Боб не имеют доступа.

¹ Фок В. А., Эйнштейн А., Подольский Б. и др. Можно ли считать, что квантово-механическое описание физической реальности является полным? // Успехи физических наук. Т. XVI. Вып. 4 (1936). С. 440. — *Прим. ред.*

² Там же. С. 446. — *Прим. ред.*

Поведение фотонов сложнее поведения туфель, поскольку корреляции между результатами измерений зависят от базисов, выбранных обеими сторонами. Но, возможно, ситуация все же допускает аналогичное объяснение? Может быть, два фотона загодя, в момент их создания, получают какой-то набор скрытых параметров, которые каким-то образом полностью определяют результат измерений их поляризации в *любом* базисе, а мы просто пока не знаем, что это за параметры?

В 1935 г. квантовая механика уже утвердилась как мощная теория, способная объяснить многие экспериментальные результаты лучше, чем любая другая. Поэтому ЭПР не подвергали сомнению способность квантовой механики предсказывать и объяснять результаты экспериментов. Они лишь указали на прорехи в ее логике. ЭПР высказали предположение о том, что, может быть, существует теория, которая так же хорошо описывает эксперименты, но указанных прорех не имеет. При этом они не сказали об этой гипотетической теории ничего конкретного. Поэтому казалось, что гипотеза ЭПР не имеет перспектив экспериментальной проверки и тем самым выводит себя за рамки физики — по своей сути экспериментальной науки.

2.3.2. Неравенство Белла

Ситуация изменилась только почти через 30 лет. В 1964 г. Джон Белл предложил¹ эксперимент, в котором *любая* локально-реалистичная теория будет предсказывать результат, отличный от того, что предсказывает квантовая механика. Если говорить конкретнее, он вывел неравенство, которое должно выполняться в любой локально-реалистичной теории, но нарушается, если верна квантовая механика.



Джон Белл

Открытие Белла гениально, поскольку он нашел способ проверить теорию, *вообще ничего* о ней не зная — за исключением того, что она подчиняется здравому смыслу в виде локального реализма. Он осуществил эту почти невозможную миссию, проанализировав экспериментальную установку со стороны ее «передней панели» и не делая никаких предположений о физике, на которой основано ее действие. Оказывается, такого самого базового описания эксперимента достаточно для того, чтобы делать значимые предсказания о его результатах.

¹ J.S. Bell, On the Einstein–Poldolsky–Rosen paradox, Physics 1, 195 (1964).

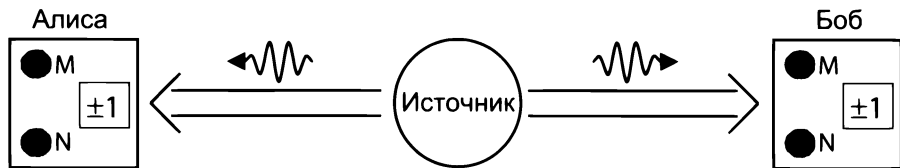


Рис. 2.2. Передняя панель эксперимента Белла

Эта передняя панель выглядит, как показано на рис. 2.2. Каждый из двух удаленных наблюдателей — и Алиса, и Боб — пользуется устройством, имеющим две кнопки, обозначенные M и N , и экран, который может показывать либо «+1», либо «−1». Во время эксперимента Алиса и Боб не имеют возможности общаться друг с другом.

«Источник», расположенный примерно посередине между Алисой и Бобом, посылает им пару частиц некоторого рода. Алиса и Боб получают эти частицы и вводят их каждый в свое устройство. Затем они выбирают случайную кнопку на устройстве и одновременно нажимают на нее. Каждое устройство показывает величину ± 1 , связанную, возможно, с состоянием полученной частицы. Вся описанную операцию мы называем *событием*.

Оба наблюдателя ведут записи о нажатых ими кнопках и показанных числах. После получения данных о большом массиве событий обе стороны встречаются и производят корреляционный анализ своих записей. А именно, они оценивают величину

$$\langle S \rangle = \langle M_A M_B - M_A N_B + N_A M_B + N_A N_B \rangle, \quad (2.23)$$

где $M_{A,B}$ и $N_{A,B}$ относятся к величинам, полученным каждым наблюдателем при нажатии соответствующей кнопки. Конечно, каждая пара частиц вносит свой вклад только в одно слагаемое в (2.23). Например, если Алиса нажимает M , а Боб — N , то величины, которые они видят при этом на экранах, используются при оценивании $\langle M_A N_B \rangle$, и т. п.

Запишем (2.23) в полном виде:

$$\begin{aligned} \langle S \rangle = & \sum_{M_A, M_B = -1}^{+1} \text{pr}_{M_A, M_B} M_A M_B - \sum_{M_A, N_B = -1}^{+1} \text{pr}_{M_A, N_B} M_A N_B + \\ & + \sum_{N_A, M_B = -1}^{+1} \text{pr}_{N_A, M_B} N_A M_B + \sum_{N_A, N_B = -1}^{+1} \text{pr}_{N_A, N_B} N_A N_B \end{aligned} \quad (2.24)$$

где, к примеру, pr_{M_A, N_B} для $M_A = 1$, $N_B = -1$ есть вероятность того, что экран Алисы показал 1, а экран Боба продемонстрировал −1 при условии, что Алиса нажала M , а Боб — N .

Теперь взгляните на структуру этих распределений вероятностей. С позиции локального реализма каждое устройство определяет величину, которая появляется на экране по каждому нажатию одной из клавиш, на основе локальной информации, которая имеется в наличии, — скрытого параметра прилетевшей частицы (который мы обозначим λ_A и λ_B для частиц Алисы и Боба соответственно) и некоторого алгоритма. В этом алгоритме, возможно, присутствует случайность, поэтому он характеризуется набором вероятностей $\text{pr}_{M_A|\lambda_A}$, $\text{pr}_{M_B|\lambda_B}$, $\text{pr}_{N_A|\lambda_A}$, $\text{pr}_{N_B|\lambda_B}$. Например, $\text{pr}_{M_A|\lambda_A}$ определяет вероятность величины M_A , которая появится на экране установки Алисы, когда она нажимает кнопку M , если скрытый параметр прилетающей частицы равен λ_A .

Используя выражение (Б.6) для условных вероятностей, мы можем записать вероятность получения определенной пары величин на экранах Алисы и Боба как

$$\text{pr}_{M_A, M_B} = \sum_{\lambda_A, \lambda_B} \text{pr}_{\lambda_A, \lambda_B} \text{pr}_{M_A|\lambda_A} \text{pr}_{M_B|\lambda_B} \quad (2.25)$$

для случая, когда и Алиса, и Боб нажимают кнопку M . Здесь $\text{pr}_{\lambda_A, \lambda_B}$ — вероятность того, что скрытыми параметрами пары частиц являются λ_A и λ_B . Обратите внимание, что эти параметры могут коррелировать между собой, поскольку частицы появляются из одного источника, так что мы не можем выразить $\text{pr}_{\lambda_A, \lambda_B}$ как произведение вероятностей. Для трех остальных возможных комбинаций кнопок выражения имеют аналогичный вид.

Упражнение 2.46. Опираясь на приведенный выше результат, покажите, что (2.24) может быть переписано в виде

$$\langle S \rangle = \sum_{M_A, M_B, N_A, N_B = -1}^{+1} \text{pr}_{M_A, M_B, N_A, N_B} [M_A M_B - M_A N_B + N_A M_B + N_A N_B], \quad (2.26)$$

где $\text{pr}_{M_A, M_B, N_A, N_B}$ есть неотрицательная переменная, обладающая свойством

$$\sum_{M_A, M_B, N_A, N_B = -1}^{+1} \text{pr}_{M_A, M_B, N_A, N_B} = 1.$$

Выразите $\text{pr}_{M_A, M_B, N_A, N_B}$ через $\text{pr}_{\lambda_A, \lambda_B}$, $\text{pr}_{M_A|\lambda_A}$, $\text{pr}_{M_B|\lambda_B}$, $\text{pr}_{N_A|\lambda_A}$ и $\text{pr}_{N_B|\lambda_B}$.

Значение (2.26) состоит в том, что множество четырех величин $\{M_A, M_B, N_A, N_B\}$ подчиняется математически допустимому распределению вероятностей. Это означает, что для любого локального реалистичного эксперимента с передней панелью Белла (рис. 2.2) математически можно построить альтернативное устройство, которое будет генерировать и показывать эти четыре величины для каждого события (рис. 2.3), и эти величины будут демонстрировать в точности такую же статистику для каждой пары (M_A, M_B) , (M_A, N_B) , (N_A, M_B) , (N_A, N_B) , какую демонстрирует первоначальная конструкция.

Обратите внимание: утверждение, сделанное выше, неверно, если принцип локальности не работает — например, если M_A зависит не только от λ_A , но также от того, какую кнопку нажал Боб. Эта зависимость сделала бы неверным (2.25), а следовательно, и (2.26).

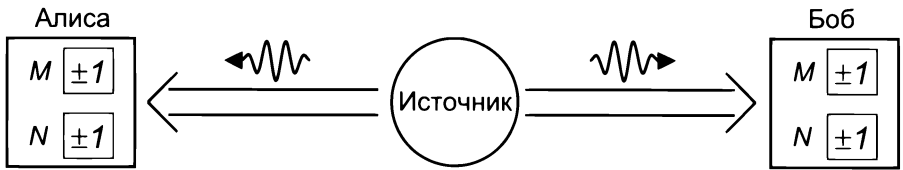


Рис. 2.3. Эквивалентная схема эксперимента Белла, верная в случае локального реализма. Каждый аппарат имеет два индикатора, на которых высвечиваются значения при каждом событии, но Алиса и Боб каждый раз случайно решают, какое из них записать.

Упражнение 2.47. Выведите неравенство Белла

$$|\langle M_A M_B - M_A N_B + N_A M_B + N_A N_B \rangle| \leq 2 \quad (2.27)$$

для любого прибора, передняя панель которого представлена на рис. 2.3.

Подсказка: перепишите (2.26) как $\langle S \rangle = \langle M_A (M_B - N_B) + N_A (M_B + N_B) \rangle$.

Это неравенство применимо и к любому локально-реалистичному устройству с передней панелью Белла (рис. 2.2). И в самом деле, если бы оно не выполнялось для такой установки, оно нарушалось бы также и для ее эквивалента на рис. 2.3, а мы только что показали, что это невозможно.

Подчеркну еще раз, что наш вывод не опирается ни на какие предположения о физике частиц или измерительных устройств, но только на самые общие принципы причинности и локального реализма.

2.3.3. Нарушение неравенства Белла

Теперь мы опишем конкретную экспериментальную установку, передняя панель которой соответствует данному выше описанию, но которая при этом нарушает неравенство Белла. Две частицы, полученные Алисой и Бобом, — это два фотона в белловском состоянии $|\Psi^-\rangle$. Устройство приема и у Алисы, и у Боба состоит из полуволновой пластинки, за которой следует PBS с двумя детекторами фотонов в выходных каналах (рис. 2.1). Когда Алиса и Боб нажимают свои кнопки, волновые пластинки устанавливаются на угол $\theta/2$, где величина θ задается табл. 2.1. Детекторы подключены к экрану, так что регистрация фотона в пропущенном (отраженном) канале приводит к появлению на экране числа +1 (−1). Это эквивалентно тому, что и Алиса, и Боб измеряют наблюдаемое

$$\hat{\sigma}_\theta = |\theta\rangle\langle\theta| - \left| \frac{\pi}{2} + \theta \right\rangle\left\langle \frac{\pi}{2} + \theta \right|. \quad (2.28)$$

В следующих упражнениях мы вычислим квантовое предсказание статистики результатов этих измерений, из которого сможем определить математическое ожидание наблюдаемого S .

Таблица 2.1. Угол θ в наблюдаемом (2.28) в эксперименте Белла

		Наблюдатель	
		Алиса	Боб
Нажатая кнопка	M	0	$\pi/8$
	N	$\pi/4$	$3\pi/8$

Упражнение 2.48. Напишите наблюдаемое (2.28) в нотации Дирака в каноническом базисе.

Упражнение 2.49. Вычислите математические ожидания для следующих операторов в состоянии $|\Psi^-\rangle$:

- $\hat{M}_A \otimes \hat{M}_B$;
- $\hat{M}_A \otimes \hat{N}_B$;
- $\hat{N}_A \otimes \hat{M}_B$;
- $\hat{N}_A \otimes \hat{N}_B$.

Подсказка: чтобы снизить объем вычислений, используйте изотропность $|\Psi^-\rangle$ (упр. 2.9).

Ответ: а) $-\frac{1}{\sqrt{2}}$; б) $\frac{1}{\sqrt{2}}$; в) $-\frac{1}{\sqrt{2}}$; д) $-\frac{1}{\sqrt{2}}$.

Таким образом, мы видим, что, согласно квантовой механике, математическое ожидание S равно

$$\langle S \rangle = \langle \hat{M}_A \hat{M}_B - \hat{M}_A \hat{N}_B + \hat{N}_A \hat{M}_B + \hat{N}_A \hat{N}_B \rangle = -2\sqrt{2}, \quad (2.29)$$

а это нарушает неравенство Белла (2.27).

Данный результат завершает аргументацию Белла, которая дает нам в руки инструменты для экспериментальной проверки гипотезы Эйнштейна — Подольского — Розена.

Экспериментальные проверки неравенства Белла начались вскоре после того, как оно было сформулировано, и продолжают до сих пор. Все они свидетельствуют в пользу квантовой механики. Однако все эксперименты, проведенные до недавнего времени, содержали *прорехи* — дополнительные предположения, которые приходилось делать, чтобы исключить локальное реалистичное объяснение полученных результатов. Во время написания этой книги, в 2015 г., появились сообщения о трех экспериментах, в которых все значительные прорехи были закрыты (отступление 2.3).

Существует два основных типа прорех. *Прореха локальности* (locality loophole) возникает, если наблюдатели находятся слишком близко друг к другу (например, на одном оптическом столе) и не принимают свои решения — M или N — достаточно быстро. В этом случае они, по крайней мере теоретически, могут влиять друг на друга. В экспериментах, в которых эта прореха ликвидирована, лаборатории Алисы и Боба располагаются в сотнях метров или даже километрах друг от друга. Чтобы принять решение о базисе, Алиса и Боб используют быстрые генераторы случайных чисел, основанные, как правило, на квантовых принципах. Вместо вращения волновых пластинок они меняют базисы своих измерений при помощи электрооптических модуляторов — оптических элементов, двупреломление в которых можно контролировать в пределах нескольких наносекунд при помощи приложенного напряжения. Таким способом решения, сделанные двумя сторонами, разделены пространственноподобным интервалом, предотвращающим всякую коммуникацию между ними.

Отступление 2.3. Экспериментальные проверки неравенства Белла

Первые тесты по проверке неравенства Белла провели Джон Клаузер со своими сотрудниками* (1972) и, в более полном виде, Ален Аспе с коллегами** (1981–1982). В то время параметрическое рассеяние понимали еще недостаточно хорошо, поэтому для приготовления необходимых запутанных состояний использовали ансамбли атомов.

Прореху локальности закрыла группа Антона Цайлингера*** (1998). Алису и Боба разделили дистанцией 400 м, а для выбора базисов измерения были использованы квантовые генераторы случайных чисел.

Прореху обнаружения первой закрыла группа Дэвида Уайнленда' (2001), но использовала она для этого не фотоны, а кубиты, построенные на ионах бериллия в магнитной ловушке. Захваченные ионы могут оставаться в ловушке очень долго, а их квантовые состояния при этом можно измерять с высокой эффективностью. Однако два иона, на которых проводился данный эксперимент, находились в одной ловушке на расстоянии всего лишь нескольких микрометров друг от друга. Отсюда следует, что на результат эксперимента могла серьезно повлиять прореха локальности.

В 2015 г. на протяжении трех месяцев было опубликовано сразу три статьи с отчетами об экспериментах, в которых закрывались одновременно обе прорехи. В первом из них экспериментаторы под руководством Рональда Хансона'' сумели обойти прореху обнаружения путем использования обмена запутанностью (упр. 2.69) для запутывания долгоживущих состояний спина электронов двух азотозамещенных вакансий в кристаллах алмаза, разделенных расстоянием 1,3 км. В двух других экспериментах — под руководством А. Цайлингера''' и Линдена Шалма[§] соответственно — для уменьшения связанных с распространением и обнаружением фотонов потерь ниже порогового значения, необходимого для нарушения неравенства Белла, использовались хитроумные установки параметрического рассеяния и высокоэффективные детекторы.

* S. J. Freedman and J. F. Clauser, *Experimental test of local hidden-variable theories*, Physical Review Letters **28**, 938 (1972).

** A. Aspect, P. Grangier, G. Roger, *Experimental Realization of Einstein — Podolsky — Rosen — Bohm Gedankenexperiment: A New Violation of Bell's Inequalities*, Physical Review Letters **49**, 91 (1982).

*** G. Weihs, T. Jennewein, C. Simon, H. Weinfurter, A. Zeilinger, *Violation of Bell's inequality under strict Einstein locality conditions*, Physical Review Letters **81**, 5039 (1998).

' M. A. Rowe, D. Kielpinski, V. Meyer, C. A. Sackett, W. M. Itano, C. Monroe, D. J. Wineland, *Experimental violation of a Bell's inequality with efficient detection*, Nature **409**, 791 (2001).

'' B. Hensen et al., *Loophole-free Bell inequality violation using electron spins separated by 1.3 kilometres*, Nature **526**, 682 (2015).

''' M. Guistina et al. *Significant-loophole-free test of Bell's theorem with entangled photons*, Physical Review Letters **115**, 250401 (2015).

§ L. K. Shalm et al. *A strong loophole-free test of local realism*, Physical Review Letters **115**, 250402 (2015).

Прореха обнаружения (detection loophole) возникает из-за оптических потерь или неэффективной работы детекторов. Результатом этих неидеальностей становится ненулевая вероятность того, что в локации Алисы или Боба ни один из двух детекторов не обнаружит фотона. В таком случае величина на экране соответствующей стороны останется неопределенной — а это означает, что передняя панель эксперимента уже не будет соответствовать рис. 2.2¹. Во многих экспериментах данный вопрос решается введением так называемой *гипотезы о представительности выборки*, гласящей, что потери возникают случайно и на них не влияют локальные скрытые переменные. Действуя в рамках этой гипотезы, экспериментаторы вычисляют $\langle S \rangle$, принимая во внимание только те события, в которых фотон зарегистрировали и Алиса, и Боб. Хотя гипотеза о представительности выборки и естественна в контексте установки на рис. 2.1, она несовместима с общей идеологией теоремы Белла, которая не допускает в принципе никаких гипотез о физике эксперимента.

Упражнение 2.50^s. Для квантовой оптической установки, которая обсуждалась в этом разделе, покажите, что Алиса и Боб, рассматриваемые по отдельности, будут наблюдать результаты $+1$ и -1 с равной вероятностью, какие бы кнопки они ни нажимали.

Подсказка: загляните в упр. 2.37.

Упражнение 2.51^{*}. Предположим, что эффективность каждого детектора фотонов составляет 50%. Остальная часть установки идеальна, так что в рамках гипотезы о представительности выборки $\langle S \rangle = 2\sqrt{2}$. Предложите локальную реалистичную модель для частиц и детекторов, которая воспроизводила бы такое поведение.

Упражнение 2.52. Чтобы провести эксперимент Белла с неидеальными детекторами, электронные схемы в устройствах Алисы и Боба запрограммированы так, что в тех случаях, когда ни один детектор фотонов не щелкнул, устройство показывает на экране случайным образом $+1$ или -1 . Предполагая, что остальная часть установки идеальна, найдите величину левой стороны неравенства Белла, которая

¹ Конечно, можно настроить электронику таким образом, что при отсутствии сигнала в обоих детекторах экран случайным образом покажет величину ± 1 . При такой программе эксперимент будет соответствовать рис. 2.2, но проблему это не решит (см. упр. 2.52).

будет получена в данном эксперименте, в зависимости от эффективности детектора η . Какова минимальная η , для которой неравенство Белла будет нарушаться?

2.3.4. Нелокальность Гринбергера — Хорна — Цайлингера (ГХЦ)

За открытием Белла последовало множество других предложений по демонстрации нелокальной природы квантовой механики. В этом разделе мы разберем один пример; он примечателен тем, что в нем нет неравенств¹. В обсуждении мы будем следовать той же логике, что и в разговоре о теореме Белла. Сначала мы рассмотрим эксперимент с точки зрения передней панели и сделаем выводы с учетом гипотезы локального реализма. Затем опишем физику явлений, происходящих под этой панелью, и просчитаем теоретический прогноз в соответствии с законами квантовой механики.

У ГХЦ есть три удаленных наблюдателя: Алиса, Боб и Чарли. Каждый из них работает с устройством, аналогичным установке Белла, но кнопки на них помечены σ_x и σ_y . При каждом событии источник автоматически посылает три частицы на устройства Алисы, Боба и Чарли, где наблюдатели измеряют их, нажимая одну из кнопок. После проведения множества измерений все участники встречаются и обсуждают результаты.

Известно, что эта установка обладает следующим свойством (которое Алиса, Боб и Чарли проверяют, анализируя статистику результатов своих измерений): всякий раз, когда двое из них нажимают кнопку σ_y , а третий — кнопку σ_x , произведение этих трех результатов равно -1 .

$$\sigma_{xA} \sigma_{yB} \sigma_{yC} = -1; \quad (2.30a)$$

$$\sigma_{yA} \sigma_{xB} \sigma_{yC} = -1; \quad (2.30b)$$

$$\sigma_{yA} \sigma_{yB} \sigma_{xC} = -1. \quad (2.30c)$$

¹ Теоретическая идея: D.M. Greenberger, M.A. Horne, A. Shimony, A. Zeilinger, in Bell's Theorem, Quantum Theory, and Conceptions of the Universe (M. Kafatos, ed.), p. 73 (Kluwer Academic, Dordrecht, 1989). Эксперимент: J.W. Pan, D. Bouwmeester, M. Daniell, H. Weinfurter and A. Zeilinger, Experimental test of quantum nonlocality in three-photon GHZ entanglement, Nature 403, 515 (2000).

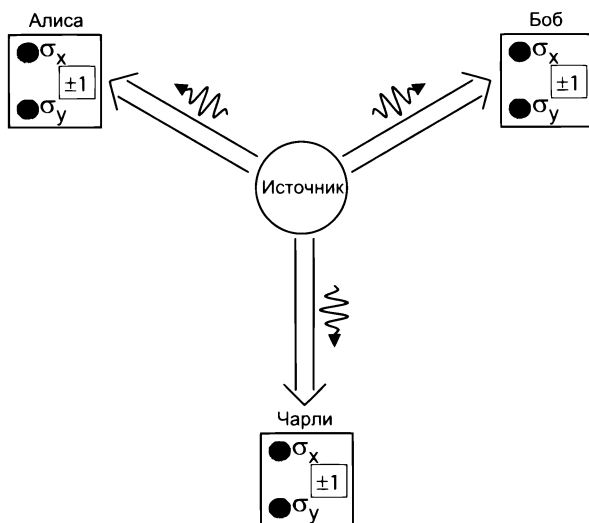


Рис. 2.4. Установка для эксперимента Гринбергера — Хорна — Цайлингера

Упражнение 2.53. Принимая гипотезу локального реализма и используя скрытые параметры, как в подразд. 2.3.2, покажите, что можно определить общее распределение вероятностей $\text{pr}_{\sigma_{xA}, \sigma_{yA}, \sigma_{xB}, \sigma_{yB}, \sigma_{xC}, \sigma_{yC}}$, управляющее одновременно всеми возможными наблюдениями, которые можно сделать в эксперименте ГХЦ. Покажите, что эти вероятности всегда неотрицательны и в сумме дают единицу.

Мы здесь следуем той же логике, что и при выводе неравенства Белла. Поскольку возможные наборы результатов $(\sigma_{iA}, \sigma_{jB}, \sigma_{kC})$ (где каждый из индексов i, j и k может принимать значения x и y) подчиняются общему распределению вероятностей, можно построить альтернативный эксперимент, в котором на трех устройствах нет никаких кнопок, но на экране они для каждого события показывают значения σ_x и σ_y . Такой альтернативный эксперимент демонстрировал бы те же самые статистические свойства, что и первоначальный. В частности, (2.30) выполнялись бы для каждого события.

Перемножим левые и правые части этих трех уравнений и заключим, что для любой тройки частиц верно следующее равенство:

$$\sigma_{x_A} \sigma_{x_B} \sigma_{x_C} = -1. \quad (2.31)$$

Поскольку данный результат верен для альтернативного эксперимента, он должен быть верен и для его первоначального варианта. То есть всякий раз, когда все три наблюдателя нажимают кнопку « σ_x », произведение показываемых величин принимает значение -1 . Такой вывод следует из локального реализма.

Теперь проведем квантовые рассуждения. Источник посылает Алисе, Бобу и Чарли три фотона в состоянии

$$|\Psi_{\text{GHZ}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HHH\rangle + |VVV\rangle).$$

Когда каждый из наблюдателей нажимает одну из кнопок, наблюдаемое, соответствующее оператору Паули, написанному на этой кнопке, измеряется на фотоне этого наблюдателя. Результат измерения, соответствующий одному из собственных значений этого наблюдаемого, появляется на экране.

Упражнение 2.54. Покажите, что $|\Psi_{\text{GHZ}}\rangle$ есть собственное состояние операторов:

- $\hat{\sigma}_{x_A} \otimes \hat{\sigma}_{y_B} \otimes \hat{\sigma}_{y_C}$, $\hat{\sigma}_{y_A} \otimes \hat{\sigma}_{x_B} \otimes \hat{\sigma}_{y_C}$, $\hat{\sigma}_{y_A} \otimes \hat{\sigma}_{y_B} \otimes \hat{\sigma}_{x_C}$ с собственным значением -1 ;
- $\hat{\sigma}_{x_A} \otimes \hat{\sigma}_{x_B} \otimes \hat{\sigma}_{x_C}$ с собственным значением $+1$.

Часть а) данного упражнения означает, что каждый раз, когда двое из трех наблюдателей измеряют $\hat{\sigma}_y$, а третий — $\hat{\sigma}_x$ у своих частей $|\Psi_{\text{GHZ}}\rangle$, произведение результатов их измерений будет равно -1 (см. упр. 2.24). Из этого следует, что установка соответствует данному выше описанию передней панели.

Часть б), в свою очередь, доказывает, что, когда все трое наблюдателей все время измеряют $\hat{\sigma}_x$, произведение их результатов равно $+1$. Этот результат прямо противоречит предсказанию в условиях локального реализма (2.31). В отличие от неравенства Белла, где нарушение локального реализма фиксируется путем собирания большого количества данных и вычисления средних значений, установка эксперимента ГХЦ показывает несовпадение *каждый раз*, когда наблюдатели производят измерение. Отсутствие статистической неопределенности

делает рассуждение ГХЦ особенно элегантной демонстрацией квантовой нелокальности.

2.4. Взгляд на квантовые измерения

2.4.1. Измерения фон Неймана

В конце предыдущей главы мы узнали, что *любой* квантовый процесс описывается некоторым унитарным оператором. В то же время постулат об измерениях гласит, что измерение превращает квантовую суперпозицию в статистическую смесь элементов измерительного базиса¹. Этот процесс не может быть описан линейным оператором, поскольку тот по определению обратимо отображает любой элемент гильбертова пространства на другой элемент того же гильбертова пространства. Как можно разрешить данное противоречие?

Если этот вопрос кажется вам слишком абстрактным, переформулируем его более конкретно. Предположим, что наблюдатель Алиса измеряет диагонально поляризованный фотон

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|H\rangle + \beta|V\rangle) \quad (2.32)$$

(где α и β действительны и положительны) в каноническом базисе (рис. 1.2 а). Этот фотон проходит через PBS или отражается, затем попадает на сенсор одного из фотодетекторов (отступление 1.2), где запускает лавинообразный процесс, производящий, в свою очередь, громкий щелчок, который Алиса может услышать. *В какой момент* суперпозиция (2.32) коллапсирует в множество вероятностей? Когда фотон походит через PBS? Или когда в одном из детекторов возникает лавина? Или когда звучит щелчок?

Для ответа на эти вопросы расскажу о модели квантовых измерений, предложенную Джоном фон Нейманом. В этой модели и квантовая система, которую предполагается измерять, и измерительный прибор рассматриваются как два гильбертовых пространства, становящихся в ходе измерения *запутанными*. Предположим, что изначально система находится в состоянии $|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |v_i\rangle$, где $\{|v_i\rangle\}_{i=1}^N$ — базис

¹ Этот стандартный подход к квантовым измерениям называют копенгагенской интерпретацией в честь Нильса Бора.

измерения. Начальным состоянием прибора является $|w_1\rangle$ — один из элементов ортонормального базиса $\{|w_i\rangle\}_{i=1}^M$ (где $M > N$) в гильбертовом пространстве прибора. Во время измерения система взаимодействует с измерительным прибором и запутывается с ним посредством унитарной эволюции, порождая состояния¹



Джон фон Нейман

$$\hat{U}(|\psi\rangle \otimes |w_1\rangle) = \sum_{i=1}^N \psi_i |v_i\rangle \otimes |w_i\rangle. \quad (2.33)$$

Состояния $|w_1\rangle, \dots, |w_n\rangle$ макроскопически различны (например, включаются разные лампочки или стрелка занимает разные положения). Наблюдатель имеет доступ к прибору и может узнать его состояние.

В конкретном случае измерения поляризации фотона запутанность системы с прибором порождает состояние²

$$|\Psi_{SA}\rangle = \alpha |H\rangle \otimes |\text{лавина в детекторе 1}\rangle + \beta |V\rangle \otimes |\text{лавина в детекторе 2}\rangle. \quad (2.34)$$

Суперпозиция (2.34) соответствует ситуации измерения *Welcher Weg* из разд. 1.5. Даже если рядом нет наблюдателя, который мог бы считывать результат измерения, одинокий фотон уже не может продемонстрировать интерференцию, поскольку в состоянии суперпозиции теперь вовлечен дополнительный объект — прибор.

Теперь предположим, что эксперимент проводит наблюдатель Алиса, которая может повторять его много раз. Теоретически у Алисы есть возможность убедиться в запутанной природе суперпозиции (2.34) путем измерений. С этой целью она должна будет сначала произвести множество измерений фотона в каноническом базисе и соотнести полученные результаты с показаниями детекторов — что позволит ей опре-

¹ Может показаться, что (2.33) эквивалентно квантовому клонированию (подразд. 2.1.3), потому что для каждого элемента базиса системы прибор эволюционирует в соответствующий элемент базиса своего гильбертова пространства. На самом деле это не так. Настоящая операция клонирования клонировала бы также и состояния суперпозиции, т. е. переводила бы правую сторону уравнения (2.33) в вид $(\sum_{i=1}^N \psi_i |v_i\rangle) \otimes (\sum_{i=1}^N \psi_i |w_i\rangle)$. Преобразование (2.33) этого не делает и, следовательно, не противоречит теореме о запрете клонирования.

² Для удобства будем предполагать, что фотон не уничтожается в ходе обнаружения, и не будем учитывать тот факт, что горизонтальные и вертикальные фотоны следуют по разным пространственным траекториям.

делить абсолютные значения α и β для двух слагаемых в (2.34). Кроме того, Алиса должна получить статистику измерений как для фотона, так и для детекторов в диагональном базисе [для детекторов это $\{(|\text{лавина в детекторе 1}\rangle \pm |\text{лавина в детекторе 2}\rangle) / \sqrt{2}\}$] и определить фазовое соотношение между членами суперпозиции (см. упр. 2.11). Конечно, в настоящее время такие измерения выходят далеко за пределы наших технических возможностей, но теоретически они вполне допустимы.

Но что, если Алиса ничего подобного не делает и слышит щелчок одного из детекторов в состоянии (2.34)? Поскольку сама она — тоже квантовый объект, мы можем продолжить нашу линию рассуждений и сказать, что Алиса становится частью все той же запутанной суперпозиции:

$$\begin{aligned}
 |\Psi_{\text{SAO}}\rangle = & \alpha|H\rangle \otimes |\text{лавина в детекторе 1}\rangle \otimes |\text{Алиса слышит щелчок} \\
 & \text{в детекторе 1}\rangle + \beta|V\rangle \otimes |\text{лавина в детекторе 2}\rangle \otimes |\text{Алиса слышит} \\
 & \text{щелчок в детекторе 2}\rangle.
 \end{aligned}$$

Этот момент отмечает принципиальную перемену для Алисы как наблюдателя. Какими бы интеллектуальными и техническими ресурсами Алиса ни обладала, она не может спроецировать себя на диагональный базис даже в принципе. В результате у Алисы нет возможности узнать, что она находится в состоянии суперпозиции. Для нее всякий раз, когда фотон горизонтален, слышится щелчок в детекторе 1, а когда вертикален — в детекторе 2. У Алисы также нет возможности выяснить экспериментально, что существует и другая часть суперпозиции, поскольку все, что она может наблюдать (фотон и детектор), согласовано с ее собственным состоянием. Для Алисы картина выглядит так, будто квантовое состояние фотона схлопнулось и случайным образом возник один из двух возможных результатов.

Другой наблюдатель — Боб — находится вне лаборатории Алисы и пока не стал частью суперпозиции; он еще может убедиться в ее существовании посредством измерения фотона, детектора и Алисы в их диагональных базисах. Здесь опять же я говорю лишь о теоретической возможности такого измерения, абстрагируясь от его практической реализации (которая невообразимо сложна)¹.

¹ Эта процедура известна как мысленный эксперимент Юджина Вигнера, который поставил себя на позицию Боба, а своего гипотетического друга — на позицию Алисы.

Мы видим, что модель фон Неймана отвечает на вопрос, заданный в начале этого раздела. Коллапс суперпозиции необязательно должен быть частью квантовой теории — это *субъективное* явление, которое *кажется* наблюдателю, когда он сам становится частью суперпозиции. В реальности или по крайней мере в теоретической реальности, которую представляет квантовая механика, суперпозиция никогда не схлопывается, но продолжает жить, вовлекая в себя все бóльшую часть Вселенной.

С этой точки зрения убежденность Эйнштейна в том, что Бог не играет в кости, оказывается вполне оправданной. Эволюция волновой функции Вселенной носит детерминистский характер. Квантовая случайность — всего лишь иллюзия, следствие ограниченности наших наблюдательных возможностей.

Такая интерпретация, конечно, устраняет многие логические нестыковки, отмеченные в начале раздела, но при этом она в высшей степени неудобна с практической точки зрения. Если наша цель утилитарна — предсказывать при помощи квантовой механики экспериментальные результаты, важные для нас как наблюдателей, — то рассуждать об измерениях, возможных только в теории, бессмысленно. Вместо этого нам следует принять копенгагенскую интерпретацию, анализируя физический мир в том виде, в каком его видит макроскопический наблюдатель, то есть считать, что состояние коллапсирует, как только уровень его макроскопичности повышается настолько, что мы уже не можем измерить фазу между двумя членами суперпозиции. В приведенном примере это произойдет с зарождением лавины в одном из детекторов¹.

2.4.2. Декогеренция

Квантовые измерения происходят не только в лабораториях. Явления, напоминающие измерения, в которых роль прибора играет среда, происходят вокруг нас постоянно. Предположим, например, что мы приготовили единичный атом в состоянии $|\psi\rangle$ с хорошо определенным импульсом. Согласно принципу неопределенности, наблюдаемое координаты в этом состоянии неопределенно, а это означает, что мы можем записать его как суперпозицию множества координатных собственных состояний²

¹ Такой «инструментальный» подход особенно привлекал Ричарда Фейнмана, взгляды которого хорошо отражает выдуманный лозунг «Заткнись и считай» («Shut up and calculate»).

² О точном виде собственного состояния импульса речь пойдет в следующей главе; пока же достаточно (2.35).

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |x_i\rangle. \quad (2.35)$$

Атом, если только он не находится в полном вакууме, будет взаимодействовать с другими частицами, такими как молекулы газа и фотоны. Большая часть подобных взаимодействий носит очень локальный характер. Так, столкновения между атомами управляются потенциалом Леннарда-Джонса, сила которого убывает обратно пропорционально по меньшей мере шестой степени расстояния. Из этого следует, что любое подобное взаимодействие изменяет состояние окружающих частиц в соответствии с *позицией* атома. Поэтому можно сказать, что окружающая среда производит измерение состояния атома в собственном базисе наблюдаемого координаты. Общее состояние атома и среды при этом становится равным

$$\sum_i \psi_i |x_i\rangle_{\text{атома}} \otimes |x_i\rangle_{\text{среды}} \quad (2.36)$$

Реалистичный наблюдатель не может уследить за всем множеством объектов, которые провзаимодействовали с «нашим» атомом. Поэтому с его точки зрения этот атом в итоге окажется в ситуации, речь о которой шла в подразд. 2.2.4. Он перестанет быть в состоянии когерентной суперпозиции координатных собственных состояний (которая представляет собой собственное состояние импульса), но станет вместо этого статистической смесью. Утрата когерентности из-за взаимодействия квантовой системы с ее окружением называется *дефазированием*, или *декогеренцией* (dephasing, или decoherence).

Упражнение 2.55. Первоначально атом находится в состоянии (2.35). Он испытывает декогеренцию, запутываясь со средой согласно (2.36). Напишите ансамбль, описывающий состояние атома после декогеренции.

Поскольку измерение, вызванное средой, происходит в координатном базисе, оно никак не вредит координатным собственным состояниям. В самом деле, если атом приготовлен в состоянии с определенной координатой, сумма в (2.35) состоит только из одного члена. В этом случае взаимодействие со средой не приведет к запутыванию, и состояние (2.36) будет разделимым.

В процессе взаимодействия системы со средой, как правило, доминирует один физический механизм. Соответственно, в гильбертовом

пространстве системы найдется базис, элементы которого не будут запутываться со средой и потому не станут декогерировать¹. Такой базис называется *предпочтительным для декогеренции* (decoherence-preferred basis).

Благодаря локальной природе физических взаимодействий координатный базис часто и является предпочтительным с точки зрения декогеренции для кинетических степеней свободы. Именно поэтому намного проще готовить объекты в состоянии с определенной координатой, чем с определенным импульсом, хотя математически оба случая равноправны. Аналогичным образом можно объяснить, почему суперпозиции мертвых и живых кошек никогда не наблюдаются в природе, хотя математически эти состояния не менее «легитимны», чем любая из составляющих этой суперпозиции. Среда постоянно измеряет положение различных частей тела кошки, взаимодействуя с ними. Поскольку результаты этих измерений содержат информацию о том, мертва кошка или жива, любая когерентная суперпозиция этих состояний мгновенно декогерирует. Иными словами, предпочтительный для декогеренции базис пространства состояний кошки, каким бы он ни был, не включает в себя суперпозиций мертвых и живых состояний.

Для внутренних же состояний квантовых объектов, как и для движения в микроскопическом масштабе, такого как перемещение электронов в атомах, координатный базис не является предпочтительным с точки зрения декогеренции. Дело в том, что электростатические взаимодействия, которые приводят к декогеренции, обычно вызываются объектами, находящимися на более далеких расстояниях, нежели размер самого атома — а следовательно, в масштабе атомных расстояний уже не могут рассматриваться как локальные.

Гораздо более перспективным кандидатом на роль предпочтительного с точки зрения декогеренции базиса для внутренних состояний является собственный базис оператора энергии, т. е. гамильтониан. Это следствие адиабатической теоремы (отступление 2.4). С одной стороны, поскольку энергетические уровни электронов в атомах довольно далеки один от другого (разд. 4.4), поля, возникающие в ходе столкновения, как правило, достаточно «гладки» для того, чтобы атом, первоначально находившийся в энергетическом собственном состоянии,

¹ W.H. Zurek, Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical, *Reviews of Modern Physics* 75, 715 (2003).

Отступление 2.4. Адиабатическая теорема

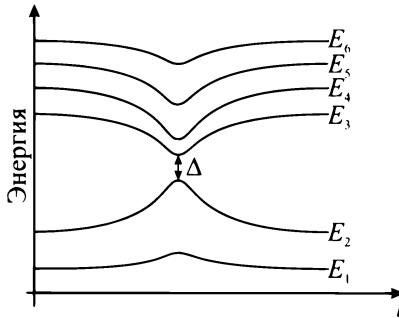
Предположим, что в момент времени $t = 0$ некоторая квантовая система находится в одном из собственных состояний $|\psi(0)\rangle = |E_m\rangle$ своего гамильтониана. Этот гамильтониан $\hat{H}(t)$ зависит от времени и имеет дискретный энергетический спектр $\{E_n(t)\}$. Адиабатическая теорема Макса Борна и Владимира Фока (1928) гласит, что если гамильтониан изменяется достаточно медленно, то система с высокой точностью останется в прежнем энергетическом собственном состоянии.

В качестве визуального примера рассмотрим следующий эксперимент, который можно провести дома. Поместите компас между полюсами подковообразного магнита. Стрелка встанет вдоль линий его магнитного поля. Теперь, если мы будем медленно поворачивать магнит, стрелка будет следовать за ним, сохраняя ориентацию вдоль силовой линии. Если же мы повернем магнит быстро или если магнит окажется слабым, стрелка потеряет свою настроенность на него, и ей потребуется некоторое время, чтобы вновь настроиться. Это, по существу, и есть адиабатическая теорема.

Условие адиабатичности можно приблизительно сформулировать как

$$\frac{d}{dt} E_n \ll \hbar \Delta^2, \quad (2.37)$$

где Δ — минимальное расстояние между E_m и другими энергетическими собственными состояниями в ходе эволюционных процессов (см. рисунок). Полное доказательство адиабатической теоремы относительно сложно и выходит за рамки данного курса.



Схематический вид эволюции энергетических собственных значений атомов во время столкновения. Показанная здесь величина Δ соответствует адиабатическому условию для $m = 2$.

в этом состоянии и остался¹. С другой стороны, столкновение непредсказуемым образом повлияет на *квантовую фазу* каждого энергетического собственного состояния, которое эволюционирует согласно $|\psi_E(t)\rangle = e^{-i \int E(t)/\hbar dt} |\psi_E(0)\rangle$, как в (1.25). Таким образом, хотя энерги-

¹ Такие столкновения называются упругими.

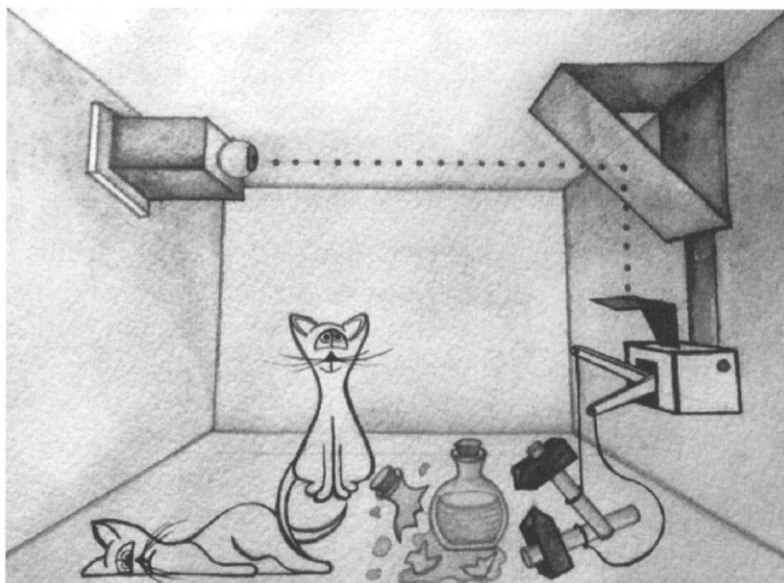
ческие собственные состояния обычно сохраняются при столкновении, их когерентность, как правило, теряется. Такое поведение характерно для предпочтительного с точки зрения декогеренции базиса и является основной причиной, по которой в экспериментах атомы и молекулы чаще всего наблюдаются именно в энергетических собственных состояниях.

2.4.3. Интерпретации квантовой механики

В подразделе 2.4.1 мы проанализировали процесс измерения: квантовый объект становится запутанным с макроскопическим измерительным прибором, а затем и с экспериментатором. После этого мы обсудили процесс схожей природы, в котором роль экспериментатора играет окружающая среда. В обоих случаях ясно, что экспансия суперпозиции и постепенное «заражение» ею дальнейших объектов будут продолжаться и после того момента, на котором мы прервали свой анализ. Экспериментатор Алиса будет вести себя хотя бы немного по-разному в зависимости от того, на каком детекторе она зарегистрировала событие; эта разница, какой бы небольшой она ни была, повлияет на атомы и фотоны вокруг нее. Аналогично частицы, которые столкнулись с атомом, как это было описано в примере про декогеренцию, будут взаимодействовать с другими объектами, претерпевать оптические переходы и т. п. Чем более макроскопична квантовая суперпозиция, тем с большей вероятностью она будет включать в себя все новые объекты. Запутанность, возникающая при любом измерении, намеренном или ненамеренном, неизбежно расширяется и со временем охватывает всю Вселенную, порождая гигантское состояние суперпозиции.

Ситуации, подобные измерению, — в которых состояние микроскопического объекта влияет на состояние макроскопических — возникают в природе бесконечно часто. Соответственно, Вселенная оказывается в невообразимо сложном состоянии суперпозиции. Доводя эти рассуждения до логической крайности, можно было бы сказать, что вся случайность в мире имеет квантовую природу. Например, когда мы бросаем монетку, на ее движение влияют крохотные колебания наших рук и движение молекул воздуха; на то и другое, в свою очередь, действуют квантовые флуктуации. Каждый ураган является результатом какой-то квантовой флуктуации когда-то в прошлом где-то в мире. Для любого возможного результата некоторого случайного события или серии таких событий, сколь угодно маловероят-

Отступление 2.5. Кошка Шрёдингера



Кошка Шрёдингера представляет собой нечто более сложное, чем просто суперпозицию мертвого и живого состояний некоей кошки. Вот цитата из статьи Шрёдингера 1935 г. в немецком журнале *Naturwissenschaften* («Естественные науки»)*.

«Кошка заперта в стальном ящике вместе со следующим устройством (которое должно быть ограждено от прямого вмешательства кошки): в счетчике Гейгера имеется крохотное количество радиоактивного вещества, настолько маленькое, что на протяжении часа может распасться один атом, а может, с равной вероятностью, не распасться ни одного; если атом распадется, трубка счетчика разрядится и посредством реле освободит молоток, который разобьет небольшую ампулу с синильной кислотой. Если предоставить всю систему самой себе на час, то затем можно сказать, что кошка все еще жива, если за это время не распалось ни одного атома. На пси-функции всей системы это отразится тем, что мертвая и живая кошка в ней (простите за выражение) смешаны, или размазаны, в равных пропорциях».

На современном языке квантовые состояния кошки и атома запутаны и описываются уравнением

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\text{атом не распался}\rangle \otimes |\text{кошка жива}\rangle + |\text{атом распался}\rangle \otimes |\text{кошка мертва}\rangle).$$

С субъективной точки зрения кошки в ящике квантовая суперпозиция коллапсирует, как только эта запутанность образуется (подразд. 2.4.1). Однако экспериментатор снаружи ящика, обладающий бесконечными техническими возможностями, в принципе способен подтвердить присутствие суперпозиции, спроецировав и кошку, и атом на диагональные базисы.

* E. Schrödinger, *Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik*, *Naturwissenschaften* **23**, 807–812, 823–828, 844–849 (1935).

Иллюстрация Р. Казарян.

ной, существует «вселенная», в которой данное событие или события имели место.

Это называется *многомировой интерпретацией* квантовой механики. Предложил ее Хью Эверетт в 1957 г. Хотя эта интерпретация и разрешает логические противоречия копенгагенской, вывод о существовании множественных вселенных чисто спекулятивен в том смысле, что его невозможно проверить экспериментально. Как уже говорилось, став частью запутанного состояния суперпозиции, мы теряем всякую возможность оценивать и измерять его.

Более того, этот вывод верен только в том случае, если считать, что квантовая физика представляет собой окончательную, универсальную теорию мира. Хотя все эксперименты до сих пор показывают, что дело обстоит именно так, следует учитывать, что они ограничены нашей способностью изолировать квантовую систему от окружающей среды. Самыми крупными объектами, для которых наблюдались квантовые суперпозиции, являются органические молекулы, состоящие из нескольких тысяч атомов. Можно было бы предположить, что при достижении определенного уровня сложности квантовые суперпозиции прекращают существование по каким-то фундаментальным причинам; мало того, к этому ведут некоторые аргументы, проистекающие из общей теории относительности. Поэтому вопрос о пределах применимости квантовой физики — один из важных открытых вопросов современной науки. Чтобы ответить на него, нам нужно строить все более макроскопические состояния суперпозиции и проверять, сохраняют ли они при таких размерах свои свойства.

Шокирующая природа многомировой интерпретации часто рассматривается как самый сильный аргумент против нее. Однако следует помнить, что копенгагенская интерпретация тоже полна парадоксов, с некоторыми из которых мы уже встречались на страницах данной книги. Эти парадоксы возникают исключительно из-за представления о коллапсе квантовых состояний, связанном с измерениями, и исчезают в многомировой картине, где никаких коллапсов нет.

Рассмотрим, к примеру, парадокс Элицура — Вайдмана с «бомбой» (отступление 1.4). В рамках многомировой интерпретации мы сказали бы, что фотон, находившийся первоначально в локализованном состоянии суперпозиции

$$|+\rangle = \frac{|H\rangle + |V\rangle}{\sqrt{2}},$$

претерпевает эволюцию по мере своего продвижения сквозь интерферометр и в какой-то момент запутывается с бомбой. После произошедшего состояние обоих объектов становится

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|H, \text{нижний путь}\rangle \otimes |\text{бомба взорвалась}\rangle + \\ + |V, \text{верхний путь}\rangle \otimes |\text{бомба не взорвалась}\rangle].$$

Эта запутанность изменяет состояние фотона, поэтому неудивительно, что он будет продолжать эволюционировать, проходя через интерферометр, иначе, чем делал бы это в случае отсутствия бомбы. Со временем его поглотит один из двух детекторов, и состояние станет¹

$$\frac{1}{\sqrt{2}} |\text{бомба взорвалась}\rangle \otimes |\text{детектор «+» не сработал}\rangle \otimes \\ \otimes |\text{детектор «-» не сработал}\rangle + \frac{1}{2} |\text{бомба не взорвалась}\rangle \otimes \\ \otimes |\text{детектор «+» сработал}\rangle \otimes |\text{детектор «-» не сработал}\rangle + \\ + \frac{1}{2} |\text{бомба не взорвалась}\rangle \otimes |\text{детектор «+» не сработал}\rangle \otimes \\ \otimes |\text{детектор «-» сработал}\rangle.$$

Таким образом, неверно говорить, что щелчок в детекторе «-» звучит в отсутствие контакта фотона с бомбой. На самом деле их взаимодействие имело место и породило приведенную выше запутанную суперпозицию, в которой событие в детекторе «-» представляет только один из членов. Но, поскольку эта суперпозиция включает в себя макроскопические объекты, она быстро охватит собой всю Вселенную, включая и наблюдателей. Поэтому у наблюдателей во «вселенной», где щелкнул детектор «-», не будет возможности увидеть остальные члены суперпозиции. С их точки зрения, остальных членов не существует и, следовательно, бомба была обнаружена без взаимодействия.

Упражнение 2.56. Два фотона в состоянии Белла $|\Psi^-\rangle$ раздаются Алисе и Бобу. Они проводят над своими фотонами неразрушающее измерение по фон Нейману в базисах:

$$\left\{ |\theta\rangle, \left| \frac{\pi}{2} + \theta \right\rangle \right\} \text{ и } \{|H\rangle, |V\rangle\} \text{ соответственно.}$$

¹ Состояние фотона я опустил для краткости.

Каково состояние двух фотонов и двух измерительных приборов после этого измерения? Для обозначения релевантных элементов базиса в гильбертовых пространствах приборов Алисы и Боба используйте $\{|w_{A1}\rangle, |w_{A2}\rangle\}$ и $\{|w_{B1}\rangle, |w_{B2}\rangle\}$ соответственно.

Подсказка: примените уравнение (2.6).

2.4.4. Дерево суперпозиции*

Прежде чем завершить разговор о многомировой интерпретации, мы должны решить следующий вопрос. Мы утверждаем, что коллапс квантового состояния есть субъективное явление, которое происходит только с точки зрения наблюдателя в момент, когда тот становится частью запутанного состояния. Но тогда из этого должно следовать, что постулат квантовой механики об измерениях на самом деле не постулат: он должен быть следствием постулата о гильбертовом пространстве. То есть, по идее, мы должны иметь возможность вывести правило Борна — что полученная в результате измерения вероятность, *какой ее видит наблюдатель*, равна квадрату абсолютной величины амплитуды. Это и есть наша цель в данном разделе.

Прежде чем начать, я хотел бы предупредить читателя: этот раздел довольно сложен (пожалуй, сложнее, чем остальные части книги) и не входит в мейнстрим квантовой механики. Я рекомендовал бы пропустить его при первом прочтении.

Не пытаясь добиться полной строгости, попробуем обосновать правило Борна для состояния (2.32). Как наблюдатель Алиса определяет вероятность? Она повторяет эксперимент много раз и считает, сколько раз какой из результатов при этом наблюдался. Но проблема в том, что сама Алиса тоже является частью суперпозиционного состояния, так что эти видимые вероятности различны в каждом члене суперпозиции. Например, существует «вселенная», в которой Алиса повторила свой эксперимент тысячу раз и каждый раз получила $|H\rangle$. В этой вселенной Алиса придет к выводу, что вероятность обнаружить $|H\rangle$ равна единице, что прямо противоречит правилу Борна.

Однако мы можем доказать, что правило Борна действует в подавляющем большинстве вселенных.

Начнем с упрощенного случая равных вероятностей для двух результатов измерения, так что $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$. Предположим, что Алиса производит измерения на множественных копиях суперпозиции $(|H\rangle + |V\rangle)/\sqrt{2}$ в каноническом базисе. После первого измерения она

становится частью запутанного состояния, в которое входят два слагаемых:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle \otimes |\text{Алиса увидела } H\rangle + |\text{Алиса увидела } V\rangle\rangle). \tag{2.38}$$

После второго измерения слагаемых будет уже четыре:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = & \tag{2.39} \\ & = \frac{1}{2} (|HH\rangle \otimes |\text{Алиса увидела } H \text{ в 1-м измерении, } H \text{ во 2-м измерении}\rangle + \\ & + |HV\rangle \otimes |\text{Алиса увидела } H \text{ в 1-м измерении, } V \text{ во 2-м измерении}\rangle + \\ & + |VH\rangle \otimes |\text{Алиса увидела } V \text{ в 1-м измерении, } H \text{ во 2-м измерении}\rangle + \\ & + |VV\rangle \otimes |\text{Алиса увидела } V \text{ в 1-м измерении, } V \text{ во 2-м измерении}\rangle), \end{aligned}$$

и т.д. Эту суперпозицию можно представить в виде древовидной структуры, где каждое измерение удваивает число членов в суперпозиции и ветвей дерева (рис. 2.5 а). После n измерений их число станет равно 2^n . Каждый член имеет амплитуду $\sqrt{1/2^n}$ и соответствует уникальному пути вниз по ветвям дерева.

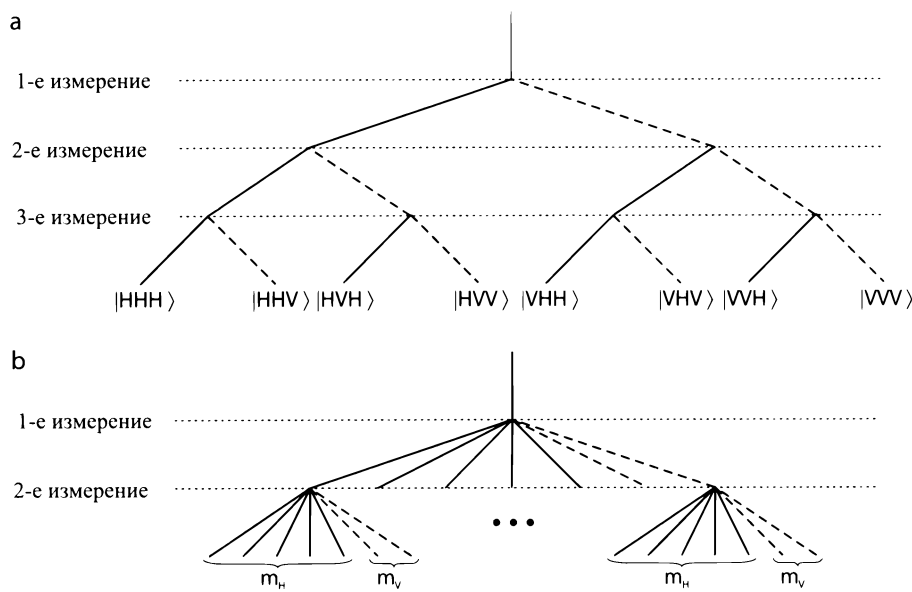


Рис. 2.5. Дерево суперпозиции. Сплошные линии соответствуют наблюдениям горизонтальной поляризации, а пунктирные — вертикальной. *a* — для равной суперпозиции $|H\rangle$ и $|V\rangle$ каждое измерение удваивает число ветвей; *b* — для неравных суперпозиций мы используем множественное ветвление, чтобы уравнивать амплитуды ветвей

В каком бы слагаемом суперпозиции Алиса ни находилась, она не может видеть остальные слагаемые, но зато знает всю историю результатов измерений, имевших место в пределах ее ветви развития событий. Соответственно, она может вычислить частоту встречаемости для каждого из своих результатов и интерпретировать эти статистические результаты как вероятности. А именно: если Алиса наблюдала $|H\rangle$ k раз, а $|V\rangle$ — $n - k$ раз, то она сделает вывод, что вероятность обнаружить $|H\rangle$ равна k/n .

Упражнение 2.57. Предположим, что Алиса производит большое число n измерений на копиях состояния $(|H\rangle + |V\rangle)/\sqrt{2}$. Вычислите долю путей по дереву суперпозиции, содержащих k результатов $|H\rangle$ и $n - k$ результатов $|V\rangle$.

Подсказка: загляните в упр. Б.8.

Ответ:

$$\frac{1}{2^n} \binom{n}{k} = \frac{1}{2^n} \frac{n!}{k!(n-k)!}. \quad (2.40)$$

Упражнение 2.58^s. Получите результат предыдущего упражнения численно и постройте график его зависимости от k для $n = 100$.

Ответ: см. рис. 2.6 а.

Упражнение 2.59*. Покажите, что для $n \gg 1$ уравнение (2.40) может быть аппроксимировано гауссовой функцией

$$A(n) \exp \left[-2 \frac{\left(k - \frac{n}{2}\right)^2}{n} \right], \quad (2.41)$$

где $A(n)$ зависит только от n .

Подсказка: этот известный математический результат можно получить с использованием следующих приближений:

1. Аппроксимируйте натуральный логарифм $\binom{n}{k}$ с использованием формулы Стирлинга как $\ln x! \approx x (\ln x - 1)$.
2. Приравняйте $k = \frac{n}{2} + \delta$ и считайте $\delta \ll n$. Затем аппроксимируйте $\ln\left(\frac{n}{2} \pm \delta\right)$ при помощи разложения Тейлора *второго* порядка.

Из этих упражнений мы можем увидеть, что для подавляющего большинства путей на дереве суперпозиции $k \approx \frac{n}{2}$, т.е. они содержат приблизительно равное число событий H и V со стандартными отклонениями, пропорциональными корню из числа измерений (рис. 2.6 а).

Опыт наблюдателей на этих путях согласуется с правилом Борна. Хотя, как уже говорилось, существуют «девиантные» вселенные, в которых правило Борна не действует, их число невообразимо мало.

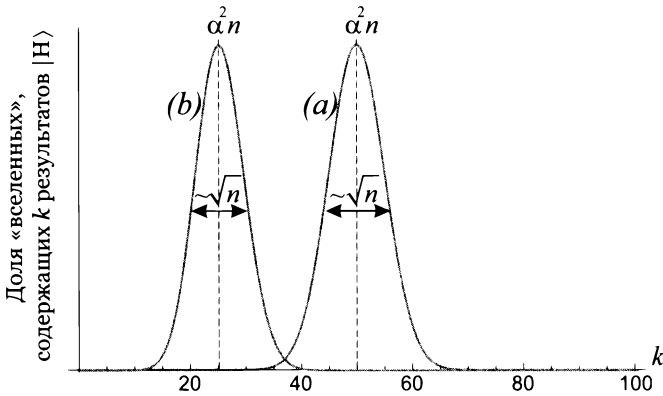


Рис. 2.6. Число путей на дереве суперпозиции, содержащих k событий обнаружения горизонтальной поляризации при $n = 100$ измерений для $\alpha^2 = \beta^2 = \frac{1}{2}$ (a) и $\alpha^2 = \frac{1}{4}$, $\beta^2 = \frac{3}{4}$ (b)

Теперь давайте повторим вывод для более сложных условий. Предположим, что начальное состояние фотона $|\psi\rangle = \alpha|H\rangle + \beta|V\rangle$ с амплитудами α и β , необязательно равными (хотя мы по-прежнему считаем их действительными)¹. После первого измерения общее состояние фотона и Алисы:

$$|\Psi\rangle = \alpha|H\rangle \otimes |\text{Алиса увидела } H\rangle + \beta|V\rangle \otimes |\text{Алиса увидела } V\rangle. \quad (2.42)$$

Дерево суперпозиции ветвится с каждым последующим измерением. Однако рассуждения, которые мы провели выше для случая $\alpha = \beta$, работать не будут, поскольку разные ветви будут входить в дерево суперпозиции с разными амплитудами. Чтобы разобраться с этим вопросом, модифицируем дерево суперпозиции следующим образом.

Воспользуемся приближением:

$$\alpha = \sqrt{\frac{m_H}{m_H + m_V}}, \quad \beta = \sqrt{\frac{m_V}{m_H + m_V}}, \quad (2.43)$$

¹ Этот вывод сделан на основе статей W. H. Zurek, Environment-Assisted Invariance, Entanglement, and Probabilities in Quantum Physics, Physical Review Letters **90**, 120404 (2003); Probabilities from entanglement, Born's rule from invariance, Physical Review A **71**, 052105 (2005).

где m_H и m_V — натуральные числа. Выбирая эти величины достаточно большими, мы можем аппроксимировать любые действительные α и β сколь угодно точно. Алиса — это сложная квантовая система; ее гильбертово пространство очень многомерно. Поэтому в соответствии с упр. А.25, мы можем ввести множество ортонормальных состояний Алисы $\left\{ |h_i^{(l)}\rangle \right\}_{i=1}^{m_H}$ и $\left\{ |v_i^{(l)}\rangle \right\}_{i=1}^{m_V}$, таких что

$$|\text{Алиса увидела } H \text{ в } l\text{-м измерении}\rangle = \frac{1}{\sqrt{m_H}} \sum_{i=1}^{m_H} |h_i^{(l)}\rangle; \quad (2.44)$$

$$|\text{Алиса увидела } V \text{ в } l\text{-м измерении}\rangle = \frac{1}{\sqrt{m_V}} \sum_{i=1}^{m_V} |v_i^{(l)}\rangle. \quad (2.45)$$

Подставив эти разложения вместе с (2.43) в (2.42), получаем

$$|\Psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{m_H + m_V}} \left(\sum_{i=1}^{m_H} |H\rangle \otimes |h_i^{(l)}\rangle + |V\rangle \otimes \sum_{i=1}^{m_V} |v_i^{(l)}\rangle \right). \quad (2.46)$$

Эта суперпозиция имеет $m_H + m_V$ ортогональных членов, причем m_H соответствуют наблюдению горизонтальной поляризации, а m_V — вертикальной. Каждое следующее измерение вызывает дальнейшее ветвление дерева суперпозиции таким способом, что после n измерений оно насчитывает всего $(m_H + m_V)^n$ ветвей (рис. 2.5 б). Важно, что все ветви теперь имеют равные амплитуды, так что мы можем продолжать рассуждения аналогично тому, как рассуждали в уже изученном случае $\alpha = \beta$.

Упражнение 2.60. Для состояния суперпозиции, приготовленного после n измерений:

- вычислите долю членов, содержащих k результатов $|H\rangle$ и $n - k$ результатов $|V\rangle$;
- оцените полученный результат численно и постройте график его зависимости от k для $n = 100$, $\alpha^2 = \frac{1}{4}$, $\beta^2 = \frac{3}{4}$;
- вычислите гауссово приближение в окрестностях $k = \alpha^2 n$ аналогично упр. 2.59.

Ответ:

- $\binom{n}{k} m_H^k m_V^{n-k}$;
- см. рис. 2.6 б;
- $A(n) \exp \left[-\frac{(k - \alpha^2 n)^2}{2\alpha^2 \beta^2 n} \right]. \quad (2.47)$

Мы снова видим, что правило Борна выполняется в подавляющем большинстве миров. Можно заключить, что постулат об измерениях в квантовой механике следует из постулата о гильбертовом пространстве и унитарности квантовой эволюции. Означает ли это, что нам следует отказаться от этого постулата из-за его избыточности и логической противоречивости?

К сожалению, мы не можем этого сделать. Даже из приведенного примера видно, как трудно — и с вычислительной, и с психологической точки зрения — пользоваться этим подходом в практических целях. По существу, всякий раз, когда мы хотим предсказать результат измерения фотона, нам нужно вычислять волновую функцию Вселенной! Если наша цель в том, чтобы делать предсказания для явлений, с которыми сталкиваются конечные наблюдатели вроде нас, людей, гораздо разумнее просто считать, что волновая функция коллапсирует — поскольку именно это с ней и происходит с субъективной точки зрения наблюдателя. Тогда нашим инструментом становится копенгагенская интерпретация. Поэтому в оставшейся части этой книги мы будем «затыкаться и считать», лишь изредка ссылаясь на многомировую интерпретацию, чтобы увидеть более широкую перспективу.

2.5. Квантовые вычисления

Идея квантовых вычислений состоит в том, чтобы использовать в качестве основных единиц информации квантовые биты. В отличие от классического бита, кубит может находиться не только в определенном состоянии $|0\rangle$ или $|1\rangle$, но и в суперпозиции этих состояний. Соответственно, множественные кубиты тоже могут находиться в состояниях суперпозиции, запутанных по отношению к гильбертовым пространствам отдельных кубитов.

Именно запутанность делает квантовый компьютер намного более мощным, чем классический. Рассмотрим, например, три кубита в суперпозиции:

$$a_{000} |000\rangle + a_{001} |001\rangle + a_{010} |010\rangle + a_{011} |011\rangle + a_{100} |100\rangle + a_{101} |101\rangle + a_{110} |110\rangle + a_{111} |111\rangle. \quad (2.48)$$

Производя некоторый набор логических операций с этими тремя кубитами в данном состоянии, мы одновременно производим их со всеми $2^3 = 8$ множествами значений кубитов, содержащихся

в состоянии (2.48). Таким образом мы получаем экспоненциальную степень параллелизма в вычислениях. К примеру, даже крохотный 30-кубитный квантовый компьютер будет работать в миллиард ($2^{30} \approx 10^9$) раз быстрее своего классического эквивалента.

Конечно, квантовые вычисления не так просты, как может показаться на этом примере. Проблемы возникают и на теоретическом, и на практическом уровне. Вот всего один пример. Предположим, квантовый компьютер провел расчет на множестве задач в состоянии суперпозиции и теперь нам нужно узнать ответ для той из этих задач, которая нас в данный момент интересует. Но ведь ответы для всех задач на выходе квантового компьютера тоже находятся в состоянии суперпозиции! Если попытаться измерить это состояние, мы получим результат, соответствующий одному случайно выбранному члену суперпозиции. А систематическое считывание конкретного члена, связанного с интересующей нас задачей, невозможно.

Таким образом оказывается, что параллелизм, предлагаемый квантовыми компьютерами, полезен для решения только очень ограниченного класса задач. Одна из них — разложение на простые множители больших чисел, что, как известно, для классических компьютеров экспоненциально сложно и потому используется как основа для систем шифрования с открытым ключом (разд. 1.6). Технология быстрого разгадывания шифров с открытым ключом представляет существенную угрозу для информационной безопасности общества. Это одна из причин, по которым квантовые вычисления остаются предметом интенсивных исследований.

К счастью, эта угроза пока не самого ближайшего будущего, потому что квантовый компьютер очень трудно построить. Как мы уже говорили в разд. 2.4, любое взаимодействие квантового состояния со средой делает среду частью суперпозиции. С точки зрения наблюдателя, который не имеет контроля над средой, это эквивалентно коллапсу суперпозиции. Вероятность такого события особенно высока для многосоставных запутанных состояний, поскольку взаимодействие *любого* из входящих в него кубитов со средой вызовет декогеренцию всей суперпозиции.

Это одна из основных причин, по которым технология квантовых вычислений развивается так медленно. В настоящий момент мы не знаем даже, какая физическая система лучше всего подходит на роль носителя квантовой информации. Исследовательские группы по всему миру изучают разные системы — атомы и ионы в ловушках, сверхпроводящие цепи, квантовые точки и даже жидкости, — пытаюсь определить степень их перспективности для этого применения.

Фотон, кстати говоря, тоже оказывается перспективным кандидатом. Дело в том, что средняя энергия оптического фотона (2–4 эВ) соответствует нескольким десяткам тысяч кельвинов, что намного превышает типичную для окружающей нас среды температуру. В результате шансы на то, что фотоны будут взаимодействовать с этой средой, не слишком высоки, поэтому они относительно устойчивы к декогеренции. Кроме того, поляризация фотона представляет собой естественную кодировку кубита: например, логическое состояние $|0\rangle$ может соответствовать горизонтальной поляризации, а состояние $|1\rangle$ — вертикальной.

С таким кодированием также несложно осуществлять однокубитные логические операции. Например, мы можем выполнить логическую операцию отрицания (NOT gate) посредством полуволновой пластинки с оптической осью, ориентированной под углом $3\pi/4$ к горизонтали: состояние $|0\rangle$ ($|H\rangle$) при этом станет $|1\rangle$ ($|V\rangle$) и наоборот (см. упр. 1.24). Еще одна важная операция — вентиль Адамара (Hadamard gate) (см. упр. 1.27) с матрицей $\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, который переводит друг в друга состояния канонической и диагональной поляризации. Вентиль Адамара реализуется при помощи полуволновой пластинки, ориентированной под углом $\pi/8$ к горизонтали.

Чтобы получить полный диапазон вычислительных возможностей, доступных классическому компьютеру (машине Тьюринга), нам дополнительно потребуются *условные* операции, в которых кубиты взаимодействуют между собой: состояние одного кубита влияло бы на состояние другого. Теоретическое исследование показало: для постройки универсального квантового компьютера достаточно в дополнение к однокубитным операциям иметь возможность реализации всего лишь одного типа двухкубитных операций: вентиля *контролируемого отрицания* [controlled NOT (C-NOT) gate]. Реализация такой операции — святой Грааль квантовых вычислений в любой физической системе. Особенно сложно добиться этого от фотонов.

Вентиль C-NOT предполагает участие двух кубитов: *управляющего* и *целевого*. Если состояние управляющего кубита $|0\rangle$, то вентиль не изменяет значений кубитов. Но если управляющий кубит равен $|1\rangle$, то значение целевого кубита «переворачивается»: $|0\rangle$ становится $|1\rangle$, а $|1\rangle$ становится $|0\rangle$. Это показано в табл. 2.2¹.

¹ Обратите внимание: выходное значение целевого кубита соответствует результату действия вентиля «исключающее ИЛИ» (XOR).

Таблица 2.2 Таблица истинности вентиля C-NOT

Вход		Выход	
Управляющий	Целевой	Управляющий	Целевой
$ 0\rangle$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$
$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$
$ 1\rangle$	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ 1\rangle$
$ 1\rangle$	$ 1\rangle$	$ 1\rangle$	$ 0\rangle$

Вентиль C-NOT можно представить себе в виде гномика, который смотрит на поляризацию управляющего фотона и, если она вертикальна, вставляет на пути целевого фотона полуволновую пластинку под углом 45° . Проблема в том, что гномик должен каким-то образом проделывать это без измерения управляющего фотона, поскольку такое измерение запутало бы его (гномика) с кубитами и вызвало коллапс их квантового состояния (подразд. 2.4.1). Как явствует из следующих упражнений, это теоретически возможно.

Упражнение 2.61. Напишите матрицы операторов, соответствующие следующим операциям над парой кубитов. Логическое состояние $|0\rangle$ кодируется горизонтальной поляризацией, а логическое состояние $|1\rangle$ — вертикальной.

- а) Вентиль C-NOT.
 - б) Операция, которая оставляет состояния $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ в неизменном виде, но умножает состояние $|11\rangle$ на фазовый множитель -1 (*управляемый фазовый сдвиг*, или *вентиль C-Phase*).
 - с) Тензорное произведение единичного оператора для первого кубита и вентиля Адамара для второго (целевого) фотона.
- Унитарны ли эти операции?

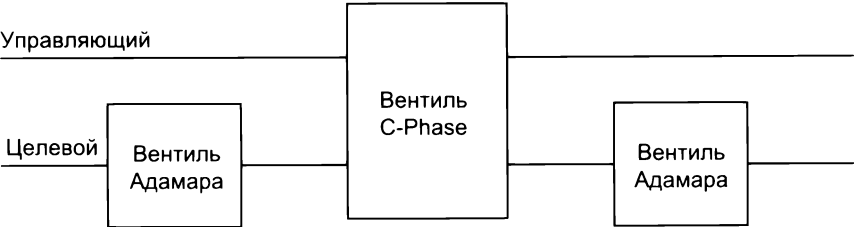


Рис. 2.7. Реализация вентиля C-NOT с использованием вентиля C-Phase и двух вентилях Адамара

Упражнение 2.62. Покажите, что вентиль C-NOT может быть построен путем последовательного применения вентиля Адамара в пространстве Боба, управляемого фазового сдвига и вновь вентиля Адамара в пространстве Боба (рис. 2.7).

Упражнение 2.63. Покажите, что вентиль C-Phase между двумя фотонами может быть реализован действием гамильтониана $\hat{H} = \hbar\omega|VV\rangle\langle VV|$ в течение времени π/ω .

Подсказка: другие собственные состояния гамильтониана ($|HH\rangle$, $|HV\rangle$ и $|VH\rangle$) соответствуют нулевым значениям энергии.

Упражнение 2.64. Покажите, что вентиль C-NOT представляет собой измерение фон Неймана в смысле (2.33) для $N = M = 2$ при $|w_0\rangle = |w_1\rangle$.

Упр. 2.62 показывает, что если у нас имеется вентиль C-Phase, то с его помощью можно построить вентиль C-NOT. Это не решает задачи, но сводит ее к несколько более простой: вместо того чтобы изменять значения кубитов, нам достаточно всего лишь изменить их фазы. В применении к фотонам для реализации вентиля C-Phase требуется оптический элемент, в котором фотон претерпевал бы различные фазовые сдвиги (т.е. различные показатели преломления) в зависимости от поляризации присутствующего там же другого фотона. Это не то, что мы обыкновенно наблюдаем в оптике: как правило, если в одной и той же среде присутствуют множественные световые волны, они не взаимодействуют, но распространяются независимо от других волн. Ситуации, в которых электромагнитные волны влияют друг на друга, относятся к классу *нелинейных* оптических явлений. Нелинейные свойства наблюдаются в привычных нам средах, таких как стекло или кристаллы, только когда по крайней мере одно из полей чрезвычайно мощно, на уровне триллионов фотонов. Сделать нелинейные оптические эффекты значительными на уровнях оптической интенсивности, соответствующих единичным фотонам, — сложная задача, изучением которой в настоящее время занимается множество научных групп.

Упражнение 2.65. Покажите, что операторы из упр. 2.61 (a, b) могут преобразовать разделимое состояние в запутанное (ср.: упр. 2.17).

Упражнение 2.66. Допустим, у вас есть вентиль C-NOT для фотонов. Предложите схему, которая использует этот вентиль для реализации измерения двух фотонов в базисе Белла.

2.6. Квантовая телепортация и ее приложения

2.6.1. Квантовая телепортация

Предположим, у Алисы имеется единственная копия фотона в некотором квантовом состоянии, который она хотела бы передать Бобу. Однако состояние этого фотона ей неизвестно, и прямого канала квантовой связи между Алисой и Бобом тоже нет. На первый взгляд миссия Алисы невыполнима. Действительно, если она не может послать нужный фотон Бобу непосредственно, то единственное, что ей остается, — это измерить его. Но, как говорилось в подразд. 1.4.2, измерение единственной копии квантового состояния дает о нем очень мало информации — совершенно недостаточно, чтобы воспроизвести точную его копию где-то в другом месте. И все же, как мы увидим, Алиса может воспользоваться мощным инструментом — запутанностью, — чтобы передать состояние своего фотона Бобу опосредованно со 100%-ной вероятностью и полной достоверностью.

В подразд. 2.2.1 мы изучали удаленное приготовление состояния — квантовый протокол связи, который позволяет передать квантовое состояние от Алисы Бобу посредством общего для обеих сторон запутанного «ресурсного» состояния и классического канала связи. Чтобы удаленно приготовить желаемое состояние в локации Боба, Алиса должна знать, что это за состояние. Измерив свою часть запутанного ресурса в базисе, выбранном в соответствии с этим знанием, Алиса удаленно переводит принадлежащую Бобу часть этого ресурса в желаемое состояние или состояние, ортогональное таковому.

Протокол квантовой телепортации в некоторых отношениях похож на вышеописанный. Однако, в отличие от ситуации с удаленным приготовлением состояния, Алиса ничего не знает о состоянии, которое она хочет передать Бобу. Вместо этого у нее есть одна его копия. Оказывается, посредством совместного измерения этого состояния и своей доли общего ресурса Алиса может достичь аналогичной цели: перевести долю Боба в совместном ресурсе в желаемое состояние или в такое, которое можно перевести в желаемое средствами некоторой локальной операции¹.

¹ Теоретическая идея о квантовой телепортации впервые была опубликована в С.Н. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, W.K. Wootters, Teleporting an Unknown Quantum State via Dual Classical and Einstein–Podolsky–Rosen Channels, Physical Review Letters 70, 1895–1899 (1993). Первые эксперименты (устроенные по-разному) были

Таким образом, в противовес научной фантастике, где телепортация — это перемещение объекта, квантовая телепортация — это перемещение *квантового состояния* объекта. Однако от этого явление квантовой телепортации ничуть не становится менее поразительным. Мы знаем, что для *определения* неизвестного квантового состояния мы должны измерить много его копий разными способами. Еще мы знаем, что теоретически невозможно *клонировать* квантовое состояние, т. е. изготовить его копию, сохранив оригинал в целости. Однако при всем этом мы можем *воссоздать* состояние в отдаленной локации, уничтожив оригинал, причем для этого нам нужна всего лишь одна копия этого состояния.



Рис. 2.8. Квантовая телепортация

На рис. 2.8 схематически показан протокол квантовой телепортации. У Алисы имеется одна копия исходного состояния $|\chi\rangle = \alpha|H\rangle + \beta|V\rangle$ в канале 1, связанном с гильбертовым пространством V_1 ; дополнительно Алиса и Боб располагают запутанным состоянием $|\Psi^-\rangle$ в гильбертовом пространстве $V_2 \otimes V_3$, охватывающем каналы 2 и 3. Следующее упражнение объясняет пошагово, как работает телепортация.

проведены почти одновременно несколькими группами: D. Bouwmeester, J.-W. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter, A. Zeilinger, Experimental Quantum Teleportation, Nature **390**, 6660, 575–579 (1997); D. Boschi, S. Branca, F. De Martini, L. Hardy, S. Popescu, Experimental Realization of Teleporting an Unknown Pure Quantum State via Dual classical and Einstein–Podolsky–Rosen channels, Physical Review Letters **80**, 1121–1125 (1998); A. Furusawa, J.L. Sorensen, S.L. Braunstein, C.A. Fuchs, H.J. Kimble, E.S. Polzik, Unconditional quantum teleportation, Science **282**, 706–709 (1998).

Упражнение 2.67

- Выразите состояние $|\chi\rangle \otimes |\Psi^-\rangle$ в каноническом базисе пространства $\mathbb{V}_1 \otimes \mathbb{V}_2 \otimes \mathbb{V}_3$.
- Выразите состояния канонического базиса $\mathbb{V}_1 \otimes \mathbb{V}_2$ в базисе Белла.
- Выразите состояние $|\chi\rangle \otimes |\Psi^-\rangle$ в виде (2.15), т.е. как линейную комбинацию тензорных произведений между элементами базиса Белла $\mathbb{V}_1 \otimes \mathbb{V}_2$ и нормированными состояниями в $\mathbb{V}_3$.
- Предположим, что Алиса производит локальное измерение на $\mathbb{V}_1 \otimes \mathbb{V}_2$ в базисе Белла. Вычислите вероятность каждого результата этого измерения и состояние, на которое отобразится пространство $\mathbb{V}_3$.
- Алиса сообщает результат своего измерения Бобу по классическому каналу связи. Покажите, что при помощи этой информации Боб может перевести состояние $\mathbb{V}_3$ в $|\chi\rangle$ посредством локальной операции. Напишите эту операцию как оператор и предложите его реализацию при помощи волновых пластинок.

Ответ: см. табл. 2.3.

Таблица 2.3 Выходные состояния квантовой телепортации

Белловское состояние, наблюдаемое Алисой	Вероятность	Состояние в канале Боба	Локальная операция Боба
$ \Phi^+\rangle$	1/4	$-\beta H\rangle + \alpha V\rangle$	$\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y$
$ \Phi^-\rangle$		$\beta H\rangle + \alpha V\rangle$	$\hat{\sigma}_x$
$ \Psi^+\rangle$		$-\alpha H\rangle + \beta V\rangle$	$\hat{\sigma}_z$
$ \Psi^-\rangle$		$-(\alpha H\rangle + \beta V\rangle)$	$\hat{\mathbf{1}}$

Мы видим, что Боб, приняв классическое сообщение от Алисы о том, какое состояние Белла она увидела, и выполнив над своим фотоном одну из операций Паули, получит копию состояния источника $|\chi\rangle$. Само же исходное состояние источника будет уничтожено Алисой в процессе измерения.

Важно, что вероятности для каждого результата измерения Алисы равны 1/4 независимо от параметров α и β исходного состояния. Это означает, что Алиса при своем измерении не узнает ничего об этом состоянии. Боб тоже ничего о нем не узнает (если только не решит в какой-то момент измерить свой фотон). Такая неосведомленность

Отступление 2.6. Можем ли мы телепортировать человека?

Квантовых физиков иногда спрашивают: «Сколько времени пройдет, прежде чем мы сможем телепортировать человека?» Теперь вы можете ответить на этот вопрос. Чтобы телепортировать квантовый объект, требуется две его копии в полностью запутанном состоянии, т. е. в состоянии, которое охватывает все возможные квантовые состояния этого объекта, помимо исходного. Иными словами, чтобы телепортировать капитана «Звездного пути» Пикарда с корабля «Энтерпрайз» на планету Бетазед, нам нужно сначала сделать две его точные копии (одну на корабле и одну на Бетазеде) и подготовить их — т. е. каждую пару молекул в соответствующих телах — в полностью запутанном состоянии!

обеих сторон — обязательное условие для правильной передачи. Если бы мы имели возможность получить хоть какую-нибудь информацию о квантовом состоянии, сохранив при этом его точную копию, мы смогли бы использовать ее для сверхсветовой связи способом, аналогичным тому, который обсуждался в упр. 2.44.

Необходимое условие для реализации протокола телепортации — наличие схемы измерения двух фотонов в базисе Белла. Хотя подобное измерение теоретически представимо, на практике его реализовать так же трудно, как реализовать вентиль C-NOT для фотонов (см. упр. 2.66). Если же доступны только линейные оптические инструменты, то из белловских состояний можно различить только два. Такой подход намного проще реализовать на практике; именно он используется в большинстве экспериментов по телепортации поляризации фотонов.

Упражнение 2.68. Предположим, что пара фотонов в одном из белловских состояний попадает в установку, показанную на рис. 2.9. Покажите, что:

- a) если на входе мы имеем состояние $|\Phi^+\rangle$, то детекторы в двух серых прямоугольниках одновременно увидят идентичные диагонально поляризованные фотоны (т. е. щелкнут либо детекторы 1 и 4, либо детекторы 2 и 3);
- b) если на входе мы имеем состояние $|\Phi^-\rangle$, то детекторы в двух серых прямоугольниках одновременно увидят ортогональные диагонально поляризованные фотоны (т. е. щелкнут либо детекторы 1 и 3, либо детекторы 2 и 4);

- с) если на входе мы имеем состояние $|\Psi^+\rangle$ или $|\Psi^-\rangle$, то события обнаружения фотонов произойдут только в одном из двух серых прямоугольников.

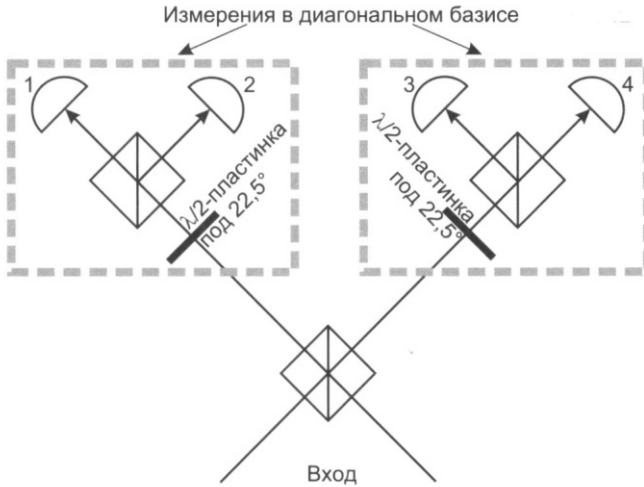


Рис. 2.9. Схема частичного измерения в базисе Белла (квадратами обозначены поляризующие светоделители)

С квантовой телепортацией тесно связан еще один протокол — *обмен запутанностью* (entanglement swapping)¹. Начинается он с четырех фотонов, приготовленных в попарно запутанном состоянии $|\Psi_{12}^-\rangle \otimes |\Psi_{34}^-\rangle$. Измерение в таком случае производится на фотонах в каналах 2 и 3 в базисе Белла (рис. 2.10). Это измерение телепортирует фотон, бывший в канале 2, в канал 4 (или, что эквивалентно, фотон из канала 3 в канал 1). В результате фотоны в каналах 1 и 4 становятся запутанными, хотя они никогда до этого не взаимодействовали.

В следующем упражнении делается более строгий анализ.

Упражнение 2.69. Измерение выполняется в каналах 2 и 3 состояния $|\Psi_{12}^-\rangle \otimes |\Psi_{34}^-\rangle$ в базисе Белла (рис. 2.10). Определите результирующее состояние каналов 1 и 4 после каждого из возможных результатов измерения.

¹ Теоретическая идея: М. Żukowski, А. Zeilinger, М.А. Horne, and А.К. Ekert, “Event-ready detectors”: Bell experiment via entanglement swapping, *Physical Review Letters* 71, 4287 (1993). Эксперимент: J.-W. Pan, D. Bouwmeester, H. Weinfurter, and A. Zeilinger, Experimental Entanglement Swapping: Entangling Photons That Never Interacted, *Physical Review Letters* 80, 3891 (1998).



Рис. 2.10. Обмен запутанностью

2.6.2. Квантовый повторитель

И квантовая телепортация, и обмен запутанностью находят себе применение в квантовой связи. В главе 1 мы узнали, что первостепенной проблемой, затрудняющей широкое практическое использование квантовой криптографии, являются потери в линиях передач. Экспоненциальный характер закона Бугера — Ламберта — Бера, который управляет этими потерями, ведет к тому, что за несколько сотен километров величина коэффициента пропускания снижается на много порядков, что делает квантовую связь со сколько-нибудь разумной скоростью невозможной.

Разумеется, аналогичные потери наблюдаются и в обычных оптоволоконных линиях связи. Однако в классическом случае проблема может быть решена с помощью *повторителя* — устройства, которое получает сигнал, усиливает его и передает дальше. В квантовых же линиях такие повторители использовать невозможно, поскольку их действие предполагает измерение состояния. С точки зрения связывающихся сторон классический повторитель неотличим от подслушивания. В данном разделе мы поговорим о концепции *квантового повторителя* (quantum repeater). Хотя его принципы кардинально отличаются от принципов его классического аналога, задача та же — повысить скорость передачи информации по линии с потерями.

Первая технология, лежащая в основе квантового повторителя, — телепортация. Если Алиса и Боб имеют общий запутанный ресурс, то Алисе нет нужды посылать фотон Бобу по прямому каналу, она

может его телепортировать. А поскольку измерение Белла можно выполнить и в локации Алисы, фотону источника достаточно будет пройти очень малое расстояние — и, соответственно, с пренебрежимо малыми потерями.

Проблема потерь, однако, остается, только возникает в другом месте — а именно когда мы пытаемся создать тот самый запутанный общий ресурс, необходимый для телепортации, и распределить его между Алисой и Бобом. Квантовый повторитель «заботится» об этом и позволяет осуществить быстрое и эффективное распределение запутанности на большие расстояния.

Схематически этот процесс показан на рис. 2.11. Повторитель состоит из множества звеньев, каждое из которых покрывает расстояние в несколько десятков километров. Во всех звеньях присутствуют два источника запутанности, приспособление для измерения пар фотонов в базисе Белла и две квантово-оптические ячейки памяти. Последние представляют собой устройства, способные относительно долго хранить квантовое состояние света, а затем отдавать его по требованию.

Каждый источник запутанного состояния генерирует пару фотонов (рис. 2.11 а). Один из этих фотонов направляется к анализатору белловского состояния, тогда как состояние поляризации другого закладывается на хранение в память. Когда два фотона прибывают к анализатору Белла, над ними производится измерение, что делает состояния в памяти запутанными благодаря явлению обмена запутанностью.

Источники располагаются неподалеку от ячеек памяти, чтобы минимизировать возможные потери для тех фотонов, которые кладут на хранение. Фотоны же, подвергающиеся измерению Белла, имеют значительный шанс потеряться, хотя и намного меньший, чем если бы им пришлось полностью преодолеть все расстояние между Алисой и Бобом. Поэтому потребуется, скорее всего, некоторое количество попыток, прежде чем обмен запутанностью пройдет успешно. Длина звеньев цепочки выбирается такой, чтобы ожидаемое значение для числа необходимых попыток получалось не слишком большим.

Значение квантовой памяти — второй основополагающей технологии квантового повторителя — заключается в том, чтобы запутанность в пределах звена, будучи однажды создана, могла сохраняться достаточно длительное время, до тех пор, пока такая же запутанность не будет создана во *всех остальных звеньях*.

Когда все подготовительные процедуры выполнены, производится действие, показанное на рис. 2.11 *b*. Фотоны высвобождаются из соседних пар ячеек памяти и подвергаются измерению Белла. Таким способом обмен запутанностью проходит по цепочке, по всей длине линии связи, в результате чего Алиса и Боб становятся обладателями пары запутанных ячеек памяти.

Преимущество связи с использованием квантового повторителя перед прямой передачей можно интуитивно осмыслить примерно следующим образом. Чтобы прямая передача была успешна, фотон не должен потеряться где-то в линии, а вероятность этого экспоненциально низка. В протоколе же квантового повторителя потеря в одном из звеньев не приводит к разрушению запутанности, построенной в других звеньях, поэтому вероятность успеха падает с расстоянием намного медленнее.

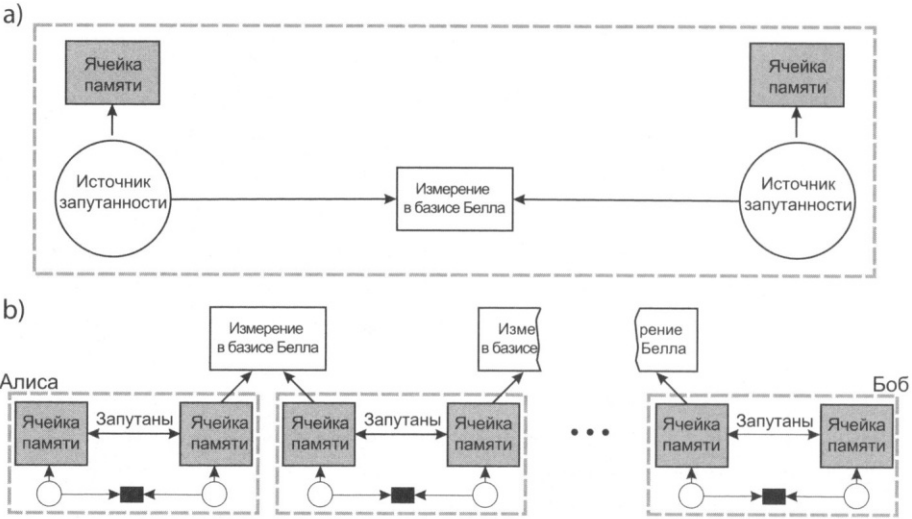


Рис. 2.11. Квантовый повторитель: *a* — в каждом отдельно взятом звене создается запутанность между двумя ячейками памяти; *b* — после того как все индивидуальные звенья подготовлены, обмен запутанностью помогает распространить запутанность по цепочке через все звенья

Упражнение 2.70. Квантовый повторитель состоит из двух звеньев. Каждый источник запутанности генерирует состояние $|\Psi\rangle$. Измерения Белла в первом и втором звеньях обнаруживают состояния $|\Phi^+\rangle$ и $|\Phi^-\rangle$ соответственно. После этого измерение Белла на двух соседних ячейках памяти этих двух звеньев обнаруживает $|\Psi^+\rangle$. Каково результирующее совместное состояние двух ячеек памяти, ближайших к Алисе и Бобу?

Упражнение 2.71. Линия квантовой связи между Алисой и Бобом длиной $L = 500$ км состоит из $k = 10$ звеньев квантового повторителя. Коэффициент потерь в линии $\beta = 0,05 \text{ км}^{-1}$. Расстояние между каждым источником запутанности и анализатором Белла в пределах каждого звена одинаково и равно $L/2k = 25$ км. Все источники запутанности генерируют пары фотонов одновременно, с частотой $f = 10^6$ пар в секунду.

- Для единичного звена найдите вероятность получения запутанности в ячейках памяти после единичной попытки и после n попыток.
- Найдите вероятность получения запутанности во всех k звеньях после n одновременных попыток в каждом звене.
- Найдите время t , необходимое для получения запутанности во всех звеньях (и, соответственно, запутанности между ячейками Алисы и Боба) с вероятностью по крайней мере $1/2$.
- Алиса решила обойтись без квантового повторителя и посылает фотоны непосредственно Бобу по оптоволоконной линии длиной L км, используя источник фотонов с частотой эмиссии $f = 10^6$ фотонов в секунду. Найдите время t' , при котором вероятность того, что хотя бы один из отправленных Алисой фотонов достигнет Боба, окажется равна $1/2$.

Работу квантово-оптических ячеек памяти и измерения в базисе Белла считайте идеальными.

Мы видим, что квантовый повторитель дает преимущество на несколько порядков по сравнению с прямой передачей. Однако практическая реализация этого устройства представляет серьезную трудность, связанную в первую очередь с построением высокопроизводительных квантово-оптических ячеек памяти. Эта память должна удерживать квантовое состояние долгое время и отдавать его по запросу точно и без потерь. На момент написания этой книги квантово-оптическая память с рабочими характеристиками, пригодными для использования в квантовых повторителях, еще не получена, но эта область исследований стремительно развивается, и специалисты то и дело объявляют о новых прорывных открытиях¹.

¹ A.I. Lvovsky, B.C. Sanders, and W. Tittel, Optical Quantum Memory, *Nature Photonics* **3**, 706–714 (2009); N. Sangouard, C. Simon, H. De Riedmatten, and N. Gisin, Quantum repeaters based on atomic ensembles and linear optics, *Reviews of Modern Physics* **83**, 3380 (2011).

2.7. Задачи

Задача 2.1. Преобразуйте квантовый протокол сверхплотного кодирования для случая, когда первоначально Алиса и Боб располагают состоянием $|\Psi^+\rangle$, $|\Phi^+\rangle$ или $|\Phi^-\rangle$.

Задача 2.2. Для наблюдаемого $\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_\theta$, где

$$\hat{\sigma}_\theta = |\theta\rangle\langle\theta| - \left| \frac{\pi}{2} + \theta \right\rangle\left\langle \frac{\pi}{2} + \theta \right|,$$

выполните следующие расчеты.

- Найдите матрицу в каноническом базисе $\{|HH\rangle, |HV\rangle, |VH\rangle, |VV\rangle\}$.
- Найдите матрицу в базисе Белла.
- Определите собственные состояния и собственные значения.
Подсказка: не нужно решать никаких уравнений.
- Вычислите ожидаемую величину и неопределенность в белловском состоянии $|\Psi^-\rangle$.

Задача 2.3. Два кубита взаимодействуют в соответствии с гамильтонианом

$$\hat{H} = \hbar\omega \hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_x.$$

Начальное состояние кубитов $|\Psi(0)\rangle = |HH\rangle$. Найдите $|\Psi(t)\rangle$ в каноническом базисе.

Задача 2.4. Тензорное произведение гильбертова пространства фотонов Алисы и Боба эволюционирует в соответствии с гамильтонианом

$$\hat{H} = \hbar\omega (\hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z).$$

- Найдите матрицу 4×4 гамильтониана в каноническом базисе.
- Найдите матрицу оператора эволюции $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$.
- Чему равно конечное состояние системы после периода времени $\omega t = \pi/4$, если начальное состояние есть произвольное разделимое состояние $(a|H\rangle + b|V\rangle) \otimes (c|H\rangle + d|V\rangle)$?

Задача 2.5. Состояние Гринбергера — Хорна — Цайлингера

$$|\Psi_{\text{GHZ}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HHH\rangle + |VVV\rangle)$$

распределено между Алисой, Бобом и Чарли. Перепишите $|\Psi_{\text{GHZ}}\rangle$:

- в базисе, который является каноническим в гильбертовом пространстве Алисы, диагональным в гильбертовом пространстве Боба и круговым в гильбертовом пространстве Чарли;
- в базисе, который является белловским у Алисы с Бобом и каноническим у Чарли.

Задача 2.6. Алиса и Боб имеют два общих фотона в состоянии поляризации

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{11}}(|HH\rangle + i|VH\rangle + 3|VV\rangle).$$

- а) Алиса и Боб производят измерения каждый на своем фотоне. Найдите вероятности всех возможных результатов.
- б) Только Алиса производит измерение поляризации на своем фотоне. Найдите вероятность каждого результата и удаленно приготовленное состояние фотона Боба после этого измерения. Примените каждую из двух альтернативных методик для решения данной задачи в каждом базисе:
 - используйте частичное скалярное произведение;
 - разложите начальное состояние в соответствии с (2.15).
- в) Предположим, что Боб не знает результата Алисы. На основании части б) опишите состояние фотона Боба, которое образовалось после измерения Алисы, как ансамбль.
- г) Убедитесь, что вероятности, найденные в частях а) и б), согласуются между собой.

Решите эту задачу для всех измерений, проведенных в (1) каноническом и (2) круговом базисах.

Задача 2.7. Алиса и Боб производят измерения над множеством копий некоторого двусоставного состояния $|\Psi\rangle$ и обнаруживают следующее:

- если Алиса измеряет в диагональном базисе, то:
 - всякий раз, когда Алиса получает $|+\rangle$, Боб получает $|H\rangle$;
 - всякий раз, когда Алиса получает $|-\rangle$, Боб получает $|V\rangle$;

- если Алиса измеряет в каноническом базисе, то:
 - всякий раз, когда Алиса получает $|H\rangle$, Боб получает $|L\rangle$;
 - всякий раз, когда Алиса получает $|V\rangle$, Боб получает $|R\rangle$.

Чему равно $|\Psi\rangle$?

Задача 2.8. Состояние Гринбергера — Хорна — Цайлингера распределено между Алисой, Бобом и Чарли. Алиса и Боб производят совместное измерение на своих фотонах. Чему для них равна вероятность обнаружить:

- a) $|\Psi^-\rangle$,
- b) $|HR\rangle$,
- c) $|\Theta\rangle = (3|HH\rangle + 4|VV\rangle)/5$

и на какое состояние спроецируется частица Чарли? Для каждого из вышеперечисленных состояний примите любой базис измерения, содержащий искомое состояние.

Задача 2.9. Алиса, Боб и Чарли располагают запутанным состоянием трех фотонов:

$$|\Psi\rangle = (3|+-+\rangle + 4|-+-\rangle)/5. \quad (2.49)$$

Алиса и Боб измеряют свои фотоны в каноническом базисе. Алиса обнаруживает горизонтальную поляризацию, а Боб — вертикальную.

- a) Какова вероятность этого события?
- b) На какое состояние спроецируется фотон Чарли?

Задача 2.10. Видоизмените наблюдаемые $\hat{M}_A$, $\hat{M}_B$, $\hat{N}_A$, $\hat{N}_B$ таким образом, чтобы нарушить неравенство Белла для состояния, полученного при начальном состоянии $|\Psi^+\rangle$, $|\Phi^+\rangle$ или $|\Phi^-\rangle$.

Задача 2.11. Воспроизведите рассуждения Гринбергера — Хорна — Цайлингера для $|\Psi'_{\text{GHZ}}\rangle = \frac{1}{2}(|HHH\rangle + |HVV\rangle + |V VH\rangle + |VHV\rangle)$ и операторов

$$\begin{aligned} & \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y \\ & \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_y \\ & \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_z \\ & \frac{\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z}{\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z} \end{aligned}$$

Задача 2.12. Измерение фон Неймана состояния поляризации фотона $|\psi\rangle = \alpha|H\rangle + \beta|V\rangle$ производится в диагональном базисе.

- а) Напишите совместное состояние системы и прибора после измерения.
- б) Дайте ансамблевое описание состояния фотона после измерения.

Задача 2.13. Фотон первоначально находится в состоянии $|\psi\rangle = (3|H\rangle + 4|V\rangle)/5$. Опишите в виде ансамбля состояние этого фотона после его декогеренции в каждом из следующих предпочтительных для декогеренции базисов:

- а) каноническом;
- б) круговом.

Задача 2.14. Атом имеет два энергетических собственных состояния $|v_1\rangle, |v_2\rangle$ с собственными значениями 0 и $3\hbar\omega$ соответственно, где $\omega > 0$. Первоначально атом находится в состоянии $|v_1\rangle$. В момент $t = 0$ включается поле, которое делает гамильтониан равным $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где $\hat{V} = 2i\hbar\omega|v_1\rangle\langle v_2| - 2i\hbar\omega|v_2\rangle\langle v_1|$. Атом испытывает декогеренцию, для которой собственный базис нового гамильтониана является предпочтительным. Напишите ансамбль, определяющий состояние атома после декогеренции.

Задача 2.15. Проверка неравенства Белла, описанная в разд. 2.3, производится с дефектным запутанным состоянием, которое представляет собой статистическую смесь состояния $|\Psi^-\rangle$ с вероятностью η и $|\Psi^+\rangle$ с вероятностью $1 - \eta$. Каков диапазон величин η , для которых неравенство Белла нарушается?

Задача 2.16. Покажите, что телепортация будет работать не только с $|\Psi^-\rangle$, но и с другими белловскими состояниями в качестве запутанного ресурса. Для каждого белловского состояния определите локальные операции, которые Бобу необходимо будет произвести на V_3 после получения классического послания от Алисы.

Задача 2.17. Протокол квантовой телепортации реализуется с состоянием $|\Psi\rangle = (|HV\rangle - 2|VH\rangle)/\sqrt{5}$ в качестве запутанного ресурса вместо $|\Psi^-\rangle$. Исходное состояние Алисы — $|\chi\rangle = \alpha|H\rangle + \beta|V\rangle$. Определите:

- а) состояние, в котором фотон Боба будет приготовлен в случае каждого из четырех возможных результатов измерения Алисы и Боба;
- б) вероятность каждого результата.

Задача 2.18*. В квантовом повторителе, описанном в упр. 2.71, присутствует один из следующих дефектов:

- а) прибор измерения в базисе Белла способен распознавать только состояния $|\Psi^+\rangle$, но не $|\Phi^+\rangle$;
- б) для каждого фотона, сохраненного в квантовой памяти, эффективность извлечения равна $\eta_M = 0,75$.

Для каждого случая найдите новое время t , необходимое для получения запутанности между ячейками памяти Алисы и Боба с вероятностью по крайней мере $1/2$.

ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

*Оно не то чтоб Цыбин был с двойным натура дном:
Когда в натуре бездна, речи нет об дне двойном.*

Теперь мы готовы ввести в квантовую механику собственно «механику». В этой главе мы изучим основы квантовой физики простейшей движущейся системы: точечной частицы с одной-единственной степенью свободы. Хотя на первый взгляд такая система может показаться чем-то вроде «сферического коня в вакууме», эта модель оказывается вполне релевантной для многих практических физических ситуаций, удивительно хорошо описывая их свойства. Более того, квантовая теория одномерного движения снабдит нас теоретическими инструментами для изучения в следующей главе более сложного трехмерного движения. Эту теорию можно непосредственно применить к движению электронов в атомах при расчете, скажем, атомных спектров излучения и поглощения. Затем эти спектры можно сравнить с результатами экспериментов, обеспечив таким образом базу для подтверждения или опровержения квантовой теории. Замечательное совпадение этих результатов стало основным фактором триумфа квантовой теории в начале XX в.

3.1. Непрерывные наблюдаемые

В классической механике одномерное движение описывается двумя каноническими переменными: координатой и импульсом. Соответственно, в квантовом варианте мы тоже вводим два наблюдаемых оператора: координату $\hat{x}$ и импульс $\hat{p}$ ¹.

¹ Если вы не знакомы с дельта-функцией Дирака и преобразованием Фурье, то, прежде чем продолжить, просмотрите, пожалуйста, разделы Г.1 и Г.2 в соответствующем приложении.

Хотя *геометрическое* пространство, содержащее интересующую нас частицу, одномерно, связанное с ним *гильбертово* пространство обладает бесконечной размерностью: существует бесконечное множество координатных собственных состояний $|x\rangle$, и все эти собственные состояния ортогональны¹. Более того, координатные собственные состояния образуют *континуум*: для каждого действительного значения x существует связанное с ним собственное состояние $|x\rangle$. То же можно сказать и об импульсном наблюдаемом.

Мы знаем (см. упр. 1.30), что множество собственных состояний любого физического наблюдаемого образует ортонормальный базис. Координата и импульс — не исключение. Однако непрерывность этих наблюдаемых подразумевает, что бо́льшая часть математических правил (разложение состояния и оператора, нормирование, преобразование базиса и т. п.), выведенных для гильбертовых пространств конечной размерности, нуждается в модификации: суммирование придется заменить интегрированием. Это и есть наша задача в данном разделе. Чтобы воспроизвести упомянутые правила в виде, близком к тому, что мы наблюдаем для дискретного случая, нам нужно определить специальное соглашение о нормировании для собственных состояний непрерывных наблюдаемых. Вместо нормирования этих состояний к единице, как мы сделали бы в дискретном случае, мы пишем:

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x'); \quad (3.1a)$$

$$\langle p | p' \rangle = \delta(p - p'). \quad (3.1b)$$

Поначалу это может показаться странным. Согласно (3.1a), скалярное произведение координатного собственного состояния $|x\rangle$ на самого себя есть $\langle x | x \rangle = \delta(0)$, так что такое состояние имеет бесконечную норму. Как это согласуется с аксиомой гильбертова пространства квантовой механики, которая гласит, что все физические состояния должны иметь норму 1? Вот что мы на это ответим: *собственные состояния непрерывных наблюдаемых нефизичны* — невозможно поместить частицу в абсолютно точную позицию или заставить ее двигаться с абсолютно точной скоростью. Поэтому правило нормирования для физических состояний не применимо к $|x\rangle$ или $|p\rangle$; эти

¹ Почему континуум координатных собственных состояний порождает гильбертово пространство бесконечной размерности, тогда как континуум линейно поляризованных состояний — всего лишь двумерное гильбертово пространство? Если не помните ответа, загляните в разд. 1.3.

состояния представляют собой всего лишь математическую абстракцию¹. Все физически реалистичные состояния, имеющие некоторую неопределенность в значении как координаты, так и импульса, действительно имеют единичную норму согласно постулату.

Любое квантовое состояние $|\psi\rangle$ может быть разложено по базису, связанному с непрерывным наблюдаемым:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) |x\rangle dx. \quad (3.2)$$

Это уравнение заменяет уравнение (A.1) для разложения состояния по дискретному базису: сумму здесь сменяет интеграл. Функция $\psi(x)$ называется *волновой функцией* состояния $|\psi\rangle$ в x -базисе (или x -представлении) и является аналогом, в случае непрерывного наблюдаемого, столбцового представления вектора в гильбертовом пространстве конечной размерности. Взяв сопряженные величины от обеих сторон (3.2), а именно

$$\langle\psi| = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \langle x| dx, \quad (3.3)$$

мы обнаруживаем также, что волновая функция вектора $\langle\psi|$ равна $\psi^*(x)$.

Упражнение 3.1. Покажите, что можно построить следующие непрерывные аналоги основных дискретных соотношений:

а) вместо (A.6):

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle; \quad (3.4)$$

б) вместо (A.26):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx = \hat{1}; \quad (3.5)$$

с) вместо (A.4):

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx. \quad (3.6)$$

¹ Для более строгого рассмотрения этого вопроса вводится специальная конструкция, разработанная И.М. Гельфандом и Н. Я. Виленкиным и именуемая оснащённым гильбертовым пространством (rigged Hilbert space). Подробности в: R. de la Madrid, The role of the rigged Hilbert space in quantum mechanics, European Journal of Physics **26**, 287 (2005).

Отступление 3.1. Если использовать правило нормирования для конечной размерности

Что если мы захотим избежать использования обобщенных функций и попробуем применить правила нормирования для конечных размерностей к гильбертову пространству непрерывной переменной? К сожалению, при этом не получится разработать непротиворечивый набор отношений между состояниями, волновыми функциями и наблюдаемыми. Например, пусть

$$\langle x|x' \rangle = \begin{cases} 1, & \text{если } x = x' \\ 0, & \text{если } x \neq x'. \end{cases} \quad (3.7)$$

Тогда, подставив (3.2) в (3.4), получим:

$$\psi(x) = \langle x|\psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x') \langle x|x' \rangle dx'.$$

Последнее выражение в строке выше содержит интеграл функции, которая имеет ненулевое конечное значение всего в одной точке $x' = x$ и потому обращается в нуль. Таким образом, в предположении (3.7) волновые функции всех физических состояний будут равны нулю.

Упражнение 3.2. Покажите, что для физических состояний

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (3.8)$$

Упражнение 3.3. Вычислите нормирующий множитель A для состояний со следующими волновыми функциями:

а) прямоугольная функция

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x < a \text{ или } x > b; \\ A, & \text{если } a \leq x \leq b \end{cases}; \quad (3.9)$$

б) гауссова функция

$$\psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2d^2}}. \quad (3.10)$$

Упражнение 3.4. Найдите волновую функцию состояния с определенной координатой $|x_0\rangle$ в координатном базисе.

Как и в дискретном случае, операторы, связанные с непрерывными наблюдаемыми, задаются как

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x |x\rangle \langle x| dx. \quad (3.11)$$

Функции операторов, естественно, определяются как

$$f(\hat{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) |x\rangle \langle x| dx. \quad (3.12)$$

Для произвольного оператора $\hat{A}$ двумерная функция

$$A(x, x') = \langle x | \hat{A} | x' \rangle \quad (3.13)$$

называется *матричным элементом* этого оператора.

Как мы увидим далее, по аналогии со случаем дискретной переменной, матричный элемент $\langle x | \hat{A} | x' \rangle$, будучи функцией x и x' , содержит полную информацию об операторе. В более общем случае мы можем производить операции с состояниями и операторами, представленными одно- и двумерными функциями соответственно, так же как мы оперируем с матрицами в дискретном случае, но заменяя суммирование интегрированием.

Упражнение 3.5. Покажите, что $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$.

Упражнение 3.6. Докажите, что:

а) любой оператор $\hat{A}$ можно записать в виде

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} A(x, x') |x\rangle \langle x'| dx dx', \quad (3.14)$$

где $A(x, x')$ задается уравнением (3.13);

б) для любой операторной функции $\hat{x}$

$$\langle \psi | f(\hat{x}) | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 f(x) dx; \quad (3.15)$$

с) для любого оператора $\hat{A}$ и любых двух состояний $|\psi\rangle, |\phi\rangle$

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) A(x, x') \psi(x') dx dx'; \quad (3.16)$$

д) волновая функция состояния $\hat{A} | \psi \rangle$ равна

$$\langle x | \hat{A} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} A(x, x') \psi(x') dx'; \quad (3.17)$$

е) волновая функция состояния $\langle \psi | \hat{A}$ равна

$$\langle \psi | \hat{A} | x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') A(x', x) dx'; \quad (3.18)$$

- ф) матричные элементы оператора $\hat{A}$ и сопряженного с ним оператора $\hat{A}^\dagger$ связаны соотношением

$$(A^\dagger)(x, x') = A^*(x', x); \quad (3.19)$$

- г) произведение операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ может быть записано через их «матрицы» как

$$\langle x | \hat{A}\hat{B} | x' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} A(x, x'') B(x'', x') dx''. \quad (3.20)$$

А теперь давайте переформулируем постулат квантовой механики об измерениях для случая непрерывного наблюдаемого. Предположим, что наблюдаемое $\hat{x}$ измерено в квантовом состоянии $|\psi\rangle$ с волновой функцией $\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$. Каково распределение вероятностей для возможных результатов этого измерения? В разд. Б.4 мы ввели понятие плотности вероятности $\text{pr}(x)$ непрерывной переменной, такой что вероятность обнаружения x в определенном интервале $[x', x'']$ равна

$$\text{pr}_{[x', x'']} = \int_{x'}^{x''} \text{pr}(x) dx. \quad (3.21)$$

Выразим $\text{pr}(x)$ через $\psi(x)$.

Согласно постулату об измерениях для дискретного случая, вероятность проецирования на какой-то конкретный элемент $|v_i\rangle$ базиса измерений равна $|\langle v_i | \psi \rangle|^2$. Для непрерывного случая это правило не годится, поскольку вероятность обнаружить частицу в точности в точке x бесконечно мала. Разумно, однако, сказать, что допустимая мера вероятности, связанная с координатой x , — плотность ее вероятности — должна быть пропорциональна $|\langle x | \psi \rangle|^2 = |\psi(x)|^2$. Таким образом, мы имеем $\text{pr}(x) \propto |\psi(x)|^2$.

Чтобы найти коэффициент пропорциональности, вспомним для начала, что $\int_{-\infty}^{+\infty} \text{pr}(x) dx = 1$, согласно свойствам плотности вероятностей [ср. с (Б.12)]. Помимо этого для нормированного состояния мы имеем также $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \langle \psi | \psi \rangle = 1$, как в (3.6). Сравнивая эти два условия, обнаруживаем:

$$\text{pr}(x) = |\psi(x)|^2. \quad (3.22)$$

На какое состояние спроецируется $|\psi\rangle$ после измерения? Как уже обсуждалось, очевидный ответ $|x\rangle$ нефизичен. Тем не менее он полезен в качестве приближения для многих теоретических рассуждений — только нужно не забывать о нормировании. Более реалистичный с физической точки зрения ответ будет зависеть от конкретных особенностей измерительной аппаратуры; в общем случае будет получена некоторая суперпозиция или статистическая смесь множества координатных собственных состояний в пределах определенной близкой окрестности x .

Упражнение 3.7. Используя выражения (Б.13) и (Б.14) для среднего значения и дисперсии непрерывной случайной переменной, покажите, что для непрерывного квантового наблюдаемого $\hat{x}$, измеренного в состоянии $|\psi\rangle$:

а) математическое ожидание задается формулой

$$\langle x \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle; \quad (3.23)$$

б) ^s дисперсия задается формулой

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \langle \psi | (\hat{x} - \langle x \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{x}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle^2. \quad (3.24)$$

Полученные в этом разделе данные суммированы в табл. 3.1.

Таблица 3.1. Сравнение правил работы с дискретно- и непрерывно-переменными базисами

	Дискретный базис $\{ v_i\rangle\}$	Непрерывный базис $\{ x\rangle\}$
Ортонормальность	$\langle v_i v_j \rangle = \delta_{ij}$	$\langle x x' \rangle = \delta(x - x')$
Разложение состояния	$ \psi\rangle = \sum_i \psi_i v_i\rangle$ $\psi_i = \langle v_i \psi \rangle$	$ \psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) x\rangle$ $\psi(x) = \langle x \psi \rangle$
Постулат об измерениях	$pr_i = \langle v_i \psi \rangle ^2$ (вероятность)	$pr(x) = \langle x \psi \rangle ^2$ (плотность вероятности)
Разложение оператора	$A_{ij} = \langle v_i \hat{A} v_j \rangle$ $\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} v_i\rangle \langle v_j $	$A(x, x') = \langle x \hat{A} x' \rangle$ $\hat{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} A(x, x') x\rangle \langle x' dx dx'$
Разложение $\hat{1}$	$\hat{1} = \sum_i v_i\rangle \langle v_i $	$\hat{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rangle \langle x dx$
Произведение операторов	$(AB)_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}$	$(AB)(x, x') = \int_{-\infty}^{+\infty} A(x, x'') B(x'', x') dx''$

3.2. Волна де Бройля

В предыдущем разделе мы разобрали математический аппарат для работы с гильбертовыми пространствами, натянутыми на собственные состояния некоторого непрерывного наблюдаемого, например координаты или импульса. Но координата и импульс представляют собой операторы в одном и том же физическом гильбертовом пространстве, связанном с движением частицы. Свяжем эти два наблюдаемых друг с другом, постулируя отношение между их собственными состояниями:

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i \frac{px}{\hbar}}. \quad (3.25)$$

Формула (3.25) утверждает, что волновая функция состояния с определенным значением импульса представляет собой бесконечную волну, известную как *волна де Бройля*. Эта волна — проявление корпускулярно-волнового дуализма, т.е. способности всей квантовой материи демонстрировать свойства как частицы, так и волны (ср.: разд. 1.5).

Волна де Бройля не может быть выведена из квантово-механических постулатов, которые мы изучали до сих пор. Она, скорее, является обобщением множества экспериментальных наблюдений и теоретических озарений. История того, как ученые пришли к волне де Бройля, кратко описана в отступлении 3.2.

Может показаться странным, что в уравнении (3.25) отсутствует зависимость от времени, хотя само понятие волны подразумевает, что такая зависимость должна там быть. И действительно, применяя в разд. 3.4 уравнение Шрёдингера, мы получим движущуюся волну. Однако пока же давайте абстрагируемся от этого движения и рассмотрим связь между базисами, образованными собственными состояниями координаты и импульса, которые определяются как независимые от времени.

Упражнение 3.8. Покажите, что длина волны де Бройля, заданной уравнением (3.25), связана со значением импульса выражением

$$\lambda_{\text{дБ}} = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad (3.26)$$

т.е. точно так же, как связаны импульс фотона и оптическая длина волны (отступление 1.1).

Упражнение 3.9. Оцените длину волны де Бройля для:

- автомобиля;
- молекул воздуха при комнатной температуре;
- электронов с кинетической энергией 100 кэВ в электронном микроскопе;
- атомов рубидия в конденсате Бозе — Эйнштейна при температуре 100 нК.

Упражнение 3.10. Покажите, что, согласно (3.25), собственные состояния координаты и импульса могут быть выражены одно через другое следующим образом:

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{px}{\hbar}} |x\rangle dx; \quad (3.27a)$$

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{px}{\hbar}} |p\rangle dp. \quad (3.27b)$$

Волна де Бройля имеет бесконечную протяженность в пространстве. Это согласуется с принципом неопределенности: волновая функция состояния с определенным импульсом имеет бесконечную неопределенность по координате. Однако интерпретация квадрата абсолютной величины волновой функции де Бройля — константы $|\langle x | p \rangle|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$ — как плотности вероятности абсурдна, ибо ее интеграл по всему пространству равен бесконечности.

Здесь опять же играет роль нефизичность собственного состояния импульса, которая означает, что плотность вероятности для него не имеет смысла. Физически реалистичные состояния представляют собой линейные комбинации собственных состояний импульса, так что неопределенность координаты для них может быть ограниченной. Мы вскоре рассмотрим это более детально — когда будем обсуждать гауссовы волновые пакеты.

Рассуждения де Бройля объясняют экспоненту в (3.25), но не нормирующий множитель. Следующее упражнение показывает, откуда он берется.

Упражнение 3.11. Выразив два произвольных собственных состояния импульса $|p\rangle$ и $|p'\rangle$ как волны де Бройля в соответствии с (3.27a) и пользуясь $\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$, вычислите $\langle p | p' \rangle$ и убедитесь, что ваш результат согласуется с условием ортонормальности $\langle p | p' \rangle = \delta(p - p')$.

Отступление 3.2. История открытия де Бройля

В 1913 г. *Нильс Бор*, воспользовавшись концепцией Планка, разработал собственную модель атома, согласно которой орбиталь электрона стабильна, если его момент импульса в целое число раз больше $\hbar$. Однако модель Бора была чисто эмпирической. Хотя она, казалось, объясняла экспериментальные результаты, стоящие за ней физические принципы оставались загадкой.

Луи де Бройль предложил концепцию своей волны в 1924 г. в диссертации на соискание докторской степени. К этому моменту Планк и Эйнштейн уже определили отношения между длиной волны фотона, его частотой, энергией и импульсом, а Комптон подтвердил их экспериментально (отступление 1.1). Де Бройль предположил, что соотношение $E = \hbar\omega$ не ограничивается световыми частицами. Напротив, *любую* частицу с определенной энергией можно связать с волной, частота которой задается формулой Планка. Затем де Бройль при помощи специальной теории относительности Эйнштейна показал, что длина этой волны должна задаваться уравнением (3.26), т. е. тем же выражением, что и для фотона.



Де Бройль использовал свое предположение, чтобы переформулировать модель атома Нильса Бора (отступление 4.2). Он выдвинул гипотезу о том, что орбиталь электрона стабильна, если в длину ее окружности укладывается целое число n длин волны де Бройля:

$$2\pi r = n\lambda_{\text{дБ}}, \quad (3.28)$$

Луи де Бройль где r — радиус орбитали. Таким образом, волна, связанная с движущимся по орбите электроном, испытывает конструктивную интерференцию сама с собой. Эта гипотеза позволила ученому теоретически предсказать спектры атомов, идентичные спектрам Бора (упр. 4.42) и согласующиеся с экспериментальными данными.

Подобное совпадение послужило сильным аргументом в пользу гипотезы де Бройля. Еще более непосредственное свидетельство было получено в Лабораториях Белла в 1927 г. *Клинтон Дэвиссон* и *Лестер Джермер*, наблюдая рассеяние пучка электронов на кристаллической решетке никеля, обнаружили, что полученное экспериментально угловое распределение рассеянных электронов согласуется с законами дифракции, известными из оптики. Единственным возможным объяснением такого поведения является волноподобная природа электронов.

Волновое число волны де Бройля равно

$$k = \frac{2\pi}{\lambda_{\text{дБ}}} = \frac{p}{\hbar}. \quad (3.29)$$

Иногда удобно работать с собственными состояниями импульса $|p\rangle$ в физически эквивалентном им виде собственных состояний волнового числа $|k = p/\hbar\rangle$, поскольку в этом случае нам не нужно беспокоиться о постоянной Планка в показателе экспоненты.

Однако есть одна тонкость. Собственные состояния волнового числа, как и любого другого непрерывного наблюдаемого, нормируются в соответствии с

$$\langle k | k' \rangle = \delta(k - k'). \quad (3.30)$$

Но, как нам известно из (Г.6), $\delta(k - k') = \delta[(p - p')/\hbar] = \hbar \delta(p - p') = \hbar \langle p | p' \rangle$. Мы вынуждены заключить, что

$$|k\rangle = \sqrt{\hbar} |p = \hbar k\rangle. \quad (3.31)$$

Вот еще один абсурдный, на первый взгляд, результат: два вектора, представляющие одно и то же состояние — состояние с определенным импульсом, имеют разную норму. Это опять же следствие нефизичного характера нормирования для собственных состояний непрерывных наблюдаемых.

Упражнение 3.12^s. Покажите, что волновая функция де Бройля для собственного состояния волнового числа принимает вид:

$$\langle x | k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}. \quad (3.32)$$

Покажите, что собственные состояния координаты и волнового числа выражаются друг через друга согласно

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} |x\rangle dx; \quad (3.33)$$

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} |k\rangle dk. \quad (3.34)$$

Проверьте согласованность результата с условием нормирования (3.30).

3.3. Координатный и импульсный базисы

3.3.1. Преобразование между координатным и импульсным базисами

Поговорим о проблеме преобразования представлений различных состояний и операторов между координатным и импульсным бази-

сами. Как и в дискретном случае, главным инструментом такого преобразования является разложение единичного оператора, т. е. мы используем тот факт, что оператор (3.5)

$$\hat{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \langle p| dp \quad (3.35)$$

можно вставить в любое выражение со скалярным произведением.

Упражнение 3.13. Найдите явные формулы для преобразования координатного представления $\psi(x)$ заданного квантового состояния $|\psi\rangle$ в импульсное представление $\tilde{\psi}(p)$ и обратно.

Ответ:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p) e^{i\frac{px}{\hbar}} dp; \quad (3.36a)$$

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx. \quad (3.36b)$$

Упражнение 3.14^s. Покажите, что преобразование волновой функции в координатном представлении в представление в базисе *волновых чисел*, а также обратное преобразование задаются, соответственно, прямым и обратным преобразованием Фурье:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk; \quad (3.37)$$

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx, \quad (3.38)$$

где

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{\tilde{\psi}(k)}{\sqrt{\hbar}} \quad (3.39)$$

для $p = k\hbar$.

В данном курсе для обозначения волновых функций в импульсном представлении или представлении на основе волнового числа мы будем использовать тильду [к примеру, $\tilde{\psi}(p)$ или $\tilde{\psi}(k)$].

Упражнение 3.15. Как мы знаем (разд. А.4), скалярное произведение любых двух состояний $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ не зависит от базиса, в котором оно вычисляется. Убедитесь в этом явно для координатного и импульсного базисов, т. е. покажите, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \varphi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(p) \tilde{\varphi}(p) dp,$$

используя *только* соотношения (3.36) и свойства преобразования Фурье.

Упражнение 3.16. Покажите, что для состояния с действительной волновой функцией $\psi(x)$ выполняется $\text{rg}(p) = \text{rg}(-p)$, а математическое ожидание для наблюдаемого импульса равно нулю.

Упражнение 3.17. Матричный элемент $A(x, x') = \langle x | \hat{A} | x' \rangle$ оператора $\hat{A}$ известен для всех x и x' . Найдите $\tilde{A}(p, p') = \langle p | \hat{A} | p' \rangle$.

Упражнение 3.18. Рассмотрите функцию $V(\hat{x})$ оператора координаты. Напишите элемент матрицы этого оператора:

- а) в координатном базисе;
- б) в импульсном базисе.

Ответ:

$$\text{а) } V(x, x') = V(x) \delta(x - x'); \quad (3.40)$$

$$\text{б) } V(p, p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}x(p'-p)} V(x) dx \quad (3.41)$$

Если вы уже изучали введение в квантовую механику, то вам, возможно, встречалось выражение

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}, \quad (3.42)$$

означающее, что импульс соответствует оператору дифференцирования волновой функции. В контексте более строгой теории, рассматриваемой нами здесь, это утверждение не имеет особого смысла. Операторы действуют на векторы состояния, а волновая функция не является вектором; она представляет собой скалярное произведение двух векторов, т. е. число. Какое действие может оператор оказывать на число? Давайте разберемся.

Упражнение 3.19. Покажите, что элемент матрицы импульса $\langle x | \hat{p} | x' \rangle$ в координатном представлении задается формулой:

$$\langle x | \hat{p} | x' \rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} \delta(x - x') = i\hbar \frac{d}{dx'} \delta(x - x'). \quad (3.43)$$

Упражнение 3.20. Покажите, что для произвольного состояния $|\psi\rangle$

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx}\langle x|\psi\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x). \quad (3.44)$$

Этот результат объясняет смысл уравнения (3.42). Если состояние $|\psi\rangle$ в координатном базисе имеет волновую функцию $\psi(x)$, то состояние $\hat{p}|\psi\rangle$ имеет волновую функцию $-i\hbar d\psi(x)/dx$. Именно в этом смысле данное уравнение используется при вычислениях, несмотря на то что со строго математической точки зрения оно вызывает вопросы.

Упражнение 3.21^s. Получите аналоги приведенных выше результатов для оператора координаты в импульсном представлении.

а) Покажите, что соответствующий матричный элемент равен

$$\langle p|\hat{x}|p'\rangle = i\hbar \frac{d}{dp}\delta(p-p'). \quad (3.45)$$

б) Покажите, что для произвольного состояния $|\psi\rangle$

$$\langle p|\hat{x}|\psi\rangle = i\hbar \frac{d}{dp}\tilde{\psi}(p). \quad (3.46)$$

Упражнение 3.22. Покажите, что $\langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle = -\hbar^2 d^2\psi(x)/dx^2$.

3.3.2. Неопределенность координаты и импульса

Теперь, когда у нас есть некоторый опыт смены координатного базиса на импульсный и обратно, мы готовы ввести для этих наблюдаемых соотношение неопределенностей. Как мы знаем из подразд. 1.9.3, соотношение неопределенностей, соответствующих любым двум наблюдаемым, определяется их коммутатором.

Упражнение 3.23. Покажите, что для любого состояния $|\psi\rangle$:

$$\text{а) } \langle x|\hat{x}\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar x \frac{d}{dx}\psi(x); \quad (3.47)$$

$$\text{б) } \langle x|\hat{p}\hat{x}|\psi\rangle = -i\hbar x \frac{d}{dx}\psi(x) - i\hbar\psi(x); \quad (3.48)$$

$$\text{в) } [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (3.49)$$

Упражнение 3.24. Покажите, что принцип неопределенности Гейзенберга для координатного и импульсного наблюдаемых и для любого состояния $|\psi\rangle$ имеет вид:

$$\langle \psi | \Delta x^2 | \psi \rangle \langle \psi | \Delta p^2 | \psi \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (3.50)$$

Таким образом, мы получили принцип неопределенности в его первоначальном виде: состояние частицы с одновременно точно известными координатой и импульсом невозможно¹.

Упражнение 3.25. Выполните для гауссовой волновой функции

$$\psi(x) = \frac{1}{(\pi d^2)^{1/4}} e^{i \frac{p_0 x}{\hbar}} e^{-\frac{(x-a)^2}{2d^2}} \quad (3.51)$$

следующие вычисления:

- проверьте нормирование;
- найдите соответствующую волновую функцию в импульсном базисе.

Подсказка: используйте стандартные правила преобразования Фурье.

Ответ:

$$\tilde{\psi}(p) = \left(\frac{d^2}{\pi \hbar^2} \right)^{1/4} e^{-\frac{i(p-p_0)a}{\hbar}} e^{-\frac{(p-p_0)^2 d^2}{2\hbar^2}}. \quad (3.52)$$

- Определите математическое ожидание и неопределенность координаты и импульса, а также произведение этих неопределенностей.

Ответ:

$$\langle x \rangle = a; \langle p \rangle = p_0; \langle \Delta x^2 \rangle = d^2/2; \langle \Delta p^2 \rangle = \hbar^2/2d^2. \quad (3.53)$$

Мы видим, что для гауссовых состояний произведение дисперсий координаты и импульса равно $\hbar^2/4$ — минимальному значению, которое допускает принцип неопределенности. Можно соотнести неопределенность координаты — импульса со свойствами преобразования Фурье (разд. Г.2): если волновая функция в координатном базисе «сужается», ее Фурье-образ, т.е. та же волновая функция в импульсном базисе, «расширяется». Общий принцип квантовой неопределенности, конечно же, много шире: он действует для *любой*

¹ На самом деле оригинальная формулировка Гейзенберга была немного иной (см. отступление 3.3).

пары некоммутирующих наблюдаемых, вне зависимости от того, связаны они между собой преобразованием Фурье или нет.

Упражнение 3.26*^s. Покажите, что гауссовы волновые пакеты вида (3.51) — это единственные состояния, для которых неравенство (3.50), выражающее принцип неопределенности, становится равенством¹.

3.3.3. Парадокс Эйнштейна — Подольского — Розена в первоначальном виде

Давайте теперь воспроизведем еще один научный шедевр — парадокс Эйнштейна — Подольского — Розена 1935 г. В подразд. 2.3.1 мы изучили вариант этого парадокса, адаптированный к той квантовой системе, которую мы тогда рассматривали, — к поляризации фотона. Теперь же у нас имеется достаточно инструментария, чтобы разобрать рассуждения ЭПР в их изначальном виде.

Предположим, что каждый из двух наблюдателей — и Алиса, и Боб — удерживает одномерную точечную частицу. Эти две частицы приготовлены в запутанном состоянии $|\Psi_{AB}\rangle$ с волновой функцией

$$\Psi(x_A, x_B) = \delta(x_A - x_B) \quad (3.54)$$

(нормированием пренебрегаем). Иными словами, частицы Алисы и Боба (в своих соответствующих системах отсчета) всегда имеют одну и ту же пространственную координату, но конкретное значение этой координаты совершенно случайно.

Упражнение 3.27. Дайте ответы на следующие вопросы о состоянии (3.54).

- Какова волновая функция двух частиц в импульсном представлении?
- Предположим, Алиса проводит измерение координаты своей частицы и получает результат x_0 . На какое состояние спроецируется частица Боба?
- Предположим, Алиса вместо этого проводит измерение импульса своей частицы и получает результат p_0 . На какое состояние спроецируется частица Боба?

¹ Решение можно найти, к примеру, в: Ulf Leonhardt, *Measuring the quantum state of light* (Cambridge University Press, 1997).

Отступление 3.3. Можно ли одновременно измерить координату и импульс?

В своей оригинальной работе* Вернер Гейзенберг сформулировал принцип неопределенности следующим образом:

*«Чем точнее определяется положение, тем менее точно известен импульс, и наоборот»**.*

Продemonстрируем недостаток этой формулировки путем наглядного контрпримера***. Предположим, что мы приготовили частицу массой M в координатном собственном состоянии $|x = 0\rangle$ в момент времени $t = 0$. Поскольку координата частицы известна точно, ее импульс имеет совершенно неопределенную величину. Мы позволяем этому состоянию свободно эволюционировать некоторое время t_0 , а затем производим измерение наблюдаемой $\hat{x}$, получая при этом некоторую величину x_0 . Теперь координата частицы непосредственно перед измерением нам точно известна. Но и импульс точно известен! Действительно, поскольку известно, что в момент $t = 0$ координата была в точности $x = 0$, а в момент $t = t_0$ она в точности равна $x = x_0$, мы заключаем, что скорость перед измерением была равна в точности $v = x_0/t_0$, из чего следует, что импульс должен был быть равен $p_0 = mx_0/t_0$.

Естественно, этот пример не противоречит принципу неопределенности в том виде, в каком он определен уравнением (3.50). Это уравнение утверждает, что измерения $\hat{x}$ и $\hat{p}$ проявляют некоторую степень случайности, но не утверждается, что они не могут коррелировать друг с другом. Именно так обстоит дело с нашей частицей: поскольку в начальном состоянии она имеет совершенно неопределенный импульс, величины x_0 и p_0 , которые могло бы дать измерение в момент t_0 , полностью непредсказуемы. Однако они взаимосвязаны — пропорциональны друг другу.

Наш пример показывает, что можно узнать координату и импульс частицы *post factum*, т. е. после измерения. Однако невозможно приготовить частицу так, чтобы ее координата и импульс были известны *a priori*, т. е. до измерения.

Я хотел бы также пояснить, что здесь нет никакого противоречия с нашей дискуссией в подразд. 1.9.3, где говорилось, что некоммутирующие наблюдаемые не могут быть измерены одновременно. Там речь шла о возможности построения прибора, который выдавал бы точную информацию о координате и импульсе для каждого состояния. А в данном примере одновременная информация об этих наблюдаемых получается для одного конкретного состояния, специально построенного нами для создания парадоксальной ситуации.

* W. Heisenberg, *Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik*, Zeitschrift für Physik **43**, 172 (1927).

** Гейзенберг В. О наглядном содержании квантовотеоретической кинематики и механики // Успехи физических наук. Т. 122. Вып. 8 (1977). С. 654. — *Прим. ред.*

*** Пример предоставлен А.В. Белинским и В.Б. Лапшиным.

Ответ:

- а) $\Psi(p_A, p_B) = \delta(p_A + p_B)$;
- б) $|x_0\rangle$;
- с) $|-p_0\rangle$.

Мы видим, что, если Алиса решает измерить координату своей частицы, она тем самым удаленно приготавливает частицу Боба

в состоянии с точно определенной координатой и неопределенным импульсом. В то же время если Алиса измеряет импульс, то Боб получает состояние с определенным импульсом и неопределенной координатой. Таким способом Алиса может удаленно, без всякого взаимодействия с Бобом, выбрать и приготовить в его локации одну из двух взаимоисключающих реальностей.

Можно возразить, что такое рассуждение требует использования сингулярных волновых функций, которые, как уже подчеркивалось, нефизичны. Это серьезное возражение. Однако парадокс ЭПР можно без труда переформулировать для физически возможного гауссова состояния, в котором корреляция координат и антикорреляция импульсов *почти*, но не совершенно, точны. При этом состояние становится физически допустимым, а нарушение локального реализма никуда не девается. Мы убедимся в этом в подразд. 3.10.3.

Здесь важно подчеркнуть, что в исходном виде парадокс ЭПР не демонстрирует нелокальность природы в той же степени, что и эксперимент Белла. Неравенство Белла выполняется для любого локально реалистичного эксперимента, передняя панель которого соответствует рис. 2.2, так что необязательно верить в квантовую механику, чтобы убедиться в нелокальности, наблюдая нарушение неравенства Белла в эксперименте. А вот *Gedankenexperiment* ЭПР в первоначальном варианте человеку, который не верит в квантовую механику и, в частности, в принцип неопределенности, парадоксальным не покажется. Действительно, если частицам позволено одновременно иметь определенные координату и импульс, то наблюдаемые корреляции можно легко объяснить так: частицы Алисы и Боба каждый раз готовят с одними и теми же (но случайными) координатами и противоположными (но случайными) значениями импульса. На языке Белла это означает, что оригинальный эксперимент ЭПР, в отличие от эксперимента Белла, может быть объяснен в рамках модели с локальной скрытой переменной.

3.4. Потенциал свободного пространства

До сих пор мы обсуждали статические, не зависящие от времени свойства волны де Бройля. Теперь давайте посмотрим, как эта волна эволюционирует во времени. В разд. 1.10 постулировалось, что квантовая эволюция определяется гамильтонианом, который представляет

Отступление 3.4. Просто добавьте крышечки?

Уравнение (3.55) мы получили, приписав крышечки над переменными в соответствующем классическом выражении. Эта операция не слишком сильно влияет на внешний вид выражения, а вот его физическую суть меняет кардинально: переменные превращаются в операторы. По какому праву мы производим такие изменения?

В качестве примера рассмотрим взаимоотношения между импульсом и кинетической энергией. Наблюдаемое импульса равно

$$\hat{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} p |p\rangle \langle p| dp,$$

и это означает, согласно определению, данному в подразд. 1.9.1, что множество всех кет-векторов $|p\rangle$ образует ортонормальный базис гильбертова пространства, а каждый из этих кет-векторов обозначает состояние частицы с определенным значением импульса p .

Далее, каждое такое состояние характеризуется также определенной кинетической энергией $K = p^2/2M$. Следовательно, наблюдаемое кинетической энергии должно записываться, согласно тому же определению, как:

$$\hat{K} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2}{2M} |p\rangle \langle p| dp.$$

Но, согласно определению A.25 для операторных функций, это выражение может быть записано просто как:

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2M}.$$

собой сумму кинетической и потенциальной энергий. Эти энергии являются функциями координаты и импульса частицы:

$$\hat{H} = V(\hat{x}) + \frac{\hat{p}^2}{2M}. \quad (3.55)$$

Этот гамильтониан идентичен классическому, за исключением того, что канонические наблюдаемые здесь записываются как операторы (обсуждение того, почему мы можем это делать, см. в отступлении 3.4). Здесь M — это масса частицы, $\hat{p}^2/2M$ — оператор кинетической энергии, а $V(\hat{x})$ — потенциальная энергия, которая является функцией наблюдаемого оператора координаты.

Движение частицы и эволюция ее состояния зависят от конкретного вида потенциала $V(\hat{x})$. Давайте начнем с простейшего случая $V(x) \equiv 0$ (эволюция в *свободном пространстве*). При этом условии любое собственное состояние $|p\rangle$ оператора импульса с собственным числом p является также собственным состоянием гамильтониана (3.55) с собственным значением (энергией) $E = p^2/2M$.

Упражнение 3.28. Покажите, что волновая функция, описывающая эволюцию состояния $|p\rangle$ под действием гамильтониана (3.55) при $V(x) \equiv 0$, задается выражением

$$\psi_p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{p^2}{2M\hbar}t}. \quad (3.56)$$

Согласно этому результату, поведение волновой функции собственного состояния импульса во времени аналогично поведению движущейся волны с волновым числом $k = p/\hbar$ и угловой частотой

$$\omega = \frac{p^2}{2M\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2M}. \quad (3.57)$$

Эволюция этой волны представляет собой равномерное движение с *фазовой скоростью* (отступление 3.5) $v_{ph} = \lambda_{dB}/T = \omega/k = p/2M$, где $T = 2\pi/\omega$ — период, связанный с волновым движением.

Удивительным образом данная фазовая скорость отличается от величины p/M , которая ожидалась бы в классическом случае. Объясняется это тем, что в (нефизичном) собственном состоянии импульса координата полностью неопределенна, а вероятность нахождения частицы одинакова по всей одномерной вселенной. Эта вероятность не меняется во времени. Соответственно, фазовая скорость волны де Бройля не соответствует непосредственно движению вещества.

Чтобы понять, как эволюция Шрёдингера переходит в движение, нам нужно изучить состояние, волновая функция которого локализована до некоторой степени в пространстве (для таких волновых функций мы используем термин *волновой пакет*). Движение этих волн управляется *групповой скоростью*:

$$v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{M} = \frac{p}{M}, \quad (3.58)$$

в точном соответствии с классическими ожиданиями¹.

¹ На самом деле фазовая скорость волны де Бройля — вопрос скорее договоренности, чем физики. Предположим, мы сдвигаем точку начала отсчета потенциальной энергии на $-V_0$, так что частица теперь имеет постоянный потенциал $V(x) = V_0$. То же физическое состояние, что и в (3.56), теперь будет обладать энергией $E + V_0$, так что его волновая функция приобретет следующую зависимость от времени:

$$\psi_p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{E + V_0}{\hbar}t}.$$

Пространственное поведение этой волновой функции такое же, как в (3.56), потому что оно определяется импульсом, а последний связан с кинетической энергией,

Посмотрим, например, на гауссово состояние с ненулевым средним импульсом. В упр. 3.25 мы узнали, что его можно разложить на множество волн де Бройля. Каждая из этих волн эволюционирует в соответствии с (3.28). Как эта эволюция повлияет на волновой пакет в целом?

Упражнение 3.29*. Рассмотрим волновую функцию, которая в момент времени $t = 0$ имеет гауссов вид (3.51).

- Найдите соответствующую волновую функцию $\tilde{\psi}(k, 0)$ в базисе волнового числа. Найдите эволюцию $\tilde{\psi}(k, t)$ под действием гамильтониана свободного пространства.
- Используйте обратное преобразование Фурье, чтобы найти волновую функцию $\psi(x, t)$ в координатном базисе.

Подсказка: для прямого и обратного преобразований Фурье воспользуйтесь свойствами (Г.13) и (Г.14).

- Найдите среднее значение $\langle x \rangle$ и дисперсию $\langle \Delta x^2 \rangle$ координаты в зависимости от времени.

Ответ:

$$\langle x \rangle = a + (p_0 / M)t, \quad \langle \Delta x^2 \rangle = \frac{d^2}{2} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{M^2 d^4} \right).$$

Как и ожидалось, волновой пакет движется с эффективной групповой скоростью $v_{\text{гр}} = p_0 / M$. Но помимо этого он расширяется со временем. Это явление, известное как *расплывание волнового пакета* (spreading of the wavepacket), является следствием *дисперсии групповой скорости*, т.е. того факта, что групповая скорость (3.58) неодинакова для разных значений k . В результате простое описание движения волновой функции на языке фазовой и групповой скоростей, как в отступлении 3.5, верно лишь приближенно.

Полезно сравнить это поведение с поведением лазерных импульсов. Такие импульсы могут распространяться на большие расстояния в вакууме безо всякого распыливания, потому что групповая скорость света в вакууме постоянна; она не зависит от частоты или волнового числа. Но, если распространение происходит в преломляющей среде с сильной дисперсией, где коэффициент преломления — а следова-

которая не изменилась. Но эволюция во времени будет зависеть от V_0 , поскольку частота волны теперь равняется $(E + V_0)/\hbar$, а не $E/\hbar$. Таким образом, фазовая скорость тоже будет зависеть от V_0 .

Групповая же скорость пропорциональна производной энергии и потому не зависит от выбора точки отсчета потенциала.

Отступление 3.5. Фазовая и групповая скорости

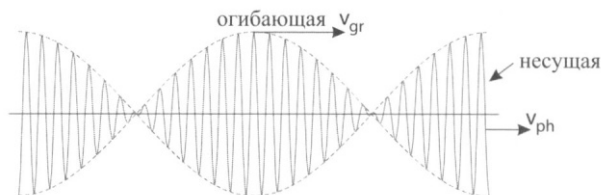
Фазовая и групповая скорости (phase and group velocities) — это фундаментальные понятия волновой механики. Разберем их здесь коротко. Рассмотрим волну, распространяющуюся вдоль оси z :

$$W(z, t) = W_0 \operatorname{Re}[e^{ikz - i\omega t}].$$

Конкретная природа волны не имеет значения: она может быть оптической, акустической или квантовой волной де Бройля. Приведенное выше уравнение можно переписать как:

$$W(z, t) = W_0 \operatorname{Re}[e^{ik(z - v_{ph}t)}],$$

где $v_{ph} = \omega/k$ есть *фазовая скорость*. Из приведенного выше уравнения ясно, что это скорость, с которой движутся точки постоянной фазы (*волновые фронты*). Определяется она функцией $k(\omega)$, известной как *дисперсионное соотношение*. Эта функция зависит от физики волны и /или среды, в которой она распространяется.



Теперь предположим, что волна промодулирована, как показано на рисунке. В момент времени $t = 0$ она имеет вид:

$$W(z, 0) = W_0 \operatorname{Re}[e^{ikz}] \cos \Delta kz = \frac{1}{2} W_0 \operatorname{Re}[e^{i(k + \Delta k)z} + e^{i(k - \Delta k)z}],$$

где $\Delta k \ll k$ описывает *огнивающую модуляцию*. Найдем скорость движения этой огнивающей. Подставив ненулевое время в уравнение выше, находим:

$$\begin{aligned} W(z, t) &= \frac{1}{2} W_0 \operatorname{Re}[e^{i(k + \Delta k)z - i(\omega + \Delta\omega)t} + e^{i(k - \Delta k)z - i(\omega - \Delta\omega)t}] = \\ &= W_0 \operatorname{Re}[e^{ikz - i\omega t}] \cos(\Delta kz - \Delta\omega t) = \\ &= W_0 \operatorname{Re}[e^{ik(z - v_{gr}t)}] \cos[\Delta k(z - v_{gr}t)], \end{aligned}$$

где $\Delta\omega$ — приращение частоты, соответствующее приращению Δk волнового числа, а $v_{gr} = \Delta\omega/\Delta k$ — *групповая скорость*, т. е. скорость, с которой распространяется огнивающая.

Групповая скорость определяет, например, скорость сигналов, переносимых волной. В системах, где волновое число пропорционально частоте (к примеру, электромагнитные волны в вакууме), фазовая и групповая скорости равны. Если соотношение между этими двумя величинами более сложное, эти скорости могут сильно различаться, порождая множество занятных явлений.

тельно, и групповая скорость — изменяется в зависимости от частоты, импульсы будут расплываться.

Исходя из приведенных выше результатов, мы знаем, что расширением можно пренебречь, если $\frac{\hbar}{Md^2}t \ll 1$; в этом случае форма гауссова волнового пакета не меняется: он движется как единое целое, копируя классическое движение точечной частицы. Это условие для микроскопических объектов почти всегда выполняется.

Но даже для микроскопических объектов эффект расширения весьма трудно наблюдать экспериментально. Это связано, в частности, со взаимодействием частицы с другими объектами. Как обсуждалось в подразд. 2.4.2, такое взаимодействие приводит к декогеренции, которая вызывает коллапс состояния на координатное собственное состояние или смесь таких состояний, таким образом «заново запуская» расширение. Расширение подавляется также в том случае, если частица находится в потенциальной яме, изучением которой мы вскоре займемся.

Упражнение 3.30. Оцените время, которое потребуется, чтобы:

- а) волновой пакет, описывающий единичный электрон с координатной неопределенностью порядка 1Å , расширился на 1 мм ;
- б) волновой пакет, описывающий металлический шарик массой 1 г с координатной неопределенностью порядка 1Å , расширился на 1 мм ;
- в) волновой пакет, описывающий 40-килограммовое зеркало интерферометра в гравитационном волновом проекте LIGO, координата которого известна с точностью $d = 10^{-18}\text{ м}$, расширился в такой степени, чтобы дисперсия его координаты удвоилась.

Упражнение 3.31. Покажите, что если среднее значение импульса намного превосходит неопределенность импульса первоначального волнового пакета, то расстояние, пройденное центром волнового пакета за время t , много больше величины, на которую он расширится.

3.5. Стационарное уравнение Шрёдингера

В оставшейся части этой главы мы будем изучать квантовое поведение точечной частицы в поле некоторой консервативной силы. Мы знаем, что это поведение управляется уравнением Шрёдингера. Вместо того

чтобы искать его общее решение, мы сначала научимся выполнять более скромное задание: *находить множество энергетических собственных значений и собственных состояний* для определенного потенциала. Если мы успешно справимся с этой задачей, то сможем определить и динамику во времени. С этой целью достаточно разложить начальное состояние на энергетические собственные состояния, а затем применить уравнение эволюции (1.25) к каждому из этих состояний.

Энергетические собственные состояния не только полезны для вычисления эволюции, но и физически значимы, поскольку часто образуют предпочтительный для декогеренции базис (см. подразд. 2.4.2). Это означает, что такие состояния и их статистические смеси возникают намного чаще, чем их же когерентные суперпозиции.

Кроме того, энергетические собственные состояния можно наблюдать экспериментально при помощи света. Переход между этими состояниями в атомах или молекулах связан с поглощением или излучением фотона, энергия которого $\hbar\omega$ равняется разнице соответствующих энергий в веществе. С помощью спектроскопии — измеряя длины волн, на которых происходит поглощение или излучение, — можно определить соответствующие энергии и тем самым проверить квантовые расчеты экспериментально.

Таким образом, наша задача — найти состояния $|\psi\rangle$, такие что

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (3.59)$$

Это уравнение называют *стационарным уравнением Шрёдингера* (time-independent Schrödinger equation). Как правило, мы будем работать в координатном базисе и искать волновую функцию $\psi(x)$ состояния $|\psi\rangle$. С этой целью мы берем скалярное произведение обеих сторон уравнения (3.59) и бра-вектора $\langle x|$.

Упражнение 3.32. Покажите, что в x -базисе стационарное уравнение Шрёдингера (3.59) принимает вид:

$$\left[V(x) - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (3.60)$$

Это обычное дифференциальное уравнение второго порядка, которое можно решить и аналитически, и численно. Прежде чем перейти

к поиску решений для конкретных потенциалов, разберем некоторые их общие свойства.

Упражнение 3.33. Найдите общие решения уравнения (3.60) для $V(x) = V_0$. Рассмотрите следующие случаи:

а) $E > V_0$;

б) $E < V_0$.

Ответ:

а) $Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, где $k = \sqrt{2M(E - V_0)} / \hbar$;

б) $Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$, где $\kappa = \sqrt{2M(V_0 - E)} / \hbar$,

где A и B — произвольные коэффициенты.

Мы видим, что эти решения принципиально различны для энергий выше и ниже уровня потенциала. В первом случае мы получаем пространственные осцилляции, как у волны де Бройля. Во втором случае решения возрастают или убывают экспоненциально в зависимости от координаты. При $x \rightarrow \pm\infty$ такое решение подразумевает бесконечные вероятности, поэтому оно не может существовать в каком-либо физическом состоянии (или даже в приближении такового).

Следующее упражнение обобщает это наблюдение на произвольные потенциалы.

Упражнение 3.34. Покажите, что гамильтониан (3.55) не может иметь собственные значения меньше, чем минимум функции $V(x)$ по действительной оси.

Иными словами, не может быть энергетических собственных значений, таких что $E < V(x)$ для всех x . Однако ситуации, в которых энергия ниже потенциала на *части* оси x , возможны, как в случае, например, с квантовым туннелированием (которое мы вскоре начнем изучать).

Упражнение 3.35. Покажите, что если $\psi(x)$ есть решение стационарного уравнения Шрёдингера, то и $\psi(x)$, и $d\psi(x)/dx$ должны быть непрерывны в точках, где потенциал $V(x)$ конечен.

Этот результат окажется чрезвычайно полезен при решении многих задач, в которых потенциал задается кусочной функцией, т. е. набором различных элементарных функций, каждая из которых определена в собственном интервале координат. Найти решение для каж-

дого из этих интервалов относительно легко, но затем эти решения необходимо «сшить», чтобы они образовали физически осмысленную волновую функцию. Упражнение 3.35 дает нам лекало для такого «сшивания».

Упражнение 3.36. Рассмотрите множество S_E , состоящее из всех собственных состояний гамильтониана с собственным значением энергии E . Покажите, что существует остов множества S_E , состоящий только из состояний с действительными волновыми функциями.

Например, волна де Бройля

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}, \quad (3.61)$$

связанная с импульсным собственным состоянием $|p\rangle$, является решением стационарного уравнения Шрёдингера с собственным значением энергии $E = p^2/2M$. Это же верно для волновой функции

$$\psi_{-p}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px}{\hbar}}, \quad (3.62)$$

которая представляет собой волну де Бройля для собственного состояния импульса $|-p\rangle$. Множество S_E состоит из состояний $|\pm p\rangle$ и их линейных комбинаций. В частности, действительные волновые функции

$$\psi_{p,+}(x) = \frac{\psi_p(x) + \psi_{-p}(x)}{2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cos \frac{px}{\hbar} \quad (3.63)$$

и

$$\psi_{p,-}(x) = \frac{\psi_p(x) - \psi_{-p}(x)}{2i} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sin \frac{px}{\hbar} \quad (3.64)$$

также представляют энергетические собственные состояния с тем же собственным значением. Волновые функции де Бройля (3.61) и (3.62) — а следовательно, и любая другая волновая функция, соответствующая той же энергии, — могут быть записаны как линейные комбинации этих действительных волновых функций.

Таким способом упр. 3.36 упрощает для нас поиск решений стационарного уравнения Шрёдингера. Мы можем ограничить поиски только действительными волновыми функциями без опасения что-нибудь «пропустить»: любое другое решение может быть записано как их линейная комбинация.

Упражнение 3.37. Рассмотрим множество S_E , состоящее из всех собственных состояний гамильтониана с собственным значением энергии E . Покажите, что если $V(x)$ есть четная функция координаты, то существует осто S_E , состоящий из состояний только с четными и нечетными волновыми функциями.

3.6. Связанные состояния

Связанные состояния (bound states) характеризуются волновой функцией, которая на обоих концах — при $x \rightarrow \infty$ и $x \rightarrow -\infty$ — стремится к нулю, так что частица демонстрирует некоторую степень локализации. Это свойство типично для энергетических собственных состояний в потенциальных ямах, т. е. в полях, где частица тяготеет к определенной локации или определенному набору локаций. Среди физических примеров можно назвать горошину в чайной чашке, шарик на пружине (гармонический осциллятор) или электрон в атоме. Для потенциалов такого типа мы обычно пользуемся упр. 3.36 и ищем решения стационарного уравнения Шрёдингера в действительной области.

Упражнения 3.38. Рассмотрим потенциал $V(x)$, который при $|x| \rightarrow \pm\infty$ асимптотически сходится к величинам $V_{1,2}$ соответственно. Покажите, что энергетическое собственное состояние является связанным в том и только том случае, если его энергия не превосходит $\min(V_1, V_2)$.

Граничные условия, наложенные на волновую функцию при $x \rightarrow \pm\infty$, дополняют дифференциальное стационарное уравнение Шрёдингера, порождая краевую задачу. Задача эта имеет решение только для определенных, дискретных значений энергии. Иными словами, связанные состояния существуют для *дискретного*, или *квантованного*, спектра собственных значений энергии, которые называют *энергетическими уровнями*.

Упражнение 3.39. Найдите энергетические собственные значения и собственные волновые функции для потенциала *прямоугольной ямы конечной глубины*

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{для } |x| > a/2 \\ 0 & \text{для } |x| \leq a/2 \end{cases} \quad (3.65)$$

при $V_0 > 0$ (рис. 3.1).

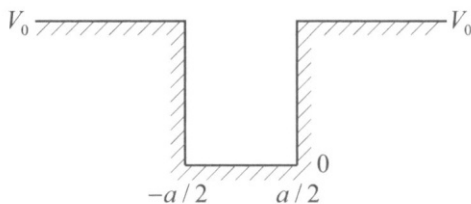


Рис. 3.1. Потенциал для упр. 3.39

- а) Напишите общее решение для каждой области, где потенциал постоянен. Исключите нефизичные слагаемые, возрастающие на бесконечности.

Подсказка: воспользуйтесь результатом упр. 3.37.

Ответ: обобщенная нечетная волновая функция имеет вид:

$$\psi(x) = \begin{cases} -Be^{\kappa x}, & x < -a/2 \\ A \sin kx, & -a/2 \leq x \leq a/2, \\ Be^{-\kappa x}, & x > a/2 \end{cases} \quad (3.66)$$

а обобщенная четная функция

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x}, & x < -a/2 \\ A \cos kx, & -a/2 \leq x \leq a/2, \\ Be^{-\kappa x}, & x > a/2 \end{cases} \quad (3.67)$$

где

$$k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar}, \quad (3.68a)$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2M(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (3.68b)$$

- б) Примените упр. 3.35 для «сшивания» этих результатов воедино. Покажите, что значения энергии, для которых одновременно достигается непрерывность как волновой функции, так и ее производной при $x = \pm a/2$, должны подчиняться трансцендентным уравнениям

$$\operatorname{tg} \theta = \sqrt{\frac{\theta_0^2}{\theta^2} - 1}$$

для четных волновых функций и

$$-\operatorname{ctg} \theta = \sqrt{\frac{\theta_0^2}{\theta^2} - 1}$$

для нечетных волновых функций, где

$$\theta = \frac{ka}{2} \quad \text{и} \quad \theta_0 = \frac{\sqrt{2MV_0}}{\hbar} \frac{a}{2}.$$

- с) Решите эти уравнения численно и постройте графики энергий трех самых низких связанных состояний в зависимости от глубины V_0 потенциальной ямы.

Ответ: см. рис. 3.2 а.

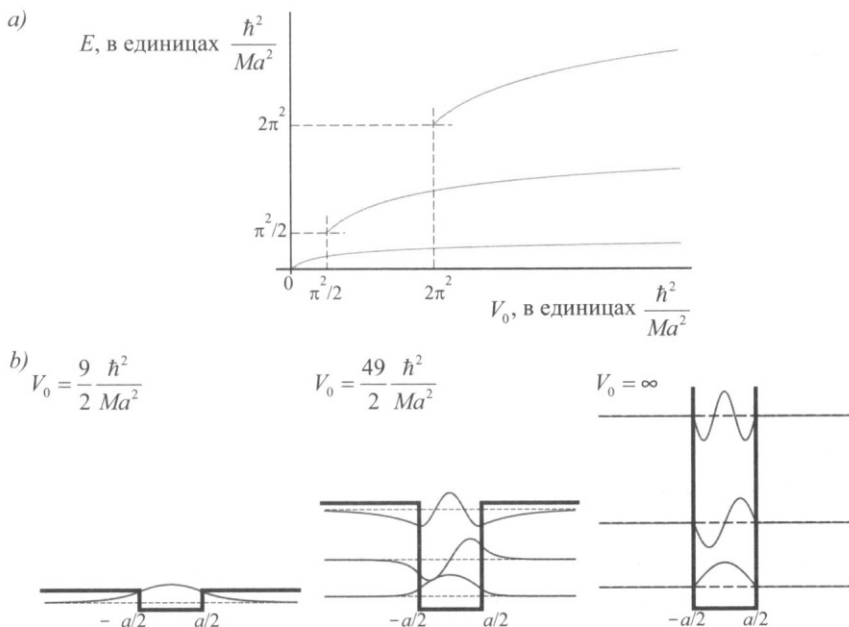


Рис. 3.2 Решение для упр. 3.39: а — самые низкие собственные значения энергии в зависимости от глубины ямы; для любых значений V_0 есть по крайней мере одно связанное состояние; существование остальных связанных состояний зависит от того, превышает ли V_0 определенные пороговые величины; б — волновые функции для собственных состояний с минимальной энергией при различной глубине ямы; яма слева поддерживает только одно, яма в середине — три, а яма справа — бесконечное множество связанных состояний.

- д) Какую минимальную глубину должна иметь потенциальная яма, чтобы в ней содержалось заданное число N связанных собственных состояний?

Ответ: $[\pi\hbar(N-1)]^2 / 2Ma^2$.

- е) Постройте графики волновых функций, соответствующих всем возможным собственным значениям энергии для $V_0 = \frac{9}{2} \hbar^2 / Ma^2$, $V_0 = \frac{49}{2} \hbar^2 / Ma^2$, а также трех самых низкоэнергетических решений для $V_0 = \infty$.

Ответ: см. рис. 3.2 *b*.

Данная задача требует больше труда, чем большинство других упражнений, но я посоветовал бы вам все же попытаться решить ее или по крайней мере тщательно разобрать решение, поскольку она хорошо иллюстрирует общие черты поведения волновых функций связанного состояния. Обсудим их вкратце.

Как можно понять из рис. 3.2 *b*, волновая функция продолжается и за пределами потенциальной ямы, так что существует ненулевая вероятность нахождения частицы в той области, где потенциал выше, чем энергия данной частицы. Разумеется, это откровенно неклассическое явление: если бы наша частица была классическим шариком, мечущимся в щели между двух стенок, мы никогда не обнаружили бы ее вне этой щели. Чем больше разница между энергией состояния E и глубиной ямы V_0 , тем быстрее падает волновая функция за пределами ямы и тем ниже вероятность нахождения частицы в этой области. В пределе при $V_0 \rightarrow \infty$ эта вероятность стремится к нулю. В данном случае задача, как мы увидим в следующем упражнении, допускает аналитическое решение.

В отличие от экспоненциального падения за пределами ямы, внутри нее волновая функция демонстрирует осциллирующее поведение, в соответствии с упр. 3.33. Для каждого последующего энергетического собственного состояния число раз, которые волновая функция пересекает ось абсцисс, возрастает на единицу. Рост этого числа связан с более быстрыми пространственными осцилляциями, с более высоким волновым числом — и, следовательно, с более высоким значением энергии. Соответственно, для каждого ненулевого числа пересечений существует определенный минимальный потенциал, ниже которого этого связанного состояния уже не существует (рис. 3.2 *a*). Чем глубже и шире потенциальная яма, тем больше связанных состояний она может поддерживать. Однако, какой бы мелкой эта яма ни была, она поддерживает по меньшей мере одно связанное состояние — с волновой функцией, не пересекающей оси абсцисс.

Упражнение 3.40. Найдите энергетические собственные значения и волновые функции связанных стационарных состояний для упр. 3.39 в случае $V_0 \rightarrow \infty$ (известном как бесконечно глубокая потенциальная яма).

Ответ: Дискретный энергетический спектр с

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2Ma^2} \quad (3.69)$$

и собственными волновыми функциями

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \left[\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \text{ четное } n \right. \\ \left. \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \text{ нечетное } n \right] & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ 0, & |x| > a/2 \end{cases}. \quad (3.70)$$

Эти волновые функции показаны на рис. 3.2 *b* справа.

Они демонстрируют следующие интересные свойства:

- $\psi(x) = 0$ вне ямы;
- $d\psi(x)/dx$ показывает разрывы при $x = \pm a/2$;
- $\psi(x)$ непрерывна при любых значениях координаты.

Исчезающая вне ямы волновая функция может рассматриваться как крайний случай экспоненциального падения вне ямы, наблюдавшегося в предыдущем упражнении; в данном случае яма бесконечно глубока, и коэффициент затухания тоже бесконечен. Бесконечное значение потенциала вне ямы подразумевает также, что на нас не действуют условия из упр. 3.35, так что ни волновой функции, ни ее производной не обязательно быть непрерывными при $x = \pm a/2$. Однако мы видим, что разрывы есть только у $d\psi(x)/dx$, тогда как у самой волновой функции их нет. Это можно понять следующим образом. В соответствии с упр. 3.33 производная волновой функции внутри ямы ограничена величиной $|d\psi(x)/dx| \leq k|\psi(x)|$, где $k = \sqrt{2ME}/\hbar$. Вне ямы $|d\psi(x)/dx| = 0$. Это означает, что разрыв производной волновой функции на границе ямы конечен, что подразумевает, в свою очередь, непрерывность самой волновой функции.

Аналогичное рассуждение удастся провести во всех практических случаях, поэтому волновую функцию можно всегда с уверенностью считать непрерывной — за исключением, возможно, каких-то чрезвычайно экзотических потенциалов. А вот производная волновой функции может демонстрировать разрывы всюду, где потенциал бесконечен или сингулярен.

Рассмотрим теперь другой крайний случай прямоугольной потенциальной ямы, важный как с образовательной, так и с научной точки зрения.

Упражнение 3.41. Найдите собственные значения энергии и волновые функции связанных стационарных состояний потенциала $V(x) = -W_0\delta(x)$ в координатном базисе.

Подсказка: проинтегрируйте обе части стационарного уравнения Шрёдингера на бесконечно малом интервале вокруг $x = 0$ и воспользуйтесь уравнением (Г.9).

Ответ: Единственное собственное состояние с $E = -W_0^2 M / 2\hbar^2$ и волновой функцией (рис. 3.3):

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa} \begin{cases} e^{-\kappa x} & \text{при } x > 0 \\ e^{\kappa x} & \text{при } x \leq 0. \end{cases} \quad (3.71)$$

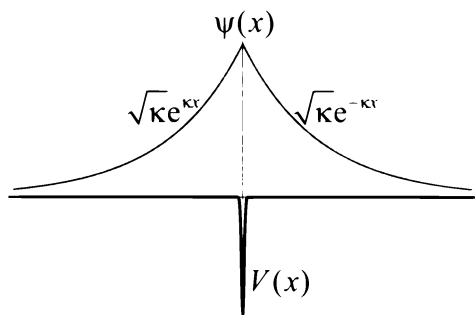


Рис. 3.3. Волновая функция энергетического собственного состояния дельта-потенциала (упр. 3.41)

Упражнение 3.42'. Получите результат предыдущего упражнения при помощи альтернативного метода. Решите стационарное уравнение Шрёдингера для конечной потенциальной ямы (3.65) аналитически в пределе бесконечно глубокой и узкой потенциальной ямы: $a \rightarrow 0$, $V_0 = W_0/a$ при $W_0 = \text{const}$. Сколько связанных состояний может содержать эта потенциальная яма?

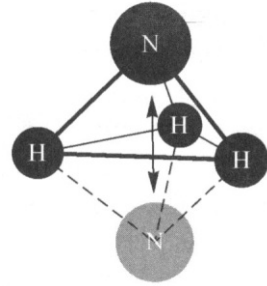
Упражнение 3.43. Частица находится в связанном состоянии потенциала $V(x) = -W_0\delta(x)$. Потенциал этот внезапно меняется на $V(x) = -2W_0\delta(x)$. Найдите вероятность того, что данная частица останется в связанном состоянии.

Упражнение 3.44'. Исследуйте связанные состояния потенциала

$$V(x) = -W_0\delta(x-a) - W_0\delta(x+a). \quad (3.72)$$

Отступление 3.6. Мазер на аммиаке

«Двойная дельта-функция» в упр. 3.44 представляет собой теоретическую основу построения первого аммиачного мазера — предтечи современных лазеров, — сконструированного в 1953 г. Чарльзом Таунсом и его коллегами*. Источником излучения, использованным в этом мазере, была молекула аммиака NH_3 , показанная на рисунке справа. Молекула имеет форму пирамиды, основание которой образуют три атома водорода, а на вершине располагается атом азота. Такое его положение соответствует минимуму потенциальной энергии, представленному одной из дельта-функций. Другая дельта-функция соответствует зеркальному отражению этой же конфигурации, где атом азота располагается ниже плоскости основания. Обе конфигурации обладают одинаковой энергией, и существует ненулевая вероятность «перепрыгивания» атома азота из одной конфигурации в другую. В результате энергетическими собственными состояниями являются не верхнее и нижнее положения атома азота, но их симметричные и антисимметричные линейные комбинации, как в упр. 3.44. Именно переход между этими двумя состояниями порождает 24-гигагерцовое микроволновое излучение, испускаемое мазером.



* J. P. Gordon, H. J. Zeiger, and C. H. Townes, *Molecular Microwave Oscillator and New Hyperfine Structure in the Microwave Spectrum of NH_3* , *Physical Review* **95**, 282 (1954); J. P. Gordon, H. J. Zeiger, and C. H. Townes, *The Maser — New Type of Microwave Amplifier, Frequency Standard, and Spectrometer*, *Physical Review* **99**, 1264 (1955).

- Найдите уравнение для собственных значений энергии (рассмотрите и четный, и нечетный случай). Сколько решений оно имеет?
- Покажите, что в пределе при $a \rightarrow \infty$ это уравнение становится идентичным уравнению для единичной ямы.
- Найдите выражение для значений энергии и волновых функций собственных состояний гамильтониана для потенциала (3.72) вплоть до первого порядка при $\hbar^2 / W_0 M a \ll 1$.

Ответ: энергии четного и нечетного состояний равны

$$E_{e,o} = -W_0^2 M / 2\hbar^2 (1 \pm 2e^{-2\kappa_0 a}), \quad (3.73)$$

где $\kappa_0 = W_0 M / \hbar^2$.

Наблюдаемое здесь поведение часто встречается в квантовой механике. Так, протон образует притягивающий потенциал для свободного электрона; этот потенциал порождает связанные состояния, которые мы называем атомом водорода. Если имеются два удаленных

друг от друга протона и один-единственный электрон, то состояния электрона, связанного с любым из протонов, соответствуют одному и тому же собственному значению энергии — так что это вырожденное значение. Но если протоны находятся достаточно близко друг к другу, и следовательно, на электрон действуют оба потенциала одновременно, то энергетические собственные состояния становятся нелокальными, а вырожденность собственного значения энергии *снимается*: энергетические уровни расщепляются, как в уравнении (3.73). Это расщепление можно использовать в практических приложениях, как рассказывается в отступлении 3.6. Более того, отрицательный сдвиг энергии одного из новых энергетических собственных состояний может превысить положительный потенциал, возникающий вследствие кулоновского отталкивания двух протонов; в такой ситуации будет образована молекула.

Упражнение 3.45. В условиях предыдущей задачи (удаленные друг от друга ямы) предположим, что в момент времени $t = 0$ частица локализована в первой яме (т. е. ее волновая функция — это волновая функция из упр. 3.41 с центром в $x = a$). Как будет себя вести вероятность найти ее во второй яме в зависимости от времени?

В заключение давайте выведем важное свойство связанных состояний, которое пригодится нам позже.

Упражнение 3.46*. Покажите, что связанные энергетические собственные состояния точечной частицы с единственной степенью свободы не могут быть вырожденными, если потенциал ограничен снизу.

3.7. Несвязанные состояния

Волновые функции несвязанного состояния принимают конечные ненулевые значения при $x \rightarrow -\infty$, или при $x \rightarrow +\infty$, или в обоих случаях. Как мы уже выяснили, это происходит, когда энергия E удовлетворяет условию

$$E > V(-\infty) \text{ или } E > V(+\infty). \quad (3.74)$$

Простейшим примером несвязанного состояния может служить собственное состояние импульса $|p\rangle$ в свободном пространстве. Связанное с ним собственное значение энергии $E = p^2/2M$ превышает потенциал $V(x) \equiv 0$.

Поскольку, в отличие от связанного состояния, у нас здесь нет граничного условия $\psi(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$, уравнение Шрёдингера (3.60) имеет решение для *любого* значения энергии [если только выполняется (3.74)]. Более того, в некоторых случаях энергетические собственные состояния вырождены. Именно так, например, обстоит дело с потенциалом свободного пространства, в котором состояния $|\pm p\rangle$ обладают одинаковой энергией.

Существование собственного состояния для любого значения энергии, удовлетворяющего (3.74), означает, что энергия в этой области становится непрерывным наблюдаемым (см. отступление 3.7). По этой причине несвязанные состояния иногда называют состояниями *непрерывного спектра*. Скажем, в ситуации рис. 3.1 спектр энергии дискретен для $E < 0$ и непрерывен для $E \geq 0$.

Как мы знаем из разд. 3.2, нормирование для собственных состояний непрерывных наблюдаемых — дело хитрое и неоднозначное. Поэтому, как правило, при анализе волновых функций несвязанных состояний о нормировании мы не думаем.

3.7.1. Потенциал-ступенька

Упражнение 3.47^s. Найдите волновые функции, соответствующие собственным состояниям гамильтониана с потенциалом

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq 0 \\ V_0 & \text{при } x > 0 \end{cases} \quad (3.75)$$

(рис. 3.4), соответствующим заданной энергии $E > V_0$, принимая во внимание условие непрерывности самой волновой функции и ее производной при $x = 0$.

Ответ: любая волновая функция вида

$$\psi(E, x) = \begin{cases} Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x}, & x < 0 \\ Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x}, & x \geq 0 \end{cases}, \quad (3.76)$$

где $k_0 = \sqrt{2ME}/\hbar$, $k_1 = \sqrt{2M(E - V_0)}/\hbar$ и четыре амплитуды A, B, C, D удовлетворяют

$$A + B = C + D; \quad (3.77a)$$

$$ik_0(A - B) = ik_1(C - D). \quad (3.77b)$$

Отступление 3.7. Энергия: дискретное или непрерывное наблюдаемое?

Дискретный или непрерывный характер большинства наблюдаемых, которые мы изучали до сих пор, зависит от их физической природы. Для энергии же он зависит от конкретных физических обстоятельств, о которых идет речь: энергетический спектр дискретен внутри потенциальных ям и непрерывен для несвязанных состояний. Более того, энергетический спектр в одних и тех же условиях может содержать и дискретные, и непрерывные области. Именно так обстоит дело в случае конечной ямы (упр. 3.39), где состояния становятся несвязанными, а спектр энергий — непрерывным для $E > V_0$. Есть и более физичный пример: электрон может находиться в связанном состоянии по отношению к ядру, образуя вместе с ним атом с дискретным энергетическим спектром, или в несвязанном состоянии с непрерывным спектром, соответствующим ионизированному атому.

Можно возразить, что энергия по природе является непрерывной переменной, а форма потенциальной функции определяет лишь, какие значения этой переменной связаны с собственными значениями гамильтониана. Однако по определению (подразд. 1.9.1) именно эта связь устанавливает разрешенное множество значений оператора квантового наблюдаемого. Если энергетические собственные состояния существуют для дискретного набора значений, то и сам оператор энергии становится дискретным наблюдаемым.

Мы знаем, что дискретные и непрерывные наблюдаемые следуют разным правилам нормирования. Удивительным образом энергетические собственные состояния этим правилам подчиняются. Связанные состояния имеют квадратично интегрируемые волновые функции, разрешающие применение нормировочного правила для дискретного спектра $\langle E_i | E_j \rangle = \delta_{ij}$. Несвязанные волновые функции, в свою очередь, имеют бесконечную норму, как и следует ожидать для состояний непрерывного спектра.

Еще одна интересная особенность энергетических собственных состояний заключается в том, что, каким бы сложным ни был их спектр, они обязательно образуют базис в гильбертовом пространстве состояний, которые физически разрешены в условиях заданного потенциала. Например, все энергетические собственные волновые функции бесконечной потенциальной ямы (упр. 3.40) за пределами ямы уходят в нуль. Соответственно, натянутое на них гильбертово пространство — это пространство не всех возможных функций, но только функций, локализованных внутри ямы, т. е. тех, которые разрешены в условиях потенциала этой формы.

Видим, что общее решение зависит от четырех параметров, тогда как условия непрерывности порождают только два уравнения (3.77). Нормирование дало бы еще одно дополнительное уравнение; однако мы договорились пренебречь нормированием, а потому можно просто сказать, что любые две волновые функции, различающиеся на постоянный множитель, физически идентичны. Это оставляет нам три параметра и два уравнения; следовательно, для каждого значения энергии существует два линейно независимых набора решений. Найдем их, введя в систему дополнительное уравнение.

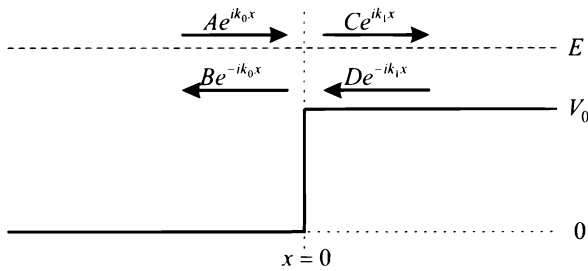


Рис. 3.4. Решение стационарного уравнения Шрёдингера для потенциала-ступеньки (упр. 3.47 и 3.51)

Упражнение 3.48^s. Решите уравнения (3.77) для B и C , если дополнительное уравнение:

- а) $D = 0$,
- б) $A = 0$.

Ответ:

$$\text{а) } B = A \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1}; \quad C = A \frac{2k_0}{k_0 + k_1}. \quad (3.78a)$$

$$\text{б) } B = D \frac{2k_1}{k_0 + k_1}; \quad C = D \frac{k_1 - k_0}{k_0 + k_1}. \quad (3.78b)$$

Разумеется, любая линейная комбинация этих решений также является решением.

Выбор $D = 0$ или $A = 0$ в упражнении выше диктуется следующим соображением. Как мы выяснили в разд. 3.4, эволюция волны де Бройля вида e^{ikx} с положительным k соответствует распространению в направлении положительного x , а e^{-ikx} — в направлении отрицательного x . Следовательно, случай $D = 0$ соответствует волне де Бройля с амплитудой A (назовем ее A -волной), идущей слева и встречающей на своем пути барьер. Часть этой волны преодолевает барьер и становится C -волной; другая ее часть отражается в виде B -волны. Случай $A = 0$ соответствует частице, приходящей справа (D -волна) и порождающей B - и C -волны в прохождении и отражении соответственно.

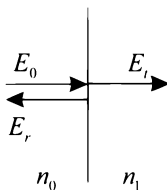
В этом рассуждении несколько контринтуитивным является, возможно, то, что мы рассматриваем столкновение частицы с барьером как *стационарное* состояние, т.е. событие бесконечной длительности. Это связано с бесконечной пространственной протяженностью волны де Бройля, о которой мы говорили в разд. 3.2. Непло-

Отступление 3.8. Формулы Френеля

Рассмотрим оптическую волну амплитуды E_0 , распространяющуюся в веществе с коэффициентом преломления n_0 . Падая на границу одного вещества с другим, коэффициент преломления которого n_1 , волна частично проходит сквозь эту границу, а частично отражается от нее. Формулы Френеля связывают амплитуды прошедшей и отраженной волн (E_t и E_r соответственно) с E_0 в зависимости от угла падения и поляризации. Для нормального падения эти уравнения принимают вид:

$$E_t = E_0 \frac{2n_0}{n_0 + n_1}; \quad (3.79a)$$

$$E_r = E_0 \frac{n_0 - n_1}{n_0 + n_1}. \quad (3.79b)$$



Отметим, что для $n_0 > n_1$ мы имеем $E_t > E_0$. Однако здесь нет нарушения закона сохранения энергии. Дело в том, что интенсивность (плотность потока мощности) оптической волны пропорциональна не только квадрату ее амплитуды, но и коэффициенту преломления:

$$I = 2nc\epsilon_0 |E|^2.$$

Прошедшая в вещество волна движется с меньшей скоростью, так что поток энергии, переносимый этой волной, также ниже. Сумма интенсивностей отраженной и прошедшей волн

$$I_t + I_r = 2c\epsilon_0 (n_1 |E_t|^2 + n_0 |E_r|^2) = 2c\epsilon_0 n_0 |E_0|^2 = I_0,$$

равна интенсивности падающей волны.

хой аналогией этого эффекта может служить непрерывный лазерный луч, переходящий из воздуха в стекло и претерпевающий частичное отражение в соответствии с формулами Френеля (отступление 3.8). Подобно ситуации с квантовой частицей, отражение здесь представляет собой не мгновенное событие, но стационарный процесс. Интересно, что если мы сравниваем уравнения Френеля (3.79) для амплитуд поля с уравнениями (3.78) и учитываем обратную пропорциональность оптического волнового числа фазовой скорости, а вследствие этого прямую пропорциональность коэффициенту

преломления, то мы обнаруживаем, что эти две системы уравнений почти идентичны!

Примечательная особенность результата (3.78а) заключается в том, что амплитуда C прошедшей волны де Бройля выше, чем амплитуда A падающей. Аналогично оптическому случаю (отступление 3.8), это не противоречит закону сохранения вещества, поскольку поток вещества пропорционален как плотности вероятности, связанной с волновой функцией, так и фазовой (или групповой) скорости данной волновой функции. Приняв это во внимание, мы обнаружим, что закон сохранения вещества соблюдается в точности.

Упражнение 3.49. Определив поток плотности вероятности волны де Бройля как $j = v_{ph} |\psi(x)|^2$, найдите потоки плотности вероятности для A -, B - и C -волн в (3.78а). Найдите коэффициенты отражения и пропускания для этих потоков, т.е. j_B/j_A и j_C/j_A . Покажите, что их сумма равна единице. Как ведут себя эти коэффициенты при $E \rightarrow V_0$ и $E \rightarrow \infty$?

Упражнение 3.50. Выполните упр. 3.47 для энергий ниже V_0 . Убедитесь, что коэффициент отражения равен единице.

Если вам по-прежнему не нравятся столкновения бесконечной длительности, попробуйте сделать следующее. Начните с гауссова волнового пакета, движущегося на барьер, разложите его на множество волн де Бройля и исследуйте его эволюцию аналогично тому, как это делалось в упр. 3.29.

Упражнение 3.51*. Найдите эволюцию состояния, начальная волновая функция которого представляет собой гауссов пакет, описанный в (3.51) с положительным импульсом p_0 и отрицательной координатой центра a в поле потенциала-ступеньки (рис. 3.4). Считайте, что:

- $|a| \gg d$, поэтому волновой пакет первоначально целиком находится слева от ступеньки;
- $d^2 \gg \hbar t / M$, поэтому расширением волнового пакета (упр. 3.29) можно пренебречь;
- начальная средняя энергия частицы $E = p_0^2 / 2M$ больше, чем V_0 ;
- неопределенность импульса волнового пакета $\hbar / 2D$ мала по сравнению со средними импульсами $\hbar k_0$ и $\hbar k_1$ падающей и прошедшей волн де Бройля.

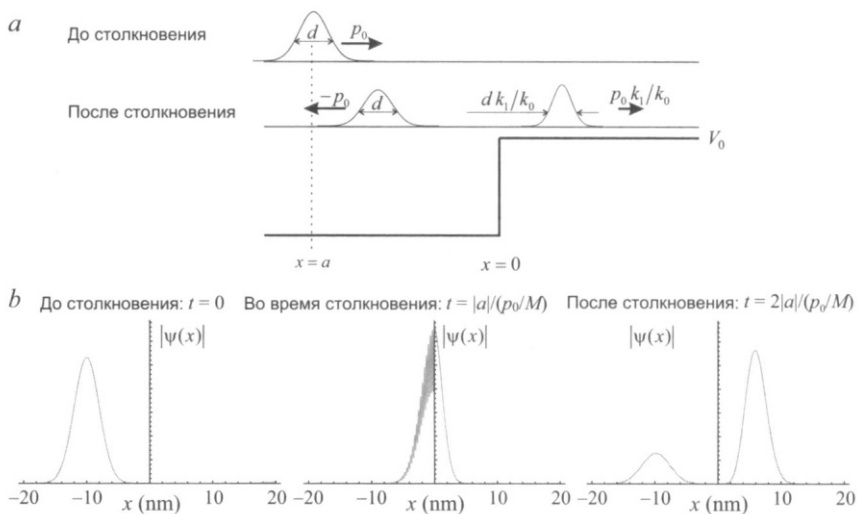


Рис. 3.5. Гауссов волновой пакет, взаимодействующий с потенциалом-ступенькой (упр. 3.47 и 3.51): *a* — схематическая диаграмма эволюции; *b* — численное моделирование для электрона с $a = -10$ нм, начальной энергией $E = 3,78$ эВ (соответствующей $k_0 = 10^{10} \text{ м}^{-1}$) и высотой потенциальной ступеньки $V_0 = 2,42$ эВ (соответствующей $k_1 = 0,6 \times 10^{10} \text{ м}^{-1}$). Осцилляции, видимые во время столкновения, возникают от интерференции падающей и отраженной волн. На крайнем правом графике видно, что прошедший волновой пакет движется медленнее, чем отраженный.

Решение представлено графически на рис. 3.5. Столкнувшись с потенциальной ступенькой, первоначальный волновой пакет расщепляется. Часть его продолжает распространяться и после этого, но с меньшей групповой скоростью, тогда как другая часть отражается от ступеньки и начинает двигаться в обратном направлении. Удивительно, но все это сложное движение проистекает от простого поворота фаз составляющих волн де Бройля!

В качестве заключительного комментария к задаче потенциальной ступеньки отметим, что ненулевая вероятность отражения частицы от потенциальной ступеньки, которая уступает по величине энергии частицы или даже отрицательна [как в случае, описываемом в (3.78b)], представляет собой строго квантовое явление. Любая классическая частица просто «пролетит над» такой потенциальной ступенькой, снизив или увеличив свою скорость, но ни в коем случае не поменяет направление движения на обратное.

Еще более неклассическим является эффект, который мы будем обсуждать сейчас.

3.7.2. Квантовое туннелирование

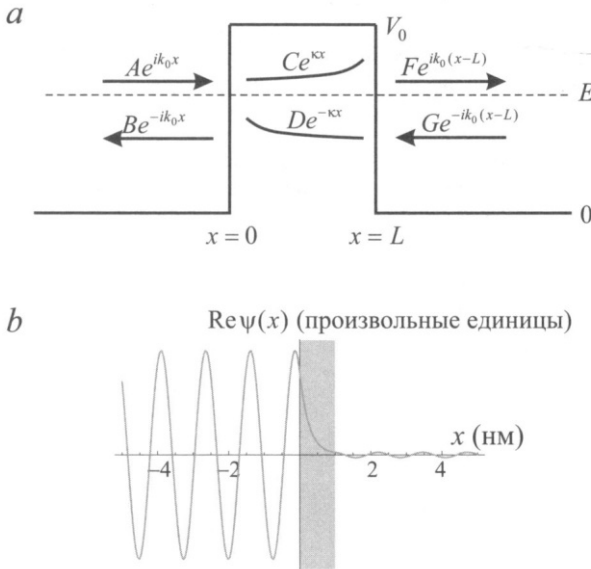


Рис. 3.6. Туннельный проход сквозь барьер (упр. 3.52): *a* — обозначения компонентных волн де Бройля; *b* — действительная часть численного решения для электрона с начальной энергией $E = 0,95$ эВ (соответствующей $k_0 = 0,5 \times 10^{10} \text{ м}^{-1}$) и высотой потенциального барьера $V_0 = 1,51$ эВ (соответствующей $k_0 = 0,39 \times 10^{10} \text{ м}^{-1}$). Барьер длины $L = 1$ нм показан серым. Видны три части волновой функции: осциллирующая перед туннелем, экспоненциально убывающая в пределах туннеля и снова осциллирующая, но с меньшей амплитудой, после туннеля.

Упражнение 3.52. Рассмотрим потенциал на рис. 3.6 *a*, т. е.

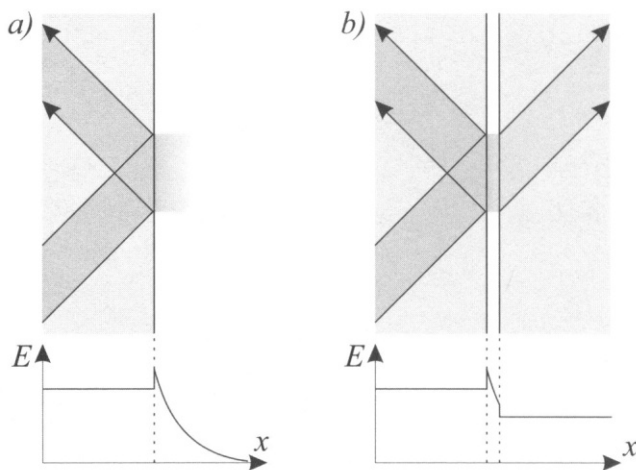
$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq 0 \text{ или } x > L \\ V_0 & \text{при } 0 < x \leq L \end{cases} \quad (3.80)$$

и частицу с энергией, удовлетворяющей условию $0 < E < V_0$.

- Каково вырождение энергетических уровней?
- Найдите решение стационарного уравнения Шрёдингера, которое соответствует волне де Бройля, приходящей слева.
- Найдите коэффициенты пропускания и отражения для потока вероятности. Равна ли их сумма единице?

Отступление 3.9. Оптический аналог туннелирования

Явление квантового туннелирования также имеет аналог в оптике. Когда оптическая волна претерпевает полное внутреннее отражение, например на границе стекла и воздуха, с противоположной стороны границы (в воздухе) появляется *эванесцентная волна*. Как правило, она затухает экспоненциально на масштабе расстояния, сравнимом с длиной волны, и не несет никакой энергии. Ситуация здесь аналогична той, что исследовалась в упр. 3.50. Однако если вблизи описываемой границы находится другой стеклянный объект, то эванесцентная волна войдет в него и будет распространяться дальше. Как и в случае квантового туннелирования, групповая скорость волны в пределах воздушного промежутка бесконечна.



a — эванесцентная волна, появляющаяся в результате полного внутреннего отражения;
b — оптическое туннелирование — аналог туннелирования квантового.

Ответ:

$$\text{пропускание: } \frac{j_F}{j_A} = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4k_0^2 \kappa^2}{4k_0^2 \kappa^2 + (\kappa^2 + k_0^2)^2 \text{sh}^2(\kappa L)}; \quad (3.81a)$$

$$\text{отражение: } \frac{j_B}{j_A} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{(\kappa^2 + k_0^2)^2 \text{sh}^2(\kappa L)}{4k_0^2 \kappa^2 + (\kappa^2 + k_0^2)^2 \text{sh}^2(\kappa L)}, \quad (3.81b)$$

$$\text{где } k_0 = \sqrt{2ME} / \hbar \text{ и } \kappa = \sqrt{2M(V_0 - E)} / \hbar.$$

Мы видим, что частица, встречающая на своем пути конечный потенциальный барьер, превышающий по высоте кинетическую энергию самой частицы, имеет ненулевую вероятность «туннелировать»

сквозь этот барьер (рис. 3.6 *b*). Конечно, это явление не имеет аналогов в классической физике. Но еще более удивительно следующее.

Упражнение 3.53*. Исследуйте прохождение гауссова волнового пакета сквозь потенциал, показанный на рис. 3.6 *a*, при тех же условиях и допущениях, что в упр. 3.51. Вычислите и постройте графики зависимости координат центров приходящего и прошедшего волновых пакетов (*A*- и *F*-волн соответственно) от времени.

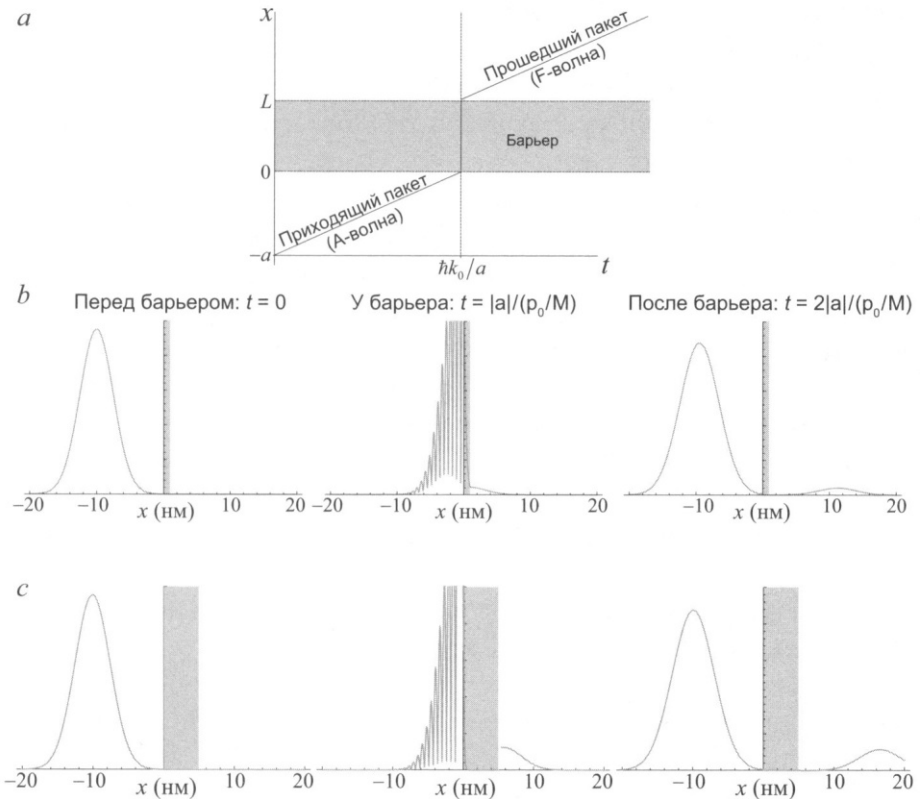


Рис. 3.7. Сверхсветовое туннелирование гауссова волнового пакета (упр. 3.53): *a* — схематический график зависимости координаты от времени; *b* — численное моделирование для электрона, начинающего движение от $a = -10$ нм, с теми же параметрами, что на рис. 3.6; *c* — численное моделирование с теми же параметрами, только при $L = 5$ нм и $V_0 = 5,66$ эВ; часть справа от барьера увеличена в 10^{23} раз; центр прошедшего волнового пакета выходит из барьера в то же самое время, когда центр приходящего волнового пакета входит в него

Если вы сделали все верно, у вас должна получиться картина, аналогичная той, что изображена на рис. 3.7. То есть туннелирование происходит *мгновенно*: прошедший волновой пакет появляется за барьером одновременно с поглощением первоначального волнового пакета. Волновой пакет не проводит времени непосредственно внутри барьера. Причину этого можно на пальцах объяснить так. Групповая скорость является производной $v_{gr} = d\omega/dk$. Внутри барьера волновая функция состоит из действительных экспонент (C - и D -волны на рис. 3.6) и, следовательно, имеет постоянную комплексную фазу. Это означает, что эффективный волновой вектор — константа $k = 0$, а значит, производная по нему бесконечна.

В главе 2 мы уже встречались с квантовым явлением, разрешавшим, на первый взгляд, сверхсветовую связь, но после тщательного анализа выяснили, что это только иллюзия. В данном же случае вывод о сверхсветовой групповой скорости — верный. Однако и здесь он не означает возможности мгновенной передачи сигнала — по следующей причине.

Мы обнаружили, что скорость *центра* волнового пакета бесконечна. Но зададимся вопросом: в какой момент наблюдатель позади барьера узнает, что частица попала в барьер? Обязательно ли это должно произойти ровно в тот момент, когда из барьера вышла половина волнового пакета? А может быть, четверть? Или десятая часть?

В действительности это происходит намного раньше. Из комплексного анализа нам известно, что функция Гаусса *аналитична*: любой фрагмент этой функции позволяет восстановить ее поведение на всей комплексной плоскости. Следовательно, теоретически любой наблюдатель в любой точке пространства и времени знает о присутствии частицы с гауссовой волновой функцией и может предсказать ее эволюцию. Помня об этом, рассуждать о мгновенной связи бессмысленно.

А что, если попробовать другую волновую функцию, например в форме прямоугольного импульса (3.9), которая принимает ненулевые значения только в пределах конечной пространственной области? Трудность с подобными волновыми функциями состоит в том, что в этом случае мы не можем применять приближения, которые использовали для гауссова волнового пакета (см. упр. 3.51). У гауссова волнового пакета есть свойство, позволяющее нам использовать эти аппроксимации, — его импульсное представление тоже гауссово и потому убывает экспоненциально по обе стороны от центральной точки. А состояния с пространственно ограниченными волновыми пакетами в импульсном представлении не ограничены по ширине:

к примеру, результат Фурье-преобразования импульсной функции есть кардинальный синус sinc [упр. Г.9 f)]. Это означает, что такое состояние будет иметь значительные компоненты, соответствующие сколь угодно высоким энергиям: не просто превышающим потенциальный барьер, но распространяющимся на релятивистские значения. Из этого следует, что математический аппарат нерелятивистской квантовой механики, которую мы изучаем, неприменим к этой задаче.

Завершая наше исследование потенциального барьера, давайте посмотрим, что происходит, если энергия частицы превышает величину барьера. Для общности будем считать, что V_0 может быть либо положительным, либо отрицательным, соответствуя случаям либо потенциального барьера, либо потенциальной ямы.

Упражнение 3.54. Выполните упр. 3.52 для $E > 0$ и $E > V_0$.

Ответ:

$$\text{пропускание: } \frac{j_F}{j_A} = \frac{4k_0^2 k_1^2}{4k_0^2 k_1^2 \cos^2(k_1 L) + (k_1^2 + k_0^2)^2 \sin^2(k_1 L)}; \quad (3.82a)$$

$$\text{отражение: } \frac{j_B}{j_A} = \frac{(k_1^2 - k_0^2)^2 \sin^2(k_1 L)}{4k_0^2 k_1^2 \cos^2(k_1 L) + (k_1^2 + k_0^2)^2 \sin^2(k_1 L)}, \quad (3.82b)$$

где $k_0 = \sqrt{2ME} / \hbar$ и $k_1 = \sqrt{2M(E - V_0)} / \hbar$.

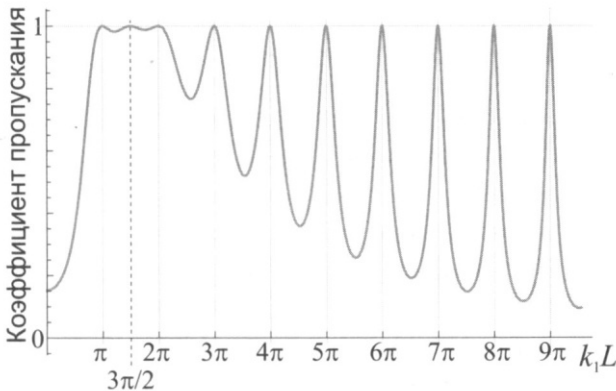


Рис. 3.8. Коэффициент пропускания (3.82a) потенциального барьера для случая, где энергия частицы превышает высоту барьера, а именно $k_0 L = 3\pi/2$.

Упражнение 3.55. При каких условиях коэффициент пропускания в предыдущем упражнении равен единице?

Ответ: $V_0 = 0$ (т. е. $k_0 = k_1$) или $k_1 L = m\pi$, где m — положительное целое число.

Мы видим, что проницаемость потенциального барьера (или ямы, если $V_0 < 0$), демонстрирует осциллирующее поведение и принимает значение единицы, когда толщина барьера соответствует целому или полужелому числу укладывающихся в него волн де Бройля. Этому опять же можно найти прямую аналогию в оптике: это оптический резонатор, известный также как эталон Фабри — Перо. В таком резонаторе оптическая волна заключена между двумя зеркалами, и множественные ее отражения интерферируют друг с другом. Если длина кольцевого маршрута волны в интерферометре составляет целое число длин волн (т. е. $2L = m\lambda = \frac{2\pi m}{k_1}$), то интерференция становится конструктивной, а коэффициент пропускания резонатора по отношению к внешней волне принимает значение 1.

Мы видим также, что ширина каждого резонансного пика уменьшается вместе с k_1 . Происходит это благодаря увеличению коэффициента отражения каждого «зеркала», который задается первой частью уравнений (3.78a) и (3.79b) для квантовой механики и оптики соответственно. Чем ближе этот коэффициент к единице, тем выше резкость эталона и острее пик резонанса.

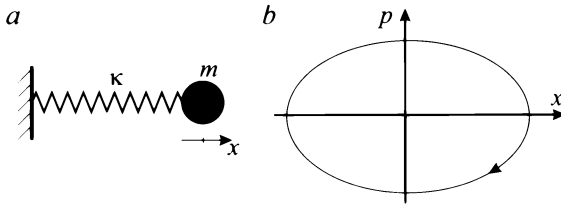
3.8. Гармонический осциллятор

Гармонический осциллятор — это физическая система первостепенной важности, области применения которой выходят далеко за рамки чистой механики. Фактически *любое* колебательное движение управляется гамильтонианом, аналогичным гамильтониану механического гармонического осциллятора и, таким образом, имеет то же квантовое описание. Примеры осцилляторов включают в себя и электромагнитное поле, и колебательные контуры в электронике, и квазичастицы в твердом теле. Даже фотон, о котором мы много говорили в предыдущих двух главах, можно рассматривать как энергетическое собственное состояние квантового гармонического осциллятора, описывающее одну из гармоник светового поля.

Отступление 3.10. Классический гармонический осциллятор

На рис. *a* показан простейший гармонический осциллятор — «шарик на пружинке». Когда шарик выводится из положения равновесия $x = 0$, пружина, согласно закону Гука, действует на него с силой $F = -\kappa x$, где κ — коэффициент жесткости пружины. Потенциальная энергия напряжения пружины в этом случае равна $U(x) = \kappa x^2/2$, что соответствует гамильтониану

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{\kappa x^2}{2}. \quad (3.83)$$



Классический гармонический осциллятор: *a* — физическая модель; *b* — движение в фазовом пространстве

Без воздействия внешних сил шарик подчиняется уравнениям движения

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{M}, \quad (3.84a)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\kappa x, \quad (3.84b)$$

что порождает колебания с частотой $\omega = \sqrt{\kappa/M}$:

$$x(t) = x(0) \cos \omega t + \frac{1}{M\omega} p(0) \sin \omega t, \quad (3.85a)$$

$$p(t) = p(0) \cos \omega t - M\omega x(0) \sin \omega t. \quad (3.85b)$$

Это классическое движение осциллятора может быть представлено траекторией в *фазовом пространстве*, заданном импульсом и координатой, как показано в части *b* рисунка. Эта траектория имеет форму эллипса, в котором отношение полуосей имеет вид $p_{\max} = M\omega x_{\max}$.

Упражнение 3.56. Убедитесь, что решение классических уравнений (3.84) движения гармонического осциллятора задается уравнениями (3.85).

3.8.1. Операторы уничтожения и рождения

Потенциал гармонического осциллятора — типичная потенциальная яма. Поэтому его собственные состояния являются связан-

ными и невырожденными (см. упр. 3.46). Волновые функции этих состояний можно найти путем решения стационарного уравнения Шрёдингера (3.60) в координатном базисе. Однако гармонический осциллятор допускает особый, гораздо более элегантный теоретический подход. Чтобы получить его, для начала перемасштабируем наблюдаемые координаты и импульсы и сделаем их более удобными для работы.

Упражнение 3.57. Найдите коэффициенты пропорциональности A и B , такие, что наблюдаемые, определенные как $X = Ax$, $P = Bp$, обладают следующими свойствами:

- В новых переменных (X, P) траектория в фазовом пространстве представляет собой окружность, поэтому уравнения (3.85) приобретают вид:

$$X(t) = X(0)\cos\omega t + P(0)\sin\omega t; \quad (3.86a)$$

$$P(t) = -X(0)\sin\omega t + P(0)\cos\omega t. \quad (3.86b)$$

- Для соответствующих квантовых операторов

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i. \quad (3.87)$$

Покажите, что перемасштабированные наблюдаемые $\hat{X}$ и $\hat{P}$ не имеют размерности.

Ответ:

$$\hat{X} = \hat{x}\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}; \quad \hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{M\omega\hbar}}. \quad (3.88)$$

Будучи непрерывными наблюдаемыми, перемасштабированные собственные состояния координаты и импульса нормированы в соответствии с

$$\langle X | X' \rangle = \delta(X - X'); \quad \langle P | P' \rangle = \delta(P - P'). \quad (3.89)$$

Как мы уже знаем из разд. 3.2, перемасштабирование непрерывных наблюдаемых помимо наложения условий типа (3.89) приводит к перенормированию собственных состояний этих наблюдаемых, а также волновых функций и операторов, выраженных через эти собственные состояния. Посмотрим, как это проявляется в данном случае.

Упражнение 3.58

- а) Покажите, что собственные состояния канонических и перемасштабированных наблюдаемых связаны следующим образом:

$$|X\rangle = \left(\frac{\hbar}{M\omega}\right)^{1/4} |x\rangle; \quad (3.90a)$$

$$|P\rangle = (M\hbar\omega)^{1/4} |p\rangle. \quad (3.90b)$$

Подсказка: воспользуйтесь рассуждениями, приведенными в конце разд. 3.2, где речь шла о взаимосвязи операторов координаты и волнового числа.

б) Покажите, что $\langle X|P\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iPX}$. (3.91)

- в) Если определенное квантовое состояние имеет волновые функции $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ и $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$, то что представляют собой соответствующие волновые функции $\psi(X) = \langle X|\psi\rangle$ и $\tilde{\psi}(P) = \langle P|\psi\rangle$ в перемасштабированных переменных?

- г) Покажите, что соотношения для перевода волновых функций между $\hat{X}$ - и $\hat{P}$ -базисами таковы:

$$\langle X|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle P|\psi\rangle e^{iPX} dP; \quad (3.92)$$

$$\langle P|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle X|\psi\rangle e^{-iPX} dX. \quad (3.93)$$

- е) Покажите, что

$$\langle X|\hat{P}|\psi\rangle = -i \frac{d}{dX} \psi(X); \quad \langle P|\hat{X}|\psi\rangle = i \frac{d}{dP} \psi(P). \quad (3.94)$$

- ф) Покажите, что принцип неопределенности Гейзенберга для перемасштабированных координаты и импульса принимает вид

$$\langle \Delta X^2 \rangle \langle \Delta P^2 \rangle \geq \frac{1}{4}. \quad (3.95)$$

Упражнение 3.59. Выразите гамильтониан (3.83) через перемасштабированные наблюдаемые $\hat{X}$ и $\hat{P}$.

Ответ:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega (\hat{X}^2 + \hat{P}^2). \quad (3.96)$$

Теперь давайте определим и изучим свойства двух операторов, которые, как мы увидим в следующем подразделе, осуществляют переходы между соседними энергетическими собственными состояниями.

Оператор *уничтожения* (annihilation operator) определяется следующим образом:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}); \quad (3.97)$$

Оператор $\hat{a}^\dagger$ называется оператором *рождения* (creation operator).

Упражнение 3.60. Покажите, что:

a) оператор рождения равен

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}); \quad (3.98)$$

b) операторы уничтожения и рождения не являются эрмитовыми;

c) их коммутатор равен

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1; \quad (3.99)$$

d) координата и импульс могут быть выражены как

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger); \quad \hat{P} = \frac{1}{i\sqrt{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger); \quad (3.100)$$

e) перестановочные соотношения для операторов рождения и уничтожения таковы:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = \hat{a}; \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = -\hat{a}^\dagger; \quad (3.101)$$

f) гамильтониан (3.96) может быть записан как

$$\hat{H} = \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.102)$$

3.8.2. Фоковские состояния

Наша следующая цель — найти собственные значения и собственные состояния гамильтониана гармонического осциллятора. Из (3.102) сле-

дует, что они являются также собственными состояниями оператора $\hat{a}^\dagger \hat{a}$. Он называется *оператором числа квантов* (number operator) и обозначается символом $\hat{n}$. Нормированное собственное состояние этого оператора с собственным значением n обозначается $|n\rangle$:

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle \quad (3.103)$$

Упражнение 3.61. Покажите, что:

- а) состояние $\hat{a} |n\rangle$ есть также собственное состояние $\hat{n}$ с собственным значением $n - 1$;
- б) состояние $\hat{a}^\dagger |n\rangle$ есть также собственное состояние $\hat{n}$ с собственным значением $n + 1$.

Подсказка: воспользуйтесь уравнением (3.101).

Из упр. 3.46 мы знаем, что энергетические спектры связанных состояний невырождены, т. е. для каждого значения n существует не более одного собственного состояния энергии $|n\rangle$. Следовательно, из упр. 3.61 мы можем заключить, что состояния $\hat{a} |n\rangle$ и $\hat{a}^\dagger |n\rangle$ пропорциональны состояниям $|n - 1\rangle$ и $|n + 1\rangle$ соответственно. Обратите внимание: я пишу «пропорциональны», а не «равны», поскольку мы не можем гарантировать, что состояния $\hat{a} |n\rangle$ и $\hat{a}^\dagger |n\rangle$ нормированы, тогда как $|n - 1\rangle$ и $|n + 1\rangle$ нормированы по определению. Более того, условие нормированности можно использовать для определения коэффициента пропорциональности.

Упражнение 3.62. Принимая во внимание, что все энергетические собственные состояния должны быть нормированными к 1, покажите, что (с точностью до произвольного фазового множителя):

$$\text{а) } \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n - 1\rangle; \quad (3.104a)$$

$$\text{б) } \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n + 1} |n + 1\rangle. \quad (3.104b)$$

Подсказка: используйте $\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle = n$.

Фазовый множитель, упомянутый в упражнении выше, выбираем мы сами — и можем определить его как угодно. Мы выберем простейший вариант и определим его равным 1, так что выражения (3.104) будут верны в том виде, в каком они здесь записаны.

Уравнение (3.104a) означает, что если состояние $|n\rangle$ с энергией $\hbar\omega(n + 1/2)$ существует как физическое состояние (например, если оно представляет собой некоторый нормированный элемент гильбертова

пространства), то существует и состояние $|n - 1\rangle$ с энергией $\hbar\omega (n - 1/2)$. Подобным образом состояния $|n - 2\rangle$, $|n - 3\rangle$ и т.д. тоже должны существовать. Продолжая эту цепочку достаточно долго, мы придем к энергетическим собственным состояниям с отрицательными значениями энергии. Однако это невозможно, потому что гамильтониан — неотрицательный оператор (упр. А.72, А.87).

Как же разрешить данное противоречие? Единственный способ сделать это — предположить, что n должно быть неотрицательным целым числом, так чтобы цепочка прервалась на $n = 0$. При этом

$$\hat{a}|0\rangle = |\text{zero}\rangle, \quad (3.105)$$

Тогда (при условии, что состояние $|n = 0\rangle$ существует) энергетические собственные состояния существуют только для неотрицательных n и образуют бесконечное множество с соответствующими собственными значениями энергии $\hbar\omega (n + 1/2)$.

Энергетические собственные состояния гармонического осциллятора называются *состояниями Фока*, или *числовыми*. Состояние $|0\rangle$ называется *вакуумным состоянием*¹.

Упражнение 3.63. Выразите $|n\rangle$ через $|0\rangle$.

Ответ:

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad (3.106)$$

Упражнение 3.64. Вычислите волновые функции вакуумного состояния в координатном и импульсном представлениях.

Подсказка: используйте уравнения (3.94), (3.97) и (3.105).

Ответ:

$$\psi_0(X) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-X^2/2}; \quad (3.107a)$$

$$\tilde{\psi}_0(P) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-P^2/2}. \quad (3.107b)$$

¹ Подчеркну разницу между векторами $|0\rangle$ и $|\text{zero}\rangle$ (см. определение А.1). Вектор $|\text{zero}\rangle$ есть нулевой вектор гильбертова пространства, такой что для любого вектора $|\psi\rangle$ мы имеем $|\psi\rangle + |\text{zero}\rangle = |\psi\rangle$. Его норма равна $\langle \text{zero} | \text{zero} \rangle = 0$, поэтому данный вектор не представляет никакого физического квантового состояния. Вакуумное состояние $|0\rangle$, напротив, есть физическое состояние: $\langle 0 | 0 \rangle = 1$ и $|\psi\rangle + |0\rangle \neq |\psi\rangle$.

Можно видеть, что как координата, так и импульс в вакуумном состоянии неопределенны. Это значит, что если мы приготовим наш «шарик на пружинке» в состоянии минимальной возможной энергии, а затем измерим его координату, то обнаружим отклонение от положения равновесия на случайную микроскопическую величину. Аналогично, если мы измерим его скорость, то обнаружим, что она микроскопически мала, но не равна нулю. Это квантовое явление известно как *нулевые колебания* (zero-point oscillations).

Приведенные выше волновые функции единственны с точностью до произвольного общего фазового множителя. Для вакуумного состояния мы по соглашению выбираем этот множитель так, чтобы получить действительную и положительно определенную волновую функцию в координатном базисе. Из этого автоматически следует, что волновая функция в импульсном базисе также действительна и положительна. Более того, как мы увидим далее, данное соглашение гарантирует, что волновые функции всех остальных фоковских состояний также действительны.

Найдя в явном виде волновую функцию вакуумного состояния, мы доказали ее существование и единственность — и, таким образом, автоматически доказали существование и единственность всех остальных фоковских состояний, ибо они получаются из вакуумного состояния при применении к нему оператора рождения.

Упражнение 3.65

- а) Используя уравнение (3.106), вычислите волновые функции фоковских состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$.

Ответ:

$$\psi_1(X) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} X e^{-X^2/2}; \quad (3.108)$$

$$\psi_2(X) = \frac{1}{\sqrt{2}\pi^{1/4}} (2X^2 - 1) e^{-X^2/2}. \quad (3.109)$$

- б) * Покажите, что волновая функция произвольного фоковского состояния $|n\rangle$ задана выражением

$$\psi_n(X) = \frac{H_n(X)}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} e^{-X^2/2}, \quad (3.110)$$

где $H_n(X)$ — эрмитовы полиномы

$$H_n(X) = \left(2X - \frac{d}{dX} \right)^n 1. \quad (3.111)$$

Особенностью гамильтониана гармонического осциллятора является то, что его энергетические уровни не только квантуются, но и эквидистантны. Расстояние $\hbar\omega$ между уровнями называется *квантом* энергии. Физически эквидистантная энергетическая структура означает, что, закачивая в гармонический осциллятор кванты одной и той же частоты, можно возбудить его до сколь угодно высокой энергии. Например, качели можно раскачать до любой желаемой амплитуды, подтягивая и подталкивая их с постоянной частотой; можно также усилить импульс лазера до любой желаемой мощности. Противоположный пример — атом: при помощи резонансного лазера его можно перевести из основного состояния в одно из собственных состояний с более высокой энергией, но увеличение мощности лазера едва ли поможет нам возбудить этот атом на более высокий энергетический уровень¹.

Кванты энергии часто интерпретируют как частицы, особенно в контексте обобщений гармонического осциллятора, упомянутых в начале этого раздела. Например, *фотон* есть квант энергии в оптическом импульсе (см. отступление 3.11), а *фонон* — квант энергии механических колебаний атомов в твердом теле.

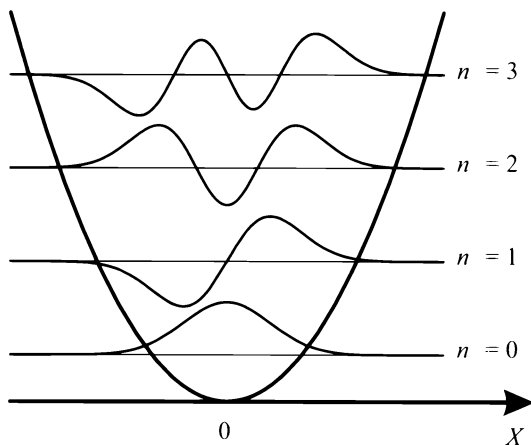


Рис. 3.9. Волновые функции нескольких низколежащих уровней энергии гармонического осциллятора

¹ Эти утверждения верны в некоторых пределах, поскольку физические модели гармонического осциллятора или двухуровневой системы могут не выдержать слишком сильного возбуждения. Так случается, к примеру, если качели взлетают слишком высоко, они выходят за рамки приближения маятника с ее допущением о малости угла. А электрическое поле в импульсе лазера может быть настолько мощным, что атом ионизуется.

Отступление 3.11. Что такое фотон?

В предыдущих двух главах мы обращались с фотоном как с *частицей* и обсуждали квантовые состояния, в которых он может быть обнаружен. Теперь же мы говорим, что фотон — это *состояние* моды электромагнитного гармонического осциллятора. Как можно примирить между собой эти точки зрения?

Упомянутые два подхода известны как *первичное квантование* и *вторичное квантование* (first/second quantization) соответственно. При первичном квантовании мы связываем с каждой частицей некоторое гильбертово пространство; элементы (векторы) этого пространства представляют собой различные состояния, в которых может находиться данная частица. Например, для единичного фотона гильбертово пространство образуют различные состояния поляризации.

При вторичном квантовании роли векторов состояния и гильбертовых пространств меняются. То, что мы называем базисом гильбертова пространства первичного квантования, при вторичном квантовании рассматривается как множество отдельных гильбертовых пространств. В частности, вертикальная и горизонтальная поляризационные моды рассматриваются как отдельные гильбертовы пространства. Фотон в состоянии $|H\rangle$ в первичном квантовании записывается во вторичном как вектор состояния $|1\rangle_H \otimes |0\rangle_V$. Фотон в состоянии $|+45^\circ\rangle$ становится запутанным состоянием

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle_H \otimes |0\rangle_V + |0\rangle_H \otimes |1\rangle_V).$$

Как альтернативный вариант мы можем выбрать в качестве гильбертовых пространств два диагональных типа поляризации; в этом случае диагонально поляризованный фотон представляет собой разделимое состояние, тогда как горизонтально поляризованный — запутанное.

Таким образом, аппарат первичного квантования более компактен и удобен, когда *a priori* знаем, что имеем дело ровно с одной частицей. В случае множества идентичных частиц первичное квантование порождает сложности. Предположим, например, что у нас имеются два фотона с ортогональными поляризациями. В рамках вторичного квантования в нашем распоряжении один-единственный способ записать это состояние: $|1\rangle_H \otimes |1\rangle_V$. Если же мы пользуемся первичным квантованием, мы можем записать это состояние — один и тот же физический объект — двумя возможными способами: $|H\rangle \otimes |V\rangle$ или $|V\rangle \otimes |H\rangle$, или в виде любой линейной их комбинации. Чтобы исключить такую неоднозначность, нужно вводить дополнительные правила, например, о том, какой вектор состояния может считаться физическим в зависимости от того, является ли частица фермионом или бозоном.

Подводя итог, скажем, что, хотя оба подхода имеют право на существование и могут использоваться для работы с физическими явлениями, один из них может оказаться более практичным в зависимости от задачи, которую мы пытаемся решить.

Полезно сравнить волновые функции фоковских состояний с волновыми функциями энергетических собственных состояний конечной потенциальной ямы (см. рис. 3.2). В обоих случаях они проявляют осциллирующее поведение внутри ямы и экспоненциально убывают вне ее. Число пересечений оси абсцисс равно номеру энергетического уровня. Разница в том, что энергетические уровни эквидистантны для гармонического осциллятора, но не для прямоугольной

ямы. Далее, каждая собственная волновая функция ямы определяется кусочно [см. (3.66) и (3.67)], тогда как для потенциала гармонического осциллятора она представляет собой единую элементарную функцию.

Упражнение 3.66. Вычислите матрицы операторов координаты и импульса в фоковском базисе.

Подсказка: вместо того чтобы интегрировать волновые функции, удобнее воспользоваться уравнениями (3.100) и (3.104).

Упражнение 3.67. Для произвольного $|n\rangle$ вычислите $\langle X \rangle$, $\langle \Delta X^2 \rangle$, $\langle P \rangle$, $\langle \Delta P^2 \rangle$ и проверьте принцип неопределенности.

Ответ:

$$\langle \hat{X} \rangle = \langle \hat{P} \rangle = 0; \quad (3.112)$$

$$\langle \Delta X^2 \rangle = \langle \Delta P^2 \rangle = \frac{1}{2}(2n+1). \quad (3.113)$$

Мы видим, что произведение неопределенностей координаты и импульса увеличивается с ростом энергии. Вакуумное состояние — единственное фоковское состояние, для которого это произведение достигает минимума (3.95).

Упражнение 3.68. Рассмотрим шрёдингерову эволюцию $|\psi(t)\rangle$ произвольного состояния $|\psi(0)\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle$ под действием гамильтониана гармонического осциллятора. Выведите следующее поведение средних значений оператора в зависимости от времени:

$$a) \quad \langle \hat{a} \rangle(t) = \langle \hat{a} \rangle(0) e^{-i\omega t}; \quad (3.114a)$$

$$\langle \hat{a}^\dagger \rangle(t) = \langle \hat{a}^\dagger \rangle(0) e^{i\omega t}; \quad (3.114b)$$

$$b) \quad \langle X \rangle(t) = \langle X \rangle(0) \cos \omega t + \langle P \rangle(0) \sin \omega t; \quad (3.115a)$$

$$\langle P \rangle(t) = -\langle X \rangle(0) \sin \omega t + \langle P \rangle(0) \cos \omega t. \quad (3.115b)$$

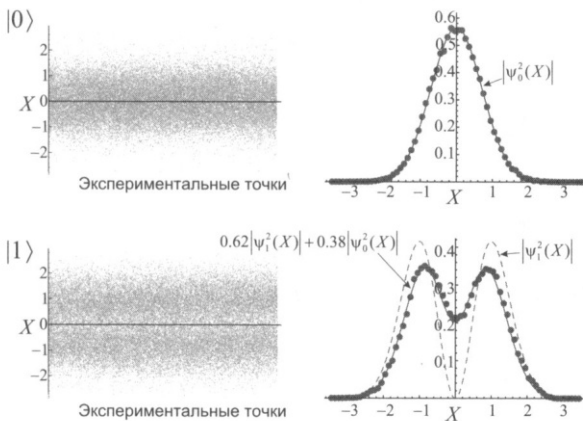
Сами фоковские состояния стационарны, так что средние значения координаты и импульса у них не меняются во времени. В этом смысле они чрезвычайно неклассичны и не стыкуются с привычным нам представлением о том, что шарик на пружинке должен колебаться (если не находится в покое, т.е. в состоянии с минимальной энергией). А во всех других состояниях средние значения координаты и импульса действительно меняются. Примечательно, что в *любом*

Отступление 3.12. Измерение координаты гармонического осциллятора: эксперимент

В то время, когда ведется работа над этой рукописью, физикам еще не удается готовить и измерять произвольные квантовые состояния механических гармонических осцилляторов. Они гораздо лучше справляются с их оптической реализацией. В частности, исследователи могут приготовить некоторые из низких числовых состояний и их суперпозиций с высокой степенью достоверности.

В оптической реализации гармонического осциллятора координата и импульс соответствуют абсолютным величинам электрического поля в электромагнитной волне в определенных фазах. Фазочувствительные измерения электромагнитного поля выполняются с использованием так называемого *оптического гомодинного детектора* (optical homodyne detector). Я не буду подробно описывать эту технологию, но ее можно найти во многих учебниках по квантовой оптике.

На представленном здесь рисунке показаны экспериментальные данные множества измерений координаты в вакуумном состоянии (вверху) и однофотонном состоянии (внизу) оптической волны. Вакуумное состояние получается простым блокированием света; объявленный единичный фотон готовится с использованием параметрического рассеяния (отступление 1.6). Теоретически можно было бы ожидать, что гистограммы (справа) необработанных экспериментальных данных (слева) должны соответствовать плотностям вероятности $p_{0,1} = |\psi_{0,1}(X)|^2$, где волновые функции $\psi_{0,1}(X)$ задаются уравнениями (3.107а) и (3.108) соответственно.



Данные взяты из A. I. Lvovsky and S. A. Babichev, *Synthesis and tomographic characterization of the displaced Fock state of light*, Physical Review A **66**, 011801 (2002).

Мы можем видеть, что если для вакуумного состояния теория и эксперимент согласуются почти идеально, то данные для однофотонного состояния лучше всего соотносятся со смешанным состоянием единичного фотона с вероятностью 0,62 и вакуума с вероятностью 0,38. Дело в том, что создать идеальное однофотонное состояние невозможно. Достоверность наблюдаемого нами состояния неизбежно снижается из-за потерь на оптическом пути, неидеальной эффективности регистрации и других причин.

квантовом состоянии они эволюционируют точно так же, как координата и импульс классического гармонического осциллятора [см. (3.86)]. Мы обобщим это наблюдение в разд. 3.9.

3.8.3. Когерентные состояния

Когерентное состояние является наиболее точным приближением классического гармонического колебательного движения. Мы уже видели, что средние значения координаты и импульса в любом квантовом состоянии (кроме фоковских) ведут себя во времени точно так же, как и у классического шарика на пружинке. Особенность когерентного состояния в том, что в то время, как амплитуда таких колебаний может быть сколь угодно высокой, неопределенности координаты и импульса остаются такими же низкими, как в вакуумном состоянии. Из-за поведения, схожего с классическим, когерентные состояния часто наблюдаются в природе, причем не только в механике, но и в других «воплощениях» гармонического осциллятора, таких как световое поле в лазерном импульсе.

Когерентное состояние (состояние Глаубера) $|\alpha\rangle$ есть собственное состояние оператора уничтожения с собственным значением α :

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (3.116)$$

Поскольку $\hat{a}$ — не эрмитов оператор, его собственное значение α может быть комплексным. Абсолютная величина $|\alpha|$ этого оператора называется *амплитудой*, а комплексный аргумент $\text{Arg } \alpha$ — *когерентной фазой* нашего когерентного состояния.

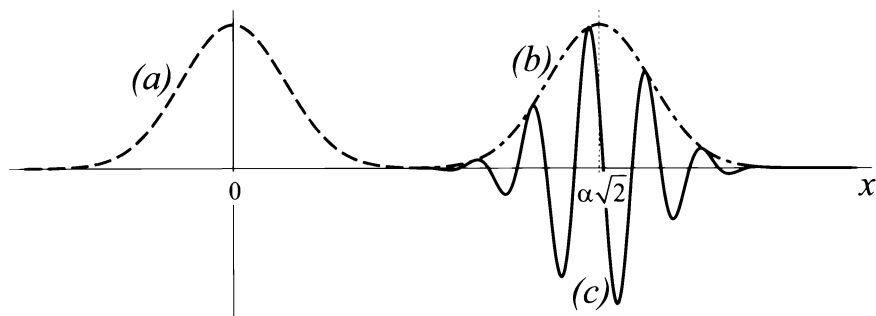


Рис. 3.10. Волновые функции когерентных состояний: a — с амплитудой $\alpha = 0$ (вакуумное состояние); b — с амплитудой $\alpha = 5$; c — с амплитудой $\alpha = 5 + 4i$ (действительная часть)

Мы начнем изучение когерентного состояния с его волновой функции. Она может быть определена путем решения (3.116) как дифференциального уравнения в координатном базисе, аналогично упр. 3.64. Во избежание этих довольно утомительных расчетов в следующем упражнении я просто сразу выпишу ответ и попрошу вас его проверить. Альтернативный способ расчета волновой функции когерентного состояния мы разберем в разд. 3.10.

Упражнение 3.69. Для когерентного состояния $|\alpha\rangle$ покажите, что его волновые функции в координатном и импульсном базисах задаются так:

$$\psi_{\alpha}(X) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-i\frac{P_{\alpha}X_{\alpha}}{2}} e^{iP_{\alpha}X} e^{-\frac{(X-X_{\alpha})^2}{2}}; \quad (3.117a)$$

$$\tilde{\psi}_{\alpha}(P) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{i\frac{P_{\alpha}X_{\alpha}}{2}} e^{-iX_{\alpha}P} e^{-\frac{(P-P_{\alpha})^2}{2}}, \quad (3.117b)$$

где

$$X_{\alpha} = \sqrt{2}\text{Re}\alpha; \quad P_{\alpha} = \sqrt{2}\text{Im}\alpha. \quad (3.118)$$

Убедитесь, что эти волновые функции нормированы. Покажите, что математические ожидания и дисперсии координаты и импульса в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$ равны

$$\langle X \rangle = X_{\alpha}, \quad \langle P \rangle = P_{\alpha} \quad (3.119)$$

$$\text{и } \langle \Delta X^2 \rangle = \langle \Delta P^2 \rangle = 1/2, \quad (3.120)$$

соответственно.

Волновая функция когерентного состояния представляет собой гауссов волновой пакет. Для $\alpha = 0$ когерентное состояние становится вакуумным, что очевидно из сравнения уравнений (3.105) и (3.116) (рис. 3.10 а). Для действительного α форма волновой функции идентична ее форме для вакуумного состояния, сдвинутой на $\alpha\sqrt{2}$ вдоль оси x (рис. 3.10 б). Для комплексного α этот гауссов волновой пакет — из-за ненулевого среднего значения импульса — умножается на линейно изменяющийся фазовый множитель (рис. 3.10 с), аналогично упр. 3.25.

Мы видим, что для любого комплексного α существует когерентное состояние и что каждое такое состояние нормируется согласно $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$. Может показаться, что это противоречит нашим недавним рассуждениям о необходимости нормировать собственные состояния непрерывных квантовых наблюдаемых через дельта-функцию Дирака, как в уравнениях (3.1). Причина, по которой это правило не применимо к когерентным состояниям, состоит в том, что оператор уничтожения — не эрмитово наблюдаемое. По этой же причине когерентные состояния, связанные с различными значениями α , не ортогональны (см. упр. 3.75).

В соответствии с уравнением (3.120) любое когерентное состояние имеет аналогично вакуумному минимально возможную неопределенность координаты — импульса (3.95).

В фазовом пространстве когерентное состояние можно изобразить в виде окружности с центром в точке $(\langle X \rangle = \sqrt{2} \operatorname{Re} \alpha, \langle P \rangle = \sqrt{2} \operatorname{Im} \alpha)$ (рис. 3.11). Радиус этой окружности, $1/\sqrt{2}$, символически представляет стандартные отклонения координаты и импульса, которые не зависят от когерентной амплитуды¹.

Глобальные фазовые множители $e^{+iP_\alpha X_\alpha/2}$ включены в уравнения (3.117a) и (3.117b) по соглашению. Эти множители делают эти два уравнения (которые получаются друг из друга путем прямого или обратного преобразования Фурье) визуально похожими. Кроме того, такое соглашение необходимо для совместимости с другим фазовым соглашением, которое мы введем ниже для разложения когерентного состояния в базисе Фока.

Подчеркну роль фазы $\operatorname{Arg} \alpha$ когерентного состояния. Эта фаза представляет собой угол радиус-вектора, указывающего на $(\langle X \rangle, \langle P \rangle)$, как изображено на рис. 3.11, и, таким образом, непосредственно связана с измеримыми параметрами данного состояния. Этим она отличается от глобального квантового фазового множителя, который, как мы уже несколько раз говорили, не влияет на физические свойства состояния.

Теперь найдем шрёдингерову эволюцию когерентного состояния во времени. С этой целью мы сначала разложим его в энергетическом собственном базисе.

¹ На самом деле эта окружность имеет не только символическое значение. Поведение неопределенностей в фазовом пространстве описывается так называемой функцией Вигнера, которая является аналогом классической плотности вероятности в фазовом пространстве.

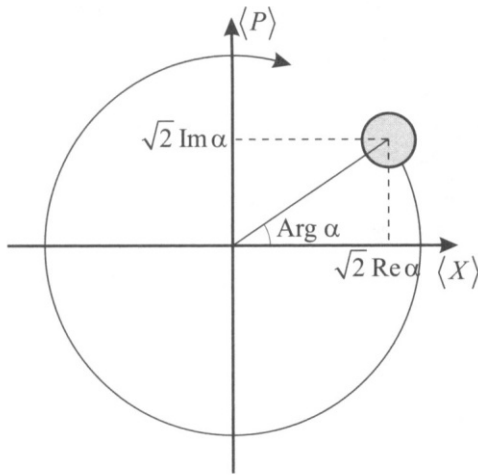


Рис. 3.11. Портрет в фазовом пространстве и эволюция наблюдаемых координаты и импульса в когерентном состоянии

Упражнение 3.70. Найдите разложение когерентного состояния $|\alpha\rangle$ в фоковском базисе.

Подсказка: возьмите некоторое разложение

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n |n\rangle \quad (3.121)$$

и примените к нему определение (3.116) когерентного состояния.

Ответ: с точностью до общего фазового множителя

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (3.122)$$

Здесь мы опять вводим соглашение об общей фазе, согласно которому общий фазовый множитель в уравнении (3.122) равен единице; т.е. мы объявляем $\langle n|\alpha\rangle$ действительным для действительного α . Теперь нужно проверить, согласуется ли эта договоренность с той, что выбрана для фазы волновой функции когерентного состояния (3.117а).

Упражнение 3.71. Вычислите скалярное произведение $\langle 0|\alpha\rangle$ для произвольного α в координатном и фоковском базисах. Убедитесь, что результаты одинаковы.

Если измерить энергию когерентного состояния, то вероятности возможных результатов распределятся в соответствии с

$$p_{r_n} = \left| \langle n | \alpha \rangle \right|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}. \quad (3.123)$$

Разумеется, это знаменитое распределение Пуассона (см. разд. Б.3). Из его свойств (упр. Б.15) мы видим, что и среднее значение, и дисперсия фоковского числа в когерентном состоянии равны

$$\langle n \rangle = \langle \Delta n^2 \rangle = |\alpha|^2. \quad (3.124)$$

Это означает, например, что в последовательности лазерных импульсов с n фотонами в среднем на импульс среднеквадратичная неопределенность числа фотонов в импульсе равна $\sqrt{n}$.

На самом деле нам совершенно необязательно знать свойства распределения Пуассона, чтобы получить последний результат. Он следует непосредственно из определения когерентного состояния.

Упражнение 3.72. Вычислите среднее значение и дисперсию оператора гамильтониана (3.102) в когерентном состоянии, пользуясь свойствами операторов рождения и уничтожения, и убедитесь, что ваш результат согласуется с (3.124).

Упражнение 3.73. Покажите, что действие оператора эволюции $\exp(i\hat{H}t/\hbar)$ на состояние $|\alpha\rangle$ задается формулой

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\alpha\rangle = e^{-i\omega t/2} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle. \quad (3.125)$$

Упражнение 3.74. Вычислите квантовые средние значения:

- операторов рождения и уничтожения;
- операторов координаты и импульса
в когерентном состоянии в зависимости от времени, используя (3.119) и (3.125). Убедитесь, что ваши результаты согласуются с (3.114) и (3.115).

Результат упр. 3.73 весьма замечателен. Если не принимать во внимание нефизичный квантовый фазовый множитель, когерентное состояние эволюционирует в другое когерентное состояние с той же амплитудой, но иной когерентной фазой, как показано на рис. 3.11. Это означает,

что неопределенности координаты и импульса остаются постоянными и равны соответствующим величинам вакуумного состояния.

Данный результат вновь иллюстрирует разницу между квантовой и когерентной фазами. *Квантовый* фазовый множитель $e^{-i\omega t/2}$, стоящий вне символа «кет» в уравнении (3.125), не имеет физического эквивалента. *Когерентная* же фаза $e^{-i\omega t}$, имеющая наблюдаемый физический смысл, располагается внутри скобок.

Наконец, упр. 3.73 выявляет классическую аналогию когерентных состояний с большой амплитудой. Если амплитуда когерентного состояния макроскопична, то относительные неопределенности пренебрежимо малы, так что когерентное состояние хорошо аппроксимируется классическими колебаниями. Напротив, для микроскопических амплитуд неопределенности играют значительную роль, и классическое приближение не годится.

Упражнение 3.75. Покажите, что $\langle \alpha | \alpha' \rangle = e^{-|\alpha|^2/2 - |\alpha'|^2/2 + \alpha' \alpha^*}$.

Этот результат позволяет еще раз вспомнить уже сказанное, а именно — когерентные состояния, связанные с разными значениями α , не ортонормальны. Поскольку оператор уничтожения не является эрмитовым, спектральная теорема (упр. А.60), которая гласит, что множество собственных состояний эрмитова оператора представляет собой ортонормальный базис, к нему не применима. Когерентные состояния образуют остоный набор, но не являются ортогональными.

Упражнение 3.76. Когерентные состояния суть собственные состояния оператора уничтожения. Существуют ли их аналоги — собственные состояния оператора рождения — и если да, то каково их разложение в фоковском базисе?

3.9. Представление Гейзенберга

Нам уже не раз встречались случаи, в которых квантовая механика предсказывала поведение, ожидаемое классически. Примеры таких ситуаций — эволюция средних значений координаты и импульса в свободном пространстве или в потенциальном поле гармонического осциллятора. Подобные наблюдения, в принципе, неудивительны, поскольку мы знаем, что классическая картина соответствует макроскопическому пределу квантовой. Но в то же время теоретические

и математические методы этих двух подходов настолько различны, что, даже когда они действительно приводят к сходным результатам, разобраться, что за этим сходством стоит, бывает трудно.

Если мы попытаемся примирить упомянутые два подхода и найти для них общую интуитивно понятную основу, то одним из препятствий, с которыми мы неизбежно столкнемся, станет вопрос о том, как классическая и квантовая физика работают с эволюцией во времени. В классической картине эволюционируют наблюдаемые: например, координата движущейся частицы. В квантовом мире, напротив, наблюдаемые — такие как оператор координаты $\hat{x}$ — постоянны; эволюцию же связывают с состоянием системы $|\psi(t)\rangle$. В этом разделе мы попробуем сделать связь между двумя мирами более прозрачной, для чего разберем альтернативный аппарат квантовой теории, в которой состояния постоянны, а эволюционируют наблюдаемые.

3.9.1. Эволюция оператора

Предположим, нам нужно найти среднее значение некоторого наблюдаемого $\hat{A}$ в квантовом состоянии $|\psi\rangle$, которое эволюционирует под действием гамильтониана $\hat{H}$. Обычный подход (разд. 1.10) предписывает вычислять эволюцию интересующего нас состояния согласно $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$, где $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ — унитарный оператор эволюции¹. Тогда квантовое среднее значение равно



Вернер Гейзенберг

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle. \quad (3.126)$$

Этот подход известен как *представление Шрёдингера* квантовой эволюции. Альтернативой ему является *представление Гейзенберга*, согласно которому считается, что операторы эволюционируют в соответствии с

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}(0) \hat{U}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{A}(0) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \quad (3.127)$$

тогда как все квантовые состояния остаются неизменными: $|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle$. В таком случае среднее значение $\hat{A}$ равно

$$\langle A \rangle = \langle \psi(0) | \hat{A}(t) | \psi(0) \rangle. \quad (3.128)$$

¹ В данном разделе мы считаем, что гамильтониан явно не зависит от времени.

Предполагается, что в момент времени $t = 0$ состояния и операторы в обоих представлениях одинаковы.

Упражнение 3.77. Покажите, что квантовые средние значения оператора, рассчитанные в представлениях Шрёдингера и Гейзенберга [(3.126) и (3.128) соответственно], одинаковы.

Упражнение 3.78. Для представления Гейзенберга покажите, что эволюция оператора может быть записана в виде (иногда называемом *уравнением Гейзенберга*)

$$\frac{d}{dt} \hat{A}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}(t)]. \quad (3.129)$$

Чтобы понять, как представление Гейзенберга помогает примирить классический и квантовый подходы, рассмотрим пример.

Упражнение 3.79. Напишите уравнения движения Гейзенберга (3.129) для координаты и импульса гармонического осциллятора, принимая гамильтониан равным (3.83).

Ответ:

$$\frac{d}{dt} \hat{x} = \frac{\hat{p}}{M}; \quad (3.130a)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{p} = -\kappa \hat{x}. \quad (3.130b)$$

Мы видим — и это весьма примечательно, — что эволюция наблюдаемых координаты и импульса гармонического осциллятора в представлении Гейзенберга идентична классической (отступление 3.10). Действительно, уравнение (3.130a) суть определение импульса как произведения массы и скорости, тогда как уравнение (3.130b) есть второй закон движения Ньютона, поскольку сила пружины составляет $F = -\kappa x$.

Соответственно эквивалентны классическим и решения этих уравнений, помимо крышечек над обозначениями наблюдаемых:

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0) \cos \omega t + \frac{1}{M\omega} \hat{p}(0) \sin \omega t; \quad (3.131a)$$

$$\hat{p}(t) = \hat{p}(0) \cos \omega t - \kappa \hat{x}(0) \sin \omega t. \quad (3.131b)$$

Данная аналогия квантового и классического может показаться чисто формальной, так как можно сказать, что координата и импульс в приведенных выше уравнениях — это операторы, абстрактные понятия линейной алгебры. Но в действительности между тем и другим существует непосредственная практическая связь. Чтобы ее увидеть, мы можем «вложить» обе части уравнений (3.131) между символами $\langle \psi |$ и $| \psi \rangle$, связанными с произвольным квантовым состоянием. Тогда эти уравнения принимают вид

$$\langle x(t) \rangle = \langle x(0) \rangle \cos \omega t + \frac{1}{M\omega} \langle p(0) \rangle \sin \omega t ; \quad (3.132a)$$

$$\langle p(t) \rangle = \langle p(0) \rangle \cos \omega t - \frac{\kappa}{\omega} \langle x(0) \rangle \sin \omega t . \quad (3.132b)$$

Теперь вместо абстрактных операторов у нас есть измеряемые физические величины: средняя координата и средний импульс — и они действительно ведут себя идентично своим классическим аналогам в любом квантовом состоянии. Этот факт воспроизводит наш более ранний результат (3.115), полученный с использованием представления Шрёдингера.

Является ли такая согласованность с классическим поведением уникальным свойством гармонического осциллятора или общим свойством всех механических систем? Приведу простой аргумент в пользу последнего.

Упражнение 3.80. Для шрёдингеровой эволюции состояния точечной частицы под действием гамильтониана (3.55) покажите, что

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}}{M} ; \quad (3.133a)$$

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = -V'(\hat{x}) , \quad (3.133b)$$

где штрих обозначает производную.

Подсказка: разложите $V(x)$ в степенной ряд.

Уравнение (3.133b) опять же соответствует второму закону Ньютона, потому что в классической механике потенциальная энергия консервативной силы связана с самой этой силой согласно выражению¹

¹ Мы ограничиваемся одномерным движением.

$$F(x) = -V'(x). \quad (3.134)$$

Соотношения (3.133) можно сделать более удобными, если взять средние значения координаты и импульса частицы в произвольном состоянии. Тогда они примут вид

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{M}; \quad (3.135a)$$

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\langle \psi | V'(\hat{x}) | \psi \rangle = -\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) V'(x) \psi^*(x) dx. \quad (3.135b)$$

Данные соотношения получили известность как *теорема Эренфеста*. Важно, что она имеет дело с математическими ожиданиями наблюдаемых, а не непосредственно с состояниями или операторами. А поскольку эти математические ожидания одинаковы в обоих представлениях — и Шрёдингера, и Гейзенберга (упр. 3.77), — теорема Эренфеста тоже верна в обоих представлениях.

Замечу еще, что, как мы знаем из механики, классический вид уравнений (3.133) является частным случаем гамильтоновых уравнений движения:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}; \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}. \quad (3.136)$$

В квантовом мире эти уравнения заменяются на уравнение Гейзенберга.

Таким образом, представление Гейзенберга «выводит на чистую воду» соотношение между квантовой и ньютоновой механикой. Однако за это приходится платить потерей связи между наблюдаемым и его собственными состояниями. Рассмотрим, например, эволюцию гармонического осциллятора (3.131) на одной четверти периода колебаний. Обозначив этот период времени как t_0 (так что $\omega t_0 = \pi/2$), находим $\hat{x}(t_0) = \hat{p}(0) / M\omega$. Полученный результат несложно интерпретировать классически: координата маятника после одной четверти его периода определяется исключительно его начальной скоростью. Но в квантовой механике, где наблюдаемые связаны с операторами, тот факт, что оператор координаты в определенный момент $t = t_0$ становится пропорциональным оператору импульса в момент $t = 0$, принять намного сложнее. И действительно, мы определили оператор координаты как интеграл (3.11) по собственным состояниям координаты. Но его эволюция к моменту времени $t = t_0$ в оператор импульса означает, что он уже не описывается таким интегралом.

Сама природа оператора координаты изменяется со временем, по мере того как он приобретает другой набор собственных состояний. Более того, оператор координаты в разные моменты времени даже не коммутирует сам с собой:

$$[\hat{x}(0), \hat{x}(t_0)] = \frac{1}{M\omega} [\hat{x}(0), \hat{p}(0)] = \frac{i\hbar}{M\omega}.$$

Эволюция наблюдаемых становится еще менее интуитивно понятной, когда мы имеем дело с взаимодействием различных квантовых систем. Может случиться, к примеру, так, что координата одной частицы в некоторый момент времени становится импульсом другой частицы в другой момент. Или, если мы имеем дело со взаимодействием между светом и атомом, оператор электрического поля, связанный с электромагнитной волной, превращается в оператор, определяющий переход между атомными уровнями. Короче говоря, применяя представление Гейзенберга к решению квантовых задач, с непривычки легко запутаться.

Подолью еще масла в огонь путаницы, обратив ваше внимание на следующее. Гамильтониан (3.55) использует операторы $\hat{x}$ и $\hat{p}$, которые по физической природе представляют собой, соответственно, координату и импульс. Но, как мы обнаружили, природа этих операторов в представлении Гейзенберга меняется со временем. Поэтому, на первый взгляд, уравнение (3.55) представляет верный гамильтониан только в момент времени $t = 0$, и, следовательно, уравнение следует переписать как

$$\hat{H} = V(\hat{x}(0)) + \frac{\hat{p}(0)^2}{2M}. \quad (3.137)$$

Но тогда уравнение Гейзенберга (3.129) должно содержать коммутатор между гамильтонианом, который является функцией $\hat{x}(0)$ и $\hat{p}(0)$, и наблюдаемым $\hat{A}(t)$, которое является функцией $\hat{x}(t)$ или $\hat{p}(t)$. То есть мы вычисляем коммутатор между операторами, связанными с разными моментами времени. Но мы, выполняя упражнения выше, об этом не думали, а просто писали $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Не было ли это ошибкой?

Упражнение 3.81. Покажите, что гамильтониан не эволюционирует во времени¹, т. е. $\hat{H}(t) = \hat{H}(0)$.

¹ Тот факт, что гамильтониан, если он не зависит явно от времени, в представлении Гейзенберга не эволюционирует, можно рассматривать как квантовый аналог классического закона сохранения энергии.

Упражнение 3.82. Покажите, что гамильтониан (3.137) можно переписать как

$$\hat{H} = V(\hat{x}(t)) + \frac{\hat{p}(t)^2}{2M}, \quad (3.138)$$

где t есть произвольный момент времени, а операторы $\hat{x}(t)$ и $\hat{p}(t)$ получены из уравнения (3.127).

Подсказка: используйте разложение функции $V(\hat{x})$ в степенной ряд.

Замечательным образом мы обнаруживаем, что, хотя сами наблюдаемые координаты и импульсы эволюционируют во времени, их функция, заданная правой стороной уравнения (3.138), остается постоянной. А значит, оба компонента коммутатора в уравнении (3.129) могут быть связаны с одним и тем же временем t ; таким образом разрешается наше беспокойство.

Данное наблюдение можно обобщить.

Упражнение 3.83. Рассмотрим некоторый оператор $\hat{B}$, который в момент времени $t = 0$ представляет собой функцию операторов $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_m$:

$$\hat{B}(0) = f((\hat{A}_1(0), \dots, \hat{A}_m(0))). \quad (3.139)$$

При помощи разложения этой функции в степенной ряд покажите, что приведенное соотношение сохраняется в произвольный момент времени t , т. е.

$$\hat{B}(t) = f(\hat{A}_1(t), \dots, \hat{A}_m(t)). \quad (3.140)$$

Мы видим, что эволюция в представлении Гейзенберга сохраняет любые функциональные взаимоотношения между операторами, существовавшие до этой эволюции. Одно из следствий данного результата состоит в том, что зависимость гамильтониана от координаты и импульса в разные моменты времени имеет один и тот же вид [см. уравнения (3.137) и (3.138)]. Еще один показательный пример дается в следующем упражнении.

Упражнение 3.84. Покажите, что эволюция во времени операторов координаты и импульса в представлении Гейзенберга не изменяет их коммутатор:

$$[\hat{x}(t), \hat{p}(t)] = i\hbar. \quad (3.141)$$

Упражнение 3.85. Подставьте решение (3.131) в гамильтониан (3.83) и убедитесь явно, что правые стороны уравнений (3.137) и (3.138) одинаковы.

3.9.2. Оператор смещения

В этом разделе мы подробно изучим пример гамильтониана, с которым можно работать как в представлении Шрёдингера, так и в представлении Гейзенберга.

Упражнение 3.86. Решите уравнение Гейзенберга для гамильтониана

$$\hat{H} = \beta \hat{p}, \quad (3.142)$$

где β — действительная постоянная, и покажите, что эволюция операторов координаты и импульса за время t_0 задается

$$\hat{x}(t_0) = \hat{x}(0) + x_0; \quad (3.143a)$$

$$\hat{p}(t_0) = \hat{p}(0), \quad (3.143b)$$

где

$$x_0 = \beta t_0. \quad (3.144)$$

Мы видим, что эволюция под действием гамильтониана (3.142) ведет к смещению оператора координаты на x_0 . Соответственно, оператор эволюции

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{p} x_0} \equiv \hat{D}_x(x_0) \quad (3.145)$$

называется *оператором смещения координаты*. Изучим его действие в представлении Шрёдингера.

Упражнение 3.87. Покажите, что оператор смещения унитарен и $\hat{D}_x^\dagger(x) = \hat{D}_x^{-1}(x) = \hat{D}_x(-x)$.

Упражнение 3.88. Используя представление Шрёдингера, покажите, что:

$$a) \hat{D}_x(x_0)|x\rangle = |x+x_0\rangle; \quad (3.146)$$

b) если волновая функция состояния $|\psi\rangle$ в координатном базисе есть $\psi(x)$, то волновая функция состояния $\hat{D}_x(x_0)|\psi\rangle$ есть $\psi(x-x_0)$ (рис. 3.12)¹;

$$c) \hat{D}_x(x_0)|p\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}x_0p}|p\rangle; \quad (3.147)$$

d) если волновая функция состояния $|\psi\rangle$ в импульсном базисе есть $\tilde{\psi}(p)$, то волновая функция состояния $\hat{D}_x(x_0)|\psi\rangle$ есть $e^{-\frac{i}{\hbar}x_0p}\tilde{\psi}(p)$.

Упражнение 3.89. Используя представления и Шрёдингера, и Гейзенберга, покажите, что применение оператора смещения координаты:

- прибавляет x_0 к среднему значению координаты, но не меняет среднее значение импульса;
- не меняет дисперсии координаты и импульса.

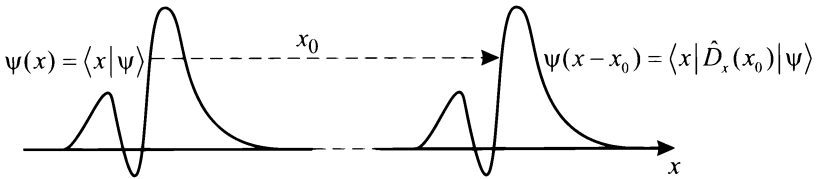


Рис. 3.12. Действие оператора смещения координаты на волновую функцию

Упражнение 3.90. Покажите, что оператор смещения импульса $\hat{D}_p(p_0) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}p_0\hat{x}}$ обладает по отношению к импульсу свойствами, аналогичными тем, которыми оператор смещения координаты обладает по отношению к координате.

Упражнение 3.91. Состояние $|\psi\rangle$ имеет волновую функцию $\psi(x)$ в координатном базисе. Для заданных величин x_0 и p_0 найдите волновые функции следующих состояний в координатном базисе:

¹ Обратите внимание, что смещение на положительную величину X_0 соответствует отрицательному изменению аргумента волновой функции. Подробнее об этом в подразд. 3.9.3.

- а) $\hat{D}_p(p_0)|\psi\rangle$;
 б) $\hat{D}_x(x_0)\hat{D}_p(p_0)|\psi\rangle$;
 в) $\hat{D}_p(p_0)\hat{D}_x(x_0)|\psi\rangle$.

Ответ:

- а) $\langle x|\hat{D}_p(p_0)|\psi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}\langle x|\psi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}\psi(x)$;
 б) $\langle x|\hat{D}_x(x_0)\hat{D}_p(p_0)|\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}p_0x_0}e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}\psi(x-x_0)$;
 в) $\langle x|\hat{D}_p(p_0)\hat{D}_x(x_0)|\psi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}\psi(x-x_0)$.

Волновые функции, полученные в частях б) и в), не одинаковы. Это означает, что результат последовательного приложения координатного и импульсного операторов смещения зависит от их порядка, так что данные операторы не коммутируют. Однако перестановка этих операторов сказывается лишь на общем фазовом множителе $e^{-ip_0x_0/\hbar}$ и, следовательно, не влияет на физику результирующего состояния. Как мы увидим далее, это следует из формулы Бейкера — Хаусдорфа — Кэмпбелла (А.54).

Упражнение 3.92. Для фазово-пространственного оператора смещения $\hat{D}_{xp}(x_0, p_0) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}(p_0\hat{x} - x_0\hat{p})}$ покажите, что

$$\hat{D}_{xp}(x_0, p_0) = e^{\frac{i}{2\hbar}p_0x_0}\hat{D}_x(x_0)\hat{D}_p(p_0) = E^{-\frac{i}{2\hbar}p_0x_0}\hat{D}_p(p_0)\hat{D}_x(x_0). \quad (3.148)$$

Данный результат подразумевает, что

$$\hat{D}_x(x_0)\hat{D}_p(p_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}p_0x_0}\hat{D}_p(p_0)\hat{D}_x(x_0),$$

и это согласуется с разницей между ответами в частях б) и в) упр. 3.91.

Упражнение 3.93. Напишите гамильтониан, который привел бы к эволюции, соответствующей фазово-пространственному оператору смещения. Найдите соответствующее преобразование операторов координаты и импульса в представлении Гейзенберга.

3.9.3. Эволюция плотностей вероятности*

Мы видели, что оператор координаты, эволюционируя под действием гамильтониана смещения, порождает оператор $\hat{x}(t)$, представляющий собой функцию первоначального $\hat{x}(0)$. Подобные ситуации встреча-

ются относительно часто. Здесь мы попытаемся разобраться, можно ли в такой ситуации использовать информацию, полученную из представления Гейзенберга, чтобы предсказать эволюцию *волновой функции* в представлении Шрёдингера. В случае координатного смещения, например, соотношение достаточно прямолинейно (рис. 3.12). Но можем ли мы его обобщить?

В данном разделе мы, как обычно, считаем гамильтониан стационарным, т. е. не зависящим от времени.

Упражнение 3.94. Предположим, что в представлении Гейзенберга эволюция оператора $\hat{x}$ под действием гамильтониана $\hat{H}$ преобразует его следующим образом:

$$\hat{x}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{x}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = f(\hat{x}(0), t), \quad (3.149)$$

где $f(x, t)$ — действительная обратимая функция. Покажите, что в представлении Шрёдингера любое собственное состояние $|x\rangle$ оператора $\hat{x}$ с собственным значением x эволюционирует в собственное состояние этого же оператора с собственным значением $f(x, t)$.

Этот результат можно записать математически как

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |x\rangle = K(x, t) |f(x, t)\rangle, \quad (3.150)$$

где $K(x, t)$ — некоторый коэффициент пропорциональности. В случае координатного смещения и координатных собственных состояний этот коэффициент равен единице, как в (3.146), но в общем случае это не так. Например, если рассмотреть действие координатного смещения на оператор *импульса*, то мы получим $f(p, t_0) = p$ [см. (3.143b)], но $K(x, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} x_0 p} \neq 1$, как видно из (3.147).

Получается, таким образом, что возможности определить комплексный аргумент $K(x, t)$ из эволюции $\hat{x}$ в представлении Гейзенберга не существует. Однако мы можем определить его абсолютное значение, используя тот факт, что $e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$ — унитарный оператор и, следовательно, правая часть уравнения (3.150) должна иметь ту же норму, что и $|x\rangle$.

Упражнение 3.95. Покажите, что

$$\langle f(x, t) | f(x', t) \rangle = \frac{\delta(x - x')}{f'(x, t)}, \quad (3.151)$$

где производная $f'(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} f(x, t)$ считается конечной и ненулевой.

Упражнение 3.96. Покажите, что в уравнении (3.150)

$$|K(x, t)|^2 = |f'(x, t)|. \quad (3.152)$$

Пусть, например, для некоторого t значение $f(x, t) = 2x$, так что эволюция «растягивает» наблюдаемые координаты вдвое. Тогда уравнение (3.151), как и можно ожидать, принимает вид $\langle 2x | 2x' \rangle = \frac{1}{2} \delta(x - x')$, и, следовательно, $|K(x, t)|^2 = 2$.

Упражнение 3.97. Основываясь на (3.150), покажите, что волновая функция $\psi(x, t)$ произвольного состояния $|\psi\rangle$ эволюционирует во времени согласно

$$\psi(x, t) = K(x, -t) \psi(f(x, -t), 0). \quad (3.153)$$

Располагая результатами двух последних упражнений, мы можем предсказать действие эволюции на абсолютную величину волновой функции наблюдаемого x . Прежде чем сделать это, исключим из (3.153) отрицательное время.

Упражнение 3.98. Покажите, что:

$$\text{a) } f(x, -t) = f^{-1}(x, t);$$

$$\text{b) } |K(x, -t)|^2 = \frac{1}{|f'(x, t)|}.$$

Упражнение 3.99. Объедините имеющиеся результаты и получите для эволюции плотности вероятности, связанной с волновой функцией $\psi(x, t)$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{|f'(x, t)|} |\psi(f^{-1}(x, t), 0)|^2. \quad (3.154)$$

Возвращаясь еще раз к примеру $f(x, t) = 2x$, видим, что (3.154) принимает вид $|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \left| \psi\left(\frac{x}{2}, 0\right) \right|^2$. Функция плотности вероятности растягивается вдоль оси x и приобретает нормировочный множитель, равный $\frac{1}{2}$, чего и следовало ожидать интуитивно.

Хотя представление Гейзенберга не предсказывает эволюцию комплексной фазы волновой функции, его можно использовать для расчета зависимости от времени абсолютного значения этой функции — и, следовательно, экспериментально измеряемой плотности вероятности, связанной с наблюдаемым $\hat{x}$. В общем случае представление Гейзенберга не менее мощный инструмент предсказания экспериментальных результатов, чем представление Шрёдингера; выбор того или иного представления для конкретного расчета диктуется соображениями простоты и зачастую личными предпочтениями исследователя.

3.10. Преобразования состояний гармонического осциллятора

Рассмотрим теперь несколько операторов, которые могут быть применены к квантовым состояниям гармонического осциллятора и особенно важны в контексте квантовой оптики. Мы изучим эти операторы как в представлении Шрёдингера, так и в представлении Гейзенберга, приобретая таким образом дополнительные навыки и больше узнавая о взаимоотношениях между этими представлениями.

В данном разделе мы *не будем* считать априори, что система находится под действием гамильтониана гармонического осциллятора. Отсылка к гармоническому осциллятору будет ограничена использованием перемасштабированных наблюдаемых координаты и импульса, введенных в разд. 3.8, операторов рождения и уничтожения, а также состояний и соотношений, выработанных в их контексте. Эти соотношения (за исключением тех, что относятся к энергиям и эволюции состояний) остаются верными вне зависимости от гамильтониана и корректны для любых значений κ , M и ω , используемых для перемасштабирования.

3.10.1. Когерентное состояние как смещенное вакуумное

Для начала покажем, что когерентное состояние может быть записано как смещенное вакуумное, и воспроизведем некоторые результаты подразд. 3.8.3 более простым способом.

Упражнение 3.100. Покажите, что оператор фазово-пространственного смещения в перемасштабированных единицах $\hat{D}_{XP}(X_0, P_0) \equiv e^{iP_0\hat{X} - iX_0\hat{P}}$ соответствует следующим преобразованиям в представлении Гейзенберга (рис. 3.13 а):

$$\hat{D}_{XP}^\dagger(X_0, P_0)\hat{X}\hat{D}_{XP}(X_0, P_0) = X + X_0; \quad (3.155a)$$

$$\hat{D}_{XP}^\dagger(X_0, P_0)\hat{P}\hat{D}_{XP}(X_0, P_0) = P + P_0; \quad (3.155b)$$

$$\hat{D}_{XP}^\dagger(X_0, P_0)\hat{a}\hat{D}_{XP}(X_0, P_0) = \hat{a} + \frac{X_0 + iP_0}{\sqrt{2}}, \quad (3.155c)$$

где $\hat{a}$ — оператор уничтожения.

Подсказка: введите фиктивный гамильтониан $\hat{H} = \hbar\omega(P_0\hat{X} - X_0\hat{P})$, где $\omega = 1/t$, и исследуйте эволюцию операторов $\hat{X}$, $\hat{P}$ и $\hat{a}$ под действием этого гамильтониана за время t .

Упражнение 3.101. Убедитесь, что вектор $\hat{D}_{XP}(X_\alpha, P_\alpha)|0\rangle$, где $|0\rangle$ есть вакуумное состояние, является собственным вектором оператора уничтожения с собственным значением $\alpha = \frac{X_\alpha + iP_\alpha}{\sqrt{2}}$. Убедитесь, что норма этого вектора равна единице.

Сравнивая полученный результат с определением когерентного состояния (подразд. 3.8.3), мы видим, что

$$|\alpha\rangle \propto \hat{D}_{XP}(X_\alpha, P_\alpha)|0\rangle. \quad (3.156)$$

Обратите внимание — мы используем знак пропорциональности, а не равенства: когерентные состояния $|\alpha\rangle$ следуют определенному фазовому соглашению, и мы не можем пока быть уверены, что правая сторона уравнения (3.156) имеет ту же фазу. Мы определим эту фазу в следующем упражнении.

Упражнение 3.102*

а) Покажите, что оператор смещения можно переписать как

$$\hat{D}_{XP}(X_\alpha, P_\alpha) = e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}}. \quad (3.157)$$

Подсказка: используйте (3.100).

б) Преобразуйте результат пункта а) следующим образом:

$$\hat{D}_{XP}(X_\alpha, P_\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha\hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^*\hat{a}}. \quad (3.158)$$

Подсказка: используйте формулу Бейкера — Хаусдорфа — Кэмпбелла (А.54).

с) Покажите, что правую часть (3.156) можно переписать как

$$\hat{D}_{XP}(X_\alpha, P_\alpha)|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle. \quad (3.159)$$

Упражнение 3.103. Выразите правую часть (3.159) в базисе Фока посредством разложения экспоненты в степенной ряд.

Мы видим, что правая часть уравнения (3.156) имеет в точности то же фоковское разложение (3.122), что и когерентное состояние. Это означает, что посредством смещения вакуума мы получаем состояние, которое не просто пропорционально, но и равно когерентному состоянию:

$$|\alpha\rangle = \hat{D}_{XP}(X_\alpha, P_\alpha)|0\rangle. \quad (3.160)$$

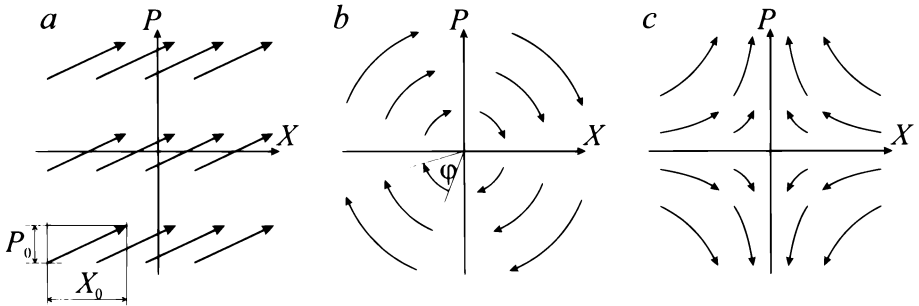


Рис. 3.13. Представление в фазовом пространстве операторов смещения (а), фазового сдвига (b) и сжатия (с). Показанное сжатие соответствует — .

3.10.2. Фазовый сдвиг

Эволюцию под действием гамильтониана гармонического осциллятора (3.96) можно переписать как

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = e^{-i\omega t \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right)}. \quad (3.161)$$

В упр. 3.73 мы выяснили, что эта эволюция преобразует когерентное состояние $|\alpha\rangle$ в другое когерентное состояние, $e^{-\frac{1}{2}i\omega t} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$. Добавля-

ется когерентный фазовый сдвиг на ωt и, кроме того, квантовый фазовый множитель $e^{-\frac{i}{2}\omega t}$, который возникает из свободного члена гамильтониана. Удобно ввести *оператор фазового сдвига*

$$\hat{F}(\varphi) \equiv e^{-i\varphi\hat{n}}, \quad (3.162)$$

где φ — действительное число. Действие данного оператора эквивалентно эволюции (3.161) за время $t = \varphi/\omega$, но не содержит вышеупомянутого дополнительного квантового фазового множителя.

Упражнение 3.104. Покажите, что:

$$a) \hat{F}(\varphi)|n\rangle = \exp(-i\varphi n)|n\rangle, \quad (3.163)$$

$$b) \hat{F}(\varphi)|\alpha\rangle = |\alpha e^{-i\varphi}\rangle. \quad (3.164)$$

Уравнение (3.163) показывает, как работает когерентный фазовый сдвиг: он применяет квантовый фазовый множитель $\exp(-i\varphi n)$ $|n\rangle$ к каждому фоковскому компоненту $|n\rangle$ состояния. Действуя совместно в рамках суперпозиции фоковских состояний, эти квантовые фазовые сдвиги (каждый из которых по отдельности нефизичен) приводят к физически измеряемому когерентному фазовому сдвигу.

Упражнение 3.105. Покажите, что фазовый сдвиг преобразует операторы гармонического осциллятора следующим образом (рис. 3.13 b):

$$\hat{F}^\dagger(\varphi)\hat{a}\hat{F}(\varphi) = \hat{a}e^{-i\varphi}; \quad (3.165)$$

$$\hat{F}^\dagger(\varphi)\hat{a}^\dagger\hat{F}(\varphi) = \hat{a}^\dagger e^{i\varphi}; \quad (3.166)$$

$$\hat{F}^\dagger(\varphi)\hat{X}\hat{F}(\varphi) = \hat{X}\cos\varphi + \hat{P}\sin\varphi; \quad (3.167)$$

$$\hat{F}^\dagger(\varphi)\hat{P}\hat{F}(\varphi) = \hat{P}\cos\varphi - \hat{X}\sin\varphi. \quad (3.168)$$

Подсказка: по аналогии с упр. 3.100 введите фиктивный гамильтониан, такой, чтобы операторные преобразования левых частей приведенных уравнений можно было интерпретировать как их эволюцию под действием этого гамильтониана в представлении Гейзенберга.

Мы видим, что применение оператора фазового сдвига (или эволюции гармонического осциллятора) ведет к повороту фазового пространства по часовой стрелке на угол $\varphi = \omega t$ вокруг начала координат. Это повторяет полученный нами ранее результат (3.115) для эволюции

средних значений координаты и импульса под действием гамильтониана гармонического осциллятора. Вспомним также, что мы получили последние два из приведенных выше уравнений, в неперемасштабированных переменных, когда вводили представление Гейзенберга в подразд. 3.9.1.

3.10.3. Сжатие

Оператор одноосцилляторного (одномодового) сжатия (squeezing) задается формулой

$$\hat{S}(r) = e^{r(\hat{a}^2 - \hat{a}^{\dagger 2})/2}, \quad (3.169)$$

где *параметр сжатия* r — действительное число.

Упражнение 3.106^s. Покажите, что оператор сжатия унитарен и

$$\hat{S}^\dagger(r) = \hat{S}^{-1}(r) = \hat{S}(-r).$$

Подсказка: см. упр. 3.87.

Упражнение 3.107. Убедитесь, что оператор сжатия эквивалентен оператору эволюции под действием гамильтониана

$$\hat{H} = \frac{i}{2} \hbar \gamma [\hat{a}^2 - (\hat{a}^\dagger)^2] = -\frac{1}{2} \hbar \gamma [\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}] \quad (3.170)$$

за время t при $r = \gamma t$. Покажите, что эта эволюция в представлении Гейзенберга преобразует операторы следующим образом:

$$\hat{S}^\dagger(r) \hat{X} \hat{S}(r) = \hat{X} e^{-r}; \quad (3.171)$$

$$\hat{S}^\dagger(r) \hat{P} \hat{S}(r) = \hat{P} e^r; \quad (3.172)$$

$$\hat{S}^\dagger(r) \hat{a} \hat{S}(r) = \hat{a} \operatorname{ch} r - \hat{a}^\dagger \operatorname{sh} r; \quad (3.173)$$

$$\hat{S}^\dagger(r) \hat{a}^\dagger \hat{S}(r) = \hat{a}^\dagger \operatorname{ch} r - \hat{a} \operatorname{sh} r. \quad (3.174)$$

Упражнение 3.108. Пусть для состояния $|\psi\rangle$ среднеквадратичные неопределенности координаты и импульса равны $\langle \Delta X_0^2 \rangle$ и $\langle \Delta P_0^2 \rangle$ соответственно. Покажите, что среднеквадратичные неопределенности

этих же наблюдаемых для состояния $\hat{S}(r)|\psi\rangle$ равны $e^{-2r}\langle\Delta X_0^2\rangle$ и $e^{2r}\langle\Delta P_0^2\rangle$ соответственно.

Данные результаты оправдывают название «оператор сжатия». Этот оператор «сжимает» координату и при этом «растягивает» импульс в e^r раз (рис. 3.13 с). Такое одновременное противоположное действие на эти два наблюдаемых гарантирует, что произведение неопределенностей координаты и импульса останется неизменным, а потому принцип неопределенности не будет нарушен. В частности, когда оператор сжатия применяется к вакуумному или когерентному состоянию, произведение неопределенностей в результирующем состоянии соответствует минимальному значению (3.95), допускаемому теорией.

Применив оператор сжатия к вакуумному состоянию, мы получаем *сжатое вакуумное* состояние. Его замечательной особенностью является то, что амплитуда его нулевых колебаний по координате (при $r > 0$) или импульсу (при $r < 0$) меньше, чем эти же параметры у вакуумного состояния — состояния с минимальной возможной энергией, содержащее ноль квантов энергии. В оптической реализации гармонического осциллятора нулевые колебания проявляются в виде случайных флуктуаций электрического поля вокруг нуля. Так вот, в сжатом вакуумном состоянии этот шум ниже, чем при полностью выключенном свете!

А теперь зададим себе вопрос, как выглядит волновая функция сжатого вакуумного состояния $\hat{S}(r)|0\rangle$. Прямое вычисление этой функции в представлении Шрёдингера весьма трудоемко. Однако, принимая во внимание результаты нашего изучения представления Гейзенберга, несложно догадаться, что результат операции сжатия заключается в перемасштабировании по оси абсцисс и перенормировании волновой функции вакуумного состояния (3.107а):

$$\psi_{sq}(X) = \langle X | \hat{S}(r) | 0 \rangle = e^{r/2} \psi_0(Xe^r) = \frac{e^{r/2}}{\pi^{1/4}} e^{-X^2 e^{2r}/2}; \quad (3.175a)$$

$$\tilde{\psi}_{sq}(P) = \langle P | \hat{S}(r) | 0 \rangle = e^{-r/2} \psi_0(Pe^{-r}) = \frac{e^{-r/2}}{\pi^{1/4}} e^{-P^2 e^{-2r}/2}. \quad (3.175b)$$

Упражнение 3.109. Убедитесь, что волновые функции (3.175):

- нормированы;
- согласуются с (3.154).

Проверка, которую мы только что проделали, ничего не говорит нам о том, правильно ли мы угадали комплексную фазу волновых

функций. Чтобы проверить, давайте просто подставим их в нестационарное уравнение Шрёдингера и убедимся в его непротиворечивости.

Упражнение 3.110. Убедитесь, что волновые функции (3.175) удовлетворяют уравнению Шрёдингера для гамильтониана (3.170) при $r = \gamma t$.

Двухосцилляторный (двумодовый) оператор сжатия, действующий на два осциллятора, обозначаемые индексами A и B , задается формулой

$$\hat{S}_2(r) = \exp[r(-\hat{a}_A \hat{a}_B + \hat{a}_A^\dagger \hat{a}_B^\dagger)], \quad (3.176)$$

где r — действительное число.

Упражнение 3.111

- а) Убедитесь, что двумодовый оператор сжатия можно связать со следующим фиктивным гамильтонианом

$$\hat{H} = i\hbar\gamma(-\hat{a}_A \hat{a}_B + \hat{a}_A^\dagger \hat{a}_B^\dagger) = \hbar\gamma(\hat{X}_A \hat{P}_B + \hat{P}_A \hat{X}_B) \quad (3.177)$$

при $r = \gamma t$.

- б) Покажите, что двумодовое сжатие в представлении Гейзенберга соответствует следующему преобразованию операторов¹:

$$\hat{S}_2^\dagger(r) \hat{X}_\pm \hat{S}_2(r) = \hat{X}_\pm e^{\pm r}; \quad (3.178)$$

$$\hat{S}_2^\dagger(r) \hat{P}_\pm \hat{S}_2(r) = \hat{P}_\pm e^{\mp r}; \quad (3.179)$$

$$\hat{S}_2^\dagger(r) \hat{a}_A \hat{S}_2(r) = \hat{a}_A \operatorname{ch} r + \hat{a}_B^\dagger \operatorname{sh} r; \quad (3.180)$$

$$\hat{S}_2^\dagger(r) \hat{a}_B \hat{S}_2(r) = \hat{a}_B \operatorname{ch} r + \hat{a}_A^\dagger \operatorname{sh} r, \quad (3.181)$$

$$\text{где } \hat{X}_\pm = \frac{\hat{X}_A \pm \hat{X}_B}{\sqrt{2}}; \quad \hat{P}_\pm = \frac{\hat{P}_A \pm \hat{P}_B}{\sqrt{2}}. \quad (3.182)$$

- с) Найдите математические ожидания и неопределенности наблюдаемых $\hat{X}_{A,B}$, $\hat{P}_{A,B}$, $\hat{X}_\pm$ и $\hat{P}_\pm$ в двумодовом сжатом вакуумном состоянии $\hat{S}_2(r)|00\rangle$.

Ответ: все математические ожидания равны нулю. Среднеквадратичные отклонения равны

$$\langle \Delta X_-^2 \rangle = \langle \Delta P_+^2 \rangle = \frac{1}{2} e^{-2r}; \quad (3.183)$$

¹ Преобразование операторов осциллятора, заданное уравнениями (3.173), (3.174) или (3.180), (3.181), называется преобразованием Боголюбова.

$$\langle \Delta X_+^2 \rangle = \langle \Delta P_-^2 \rangle = \frac{1}{2} e^{2r}; \quad (3.184)$$

$$\langle \Delta X_A^2 \rangle = \langle \Delta X_B^2 \rangle = \langle \Delta P_A^2 \rangle = \langle \Delta P_B^2 \rangle = \frac{1}{2} \text{ch } 2r. \quad (3.185)$$

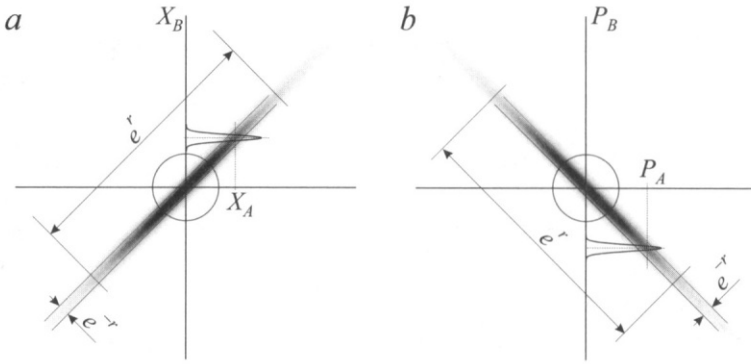


Рис. 3.14. Волновая функция двумодового сжатого вакуумного состояния в координатном (а) и импульсном (б) базисах. Наблюдаемые координаты коррелируют, а наблюдаемые импульса антикоррелируют, так что неопределенности в их разности и сумме, соответственно, находятся ниже вакуумного уровня (представленного окружностями). Измеряя координату или импульс, Алиса удаленно приготовляет состояние, которое при больших r приблизительно совпадает с собственным состоянием того же наблюдаемого в локации Боба.

Упражнение 3.112. Путем подставления в нестационарное уравнение Шрёдингера убедитесь, что нормализованные волновые функции двумодового сжатого вакуумного состояния в базисах координаты и времени равны (рис. 3.14)

$$\begin{aligned} \psi_{sq2}(X_A, X_B) &= \langle X_A, X_B | \hat{S}_2(r) | 0, 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-(X_A - X_B)^2 e^{2r}/4} e^{-(X_A + X_B)^2 e^{-2r}/4}, \end{aligned} \quad (3.186a)$$

$$\begin{aligned} \psi_{sq2}(P_A, P_B) &= \langle P_A, P_B | \hat{S}_2(r) | 0, 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-(P_A - P_B)^2 e^{-2r}/4} e^{-(P_A + P_B)^2 e^{2r}/4}. \end{aligned} \quad (3.186b)$$

Упражнение 3.113. У наблюдателей Алисы и Боба есть две частицы в двухосцилляторном сжатом состоянии (3.186a).

а) Предположим, Алиса измеряет координату своей частицы и получает результат X_A . Какой станет волновая функция

частицы Боба в координатном базисе? Чему равна при этом ее неопределенность по координате $\langle \Delta X_B^2 \rangle$?

- б) Предположим, Алиса измеряет импульс своей частицы и получает результат P_A . Какой станет волновая функция частицы Боба в импульсном базисе? Чему равна при этом ее неопределенность по импульсу $\langle \Delta P_B^2 \rangle$?

Ответ:

$$\langle \Delta X_B^2 \rangle = \langle \Delta P_B^2 \rangle = \frac{1}{2 \operatorname{ch} 2r}. \quad (3.187)$$

Уравнение (3.187) показывает замечательное свойство двумодового сжатого вакуума. Если мы измерим либо координату, либо импульс одного из двух осцилляторов, то будем знать соответствующее наблюдаемое другого осциллятора с неопределенностью меньшей, чем неопределенность вакуумного состояния (рис. 3.14). Иными словами, мы можем удаленно, по желанию, приготовить второй осциллятор в одном из двух состояний, для которых произведение неопределенностей координаты и импульса меньше минимума, разрешенного принципом неопределенности. Это нарушает локальный реализм в том же смысле, в каком его нарушает первоначальное состояние Эйнштейна — Подольского — Розена (подразд. 3.3.3).

Данное свойство двумодового сжатого вакуума, возникающее при любом значении параметра сжатия r (положительном или отрицательном), объясняется его запутанной природой. Это состояние относительно несложно приготовить экспериментально (отступление 3.13), поэтому оно является главным запутанным ресурсом в различных квантово-оптических информационных протоколах с непрерывными наблюдаемыми, основанных на электромагнитных осцилляторах.

Рассмотрим коротко двумодовое сжатое состояние в *неперемасштабированных* переменных. Какой будет его волновая функция и при каких обстоятельствах сможет оно служить примером ЭПР-парадокса?

Упражнение 3.114. У Алисы и Боба есть общее состояние с волновой функцией

$$\Psi(x_A, x_B) = \mathcal{N} \left[e^{-\frac{(x_A - x_B)^2}{4d^2}} e^{-\frac{(x_A + x_B)^2}{4D^2}} \right], \quad (3.188)$$

где x_A и x_B — неперемасштабированные наблюдаемые координаты и импульса, а d и D — положительные константы.

- а) Найдите множитель ζ , который перемасштабирует наблюдаемое координаты в соответствии с $\hat{X}_{A,B} = \zeta \hat{x}_{A,B}$ таким образом, что приведенная волновая функция принимает вид (3.186а). Покажите, что соответствующий коэффициент сжатия равен $e^r = \sqrt{\frac{D}{d}}$.
- б) Найдите соответствующий множитель перемасштабирования для наблюдаемого импульса, такого что $[\hat{X}_{A,B}, \hat{P}_{A,B}] = i$.

Наш результат означает, что двусоставный гауссов волновой пакет (3.188) демонстрирует запутанность при *любой*, сколь угодно малой степени корреляции между координатами двух частиц. Запутанность отсутствует только для $d = D$, т. е. когда это состояние становится явным образом разделимым:

$$\Psi(x_A, x_B) = \mathcal{N} \left[e^{-\frac{x_A^2 + x_B^2}{2d^2}} \right].$$

Наша последняя цель в обсуждении сжатия состоит в том, чтобы найти разложение в фоковском базисе для одномодового и двумодового сжатых состояний. Мы сначала проведем приблизительную оценку для малых r для иллюстрации принципа, а затем уже осуществим полный расчет.

Упражнение 3.115

- а) Разложите одномодовый оператор сжатия в степенной ряд до первого порядка по r и примените его к вакуумному состоянию в представлении Шрёдингера в фоковском базисе. Покажите, что получится состояние, задаваемое формулой

$$\hat{S}(r)|0\rangle \approx |0\rangle - \frac{r}{\sqrt{2}}|2\rangle. \quad (3.189)$$

Вычислите дисперсии координаты и импульса в этом состоянии и покажите, что они согласуются с результатом упр. 3.108.

- б) Разложите двумодовый оператор сжатия в степенной ряд до первого порядка по r и примените его к двойному вакуумному состоянию $|0, 0\rangle$. Покажите, что получающееся состояние задается формулой

$$\hat{S}_2(r)|0,0\rangle \approx |0,0\rangle + r|1,1\rangle. \quad (3.190)$$

Вычислите дисперсии наблюдаемых $\hat{X}_{\pm}$ и $\hat{P}_{\pm}$ в таком состоянии и покажите, что их значения согласуются с (3.183) и (3.184).

Этот простой расчет позволяет нам увидеть характерные черты фоковской структуры сжатых состояний. Разложение двумодового оператора сжатия в ряд Тейлора содержит в себе различные степени операторов $\hat{a}_A \hat{a}_B$ и $\hat{a}_A^\dagger \hat{a}_B^\dagger$. Это означает, что $\hat{S}_2(r)$ создает и разрушает энергетические кванты в двух осцилляторах строго парами, поэтому двумодовое сжатое состояние содержит только слагаемые с одинаковым числом квантов:

$$\hat{S}_2(r)|0,0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} D_n |nn\rangle.$$

Аналогичным образом одномодовый оператор сжатия порождает и уничтожает кванты в осцилляторе строго парами, так что фоковское разложение одномодового сжатого состояния содержит только слагаемые с четным числом фотонов:

$$\hat{S}(r)|0\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} C_m |2m\rangle.$$

Ниже мы вычисляем коэффициенты C_m и D_n . Этот расчет — хорошая тренировка, но он относительно длинен, поэтому при первом прочтении его можно пропустить.

Упражнение 3.116*. Покажите, что

$$\hat{S}(r)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\text{ch } r}} \sum_{m=0}^{\infty} (-\text{th } r)^m \frac{\sqrt{(2m)!}}{2^m m!} |2m\rangle, \quad (3.191)$$

выполнив следующие шаги:

- а) Вычислите скалярное произведение $\hat{S}(r)|0\rangle$ и когерентного состояния $|\alpha\rangle$ (с действительной амплитудой α), например, в координатном базисе.

Ответ:

$$\langle \alpha | \hat{S}(r) | 0 \rangle = \sqrt{\frac{1}{\text{ch } r}} \exp \left[-\frac{e^{2r}}{1 + e^{2r}} \alpha^2 \right]. \quad (3.192)$$

- б) Разложите когерентное состояние из левой части уравнения (3.192) в фоковском базисе, а экспоненту из правой части этого уравнения — в степенной ряд по α . Приравняйте слагаемые с равными степенями α в обеих частях и получите уравнение (3.191).

Отступление 3.13. Приготовление и измерение сжатых состояний

В оптической реализации гармонического осциллятора сжатые состояния могут быть получены с использованием (вы уже догадались) параметрического рассеяния (отступление 1.6). Как мы знаем, одна из главных особенностей этого явления заключается в том, что фотоны генерируются парами — в точности как в сжатых вакуумных состояниях. В зависимости от того, одномодовый или двумодовый сжатый вакуум мы хотим получить, используются различные конфигурации параметрического рассеяния: оно либо *вырождено*, если два фотона выпускаются в одной и той же оптической моде, либо *невыврождено*, если фотоны в паре распределены по двум оптическим каналам.

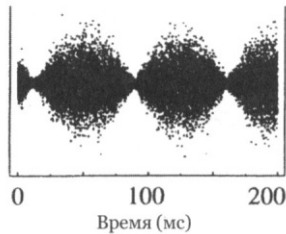


Спонтанное параметрическое рассеяние: *a* — вырожденная конфигурация, порождающая одномодовый сжатый вакуум; *b* — невырожденная конфигурация, порождающая двумодовый сжатый вакуум

Невырожденная конфигурация выглядит так же, как описывалось в контексте источников объявленных фотонов (отступление 1.6) и источников запутанных пар (отступление 2.1). Однако эти описания делались в приближении слабой накачки, так что вероятность генерации двух или более пар фотонов одновременно пренебрежимо мала. Отказавшись от этого предположения, мы получаем более общий случай: сжатие.

Мы видим, что ряд (3.193) представляет собой геометрическую прогрессию: амплитуда каждого последующего члена равна амплитуде предыдущего, домноженной на $\text{th } r$. Именно этого и следует ожидать от параметрического рассеяния: поскольку это спонтанный процесс, вероятность появления n пар равна вероятности появления единичной пары, возведенной в n -ю степень. Если такая вероятность значима, то фактор сжатия e^{-r} (см. упр. 3.108) значительно отличается от единицы. В случае одномодового сжатия (3.191) соотношение геометрической прогрессии осложняется из-за интерференции между фотонами пары, выпущенной в одну и ту же моду.

Если сжатое состояние возникло, как его можно обнаружить? Один из способов убедиться в наличии двумодового сжатия состоит в том, чтобы измерить число фотонов в двух эмиссионных модах и убедиться, что число их там и там коррелирует. Однако этот метод не позволяет установить фазовое соотношение между компонентами фотонной пары и, более того, не годится для обнаружения одномодового сжатия. Гораздо информативнее будет произвести множественные измерения координаты и импульса с использованием гомодинного детектора (отступление 3.12) и убедиться в том, что их статистика ведет себя ожидаемым образом.



Множественные измерения наблюдаемого $\hat{X} \cos \theta + \hat{P} \sin \theta$ в одномодовом сжатом по координате вакуумном состоянии. Параметр θ меняется со временем, так что $\sim 10, 90, 160$ мс соответствуют измерениям наблюдаемого координаты, а $\sim 50, 130, 200$ мс — импульса. Иллюстрация взята из: G. Breitenbach, S. Schiller, and J. Mlynek, *Measurement of the quantum states of squeezed light*, Nature **387**, 471 (1997).

Упражнение 3.117*. Покажите, что

$$\hat{S}_2(r)|0,0\rangle = \frac{1}{\text{ch } r} \sum_{n=0}^{\infty} \text{th}^n r |nn\rangle, \quad (3.193)$$

выполнив следующие шаги.

- а) Вычислите перекрытие $\hat{S}_2(r)|0,0\rangle$ и тензорного произведения $|\alpha, \alpha\rangle$ одинаковых когерентных состояний в осцилляторах Алисы и Боба:

$$\langle \alpha, \alpha | \hat{S}_2(r) | 0, 0 \rangle = \frac{1}{\text{ch } r} \exp \left[-\frac{2}{1 + e^{2r}} \alpha^2 \right]. \quad (3.194)$$

- б) Разложив когерентные состояния из левой части в фоковском базисе и оставив только члены с равным числом фотонов, покажите, что

$$\sum_{n=0}^{\infty} \langle n, n | \hat{S}_2(r) | 0, 0 \rangle \frac{\alpha^{2n}}{n!} = \frac{1}{\text{ch } r} e^{\alpha^2 \text{th } r}. \quad (3.195)$$

- с) Разложите экспоненту в правой части приведенного уравнения в степенной ряд по α и получите уравнение (3.193).

Упражнение 3.118*. Найдите среднее значение и дисперсию числа квантов энергии:

- а) в состоянии одномодового сжатого вакуума;
 б) в состоянии двумодового сжатого вакуума (в каждом канале).

Подсказка: найдите квадрат нормы обоих состояний из уравнений (3.191) и (3.195) и вычислите производную по $\text{th } r$.

Ответ:

- а) $\langle m \rangle = \text{sh}^2 r; \langle \Delta m^2 \rangle = 2\text{sh}^2 r + 2\text{sh}^4 r;$
 б) $\langle n \rangle = \text{sh}^2 r; \langle \Delta n^2 \rangle = \text{sh}^2 r + \text{sh}^4 r.$

3.11. Задачи

Задача 3.1. Некоторое состояние характеризуется волновой функцией

$$\psi(x) = A x e^{-\kappa^2 x^2 / 2}.$$

- а) Найдите нормирующий множитель A .
 б) Найдите волновую функцию $\tilde{\psi}(p)$ в импульсном базисе.
 с) Проверьте принцип неопределенности: $\langle \Delta p^2 \rangle \langle \Delta x^2 \rangle \geq \hbar^2 / 4$.

Подсказка:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-x^2} dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}.$$

Задача 3.2. Найдите элемент матрицы $\langle p | \hat{A} | p' \rangle$, если оператор $\hat{A}$ есть функция координаты:

- а) $\hat{A}(x) = A_0$;
- б) $\hat{A} = e^{-\hat{x}^2/b^2}$.

Задача 3.3. Для энергетических собственных состояний из упр. 3.40 найдите неопределенности координаты и импульса и убедитесь в том, что принцип неопределенности выполняется.

Задача 3.4. Рассмотрите состояние:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax & \text{при } |x| < a/2 \\ 0 & \text{при } |x| \geq a/2 \end{cases},$$

где $A = 2\sqrt{3}/a^{3/2}$ есть норма, в потенциальном поле из упр. 3.40. Найдите спектр энергий этого состояния, т.е. вероятности pr_n наблюдения каждого из энергетических собственных состояний. Покажите, что в сумме эти вероятности дают единицу.

Подсказка: $\sum 1/n^2 = \pi^2/6$.

Задача 3.5. Рассмотрите частицу массой M , начальное состояние которой характеризуется волновой функцией $\psi(x)$, в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a . Покажите, что эволюция под действием уравнения Шрёдингера восстановит начальное состояние (возможно, с фазовым множителем) через время $t = 4Ma^2/\pi\hbar$.

Задача 3.6. Для конечной потенциальной ямы (3.65):

- а) аналитически найдите приближенные поправки к первым двум энергетическим уровням бесконечно глубокой потенциальной ямы (упр. 3.40) при замене ее конечной ямой с $V_0 \gg E_1$, где E_1 задается уравнением (3.69);
- б) найдите численно первые два энергетических собственных значения для $k_0 a = 10$. Сопоставьте ли ваш результат с результатом части (а)?

Задача 3.7. Частица находится в основном состоянии бесконечно глубокой потенциальной ямы шириной a . Яма внезапно становится в два раза шире (симметрично в обе стороны). Какова вероятность, что частица останется в основном состоянии нового потенциала?

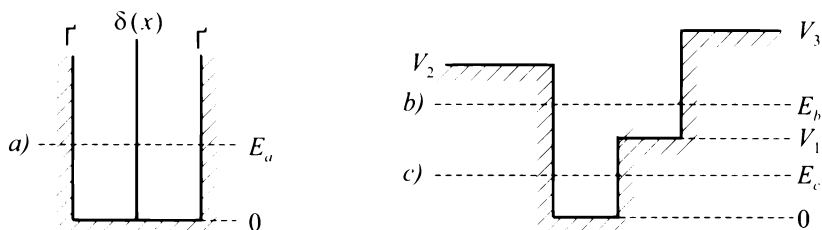


Рис. 3.15. Потенциал для задачи 3.8

Задача 3.8. Нарисуйте качественно действительные части стационарных волновых функций для потенциалов, показанных на рис. 3.15, с отмеченными там же значениями энергии. При решении следует уделить внимание подробностям, например взаимоотношениям между длинами волн де Бройля в разных областях пространства, условиям непрерывности и т. д.

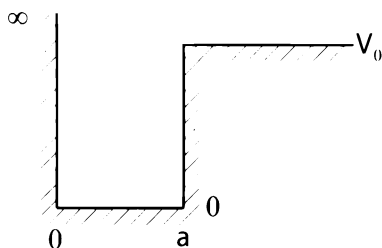


Рис. 3.16. Потенциал для задачи 3.9

Задача 3.9. Найдите трансцендентное уравнение для собственных значений энергии, присущих связанным стационарным состояниям в потенциале

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{при } x \leq 0; \\ 0 & \text{при } 0 < x \leq a; \\ V_0 & \text{при } x > a. \end{cases}$$

Сравните свой результат с результатом упр. 3.39.

Задача 3.10. Выполните упр. 3.41 в импульсном базисе. Проверьте, согласуется ли ваше решение с решением в координатном базисе.

Подсказка:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1+x^2} dx = \pi ; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(1+x^2)^2} dx = \pi/2. \quad (3.196)$$

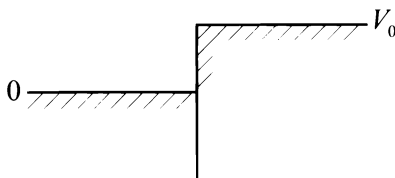


Рис. 3.17. Потенциал для задачи 3.11

Задача 3.11. Найдите энергии и волновые функции всех связанных состояний, ассоциированных с потенциалом

$$V(x) = V_0 \theta(x) - W_0 \delta(x),$$

где V_0 и W_0 положительны, а $\theta(x)$ есть ступенчатая функция Хевисайда (рис. 3.17). Найдите условия существования по крайней мере одного связанного состояния.

Задача 3.12. Вычислите коэффициенты отражения и прохождения для рассеяния на дельта-потенциале $V(x) = W_0 \delta(x)$ с энергией $E > 0$. Сравните свои результаты с результатами, полученными из уравнений (3.81) для бесконечно тонкого и высокого прямоугольного потенциального барьера ($L \rightarrow 0$, $V_0 = W_0/L$).

Задача 3.13. Массивная частица массой M закреплена на пружине с коэффициентом упругости k . Второй конец пружины прикреплен к стене, в результате чего возникает гармоническое колебательное движение.

- Напишите полный набор энергетических собственных значений и соответствующие нормированные волновые функции в *неперемасштабированном* координатном базисе.
- Предположим, в точке $x = 0$ появляется новая стена, как показано на рис. 3.18, так что частица не может заходить в область $x > 0$.

Каким образом следует модифицировать записанный набор, чтобы он представлял энергетические собственные значения и собственные состояния для нового потенциала?

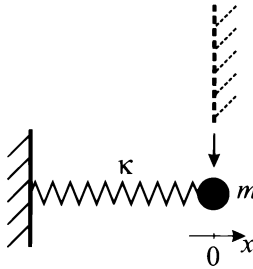


Рис. 3.18. Иллюстрация к задаче 3.13

Задача 3.14. Массивная частица массой M закреплена на пружине с коэффициентом упругости k . Второй конец пружины прикреплен к стене, благодаря чему образуется гармонический осциллятор. Первоначально частица находится в основном энергетическом собственном состоянии.

- В момент времени $t = 0$ на частицу начинает действовать дополнительная, не зависящая от координаты сила F . Найдите вероятность обнаружения частицы в основном состоянии нового потенциала.
- Найдите математическое ожидание координаты $\langle x(t) \rangle$ и импульса $\langle p(t) \rangle$ частицы в зависимости от времени.

Подсказка: вычислять эволюцию волновой функции необходимости нет.

Задача 3.15¹. Когерентное состояние с одним добавленным фотоном (SPACS, single-photon added coherent state) получается из когерентных состояний при действии на них оператора рождения: $|\alpha, 1\rangle = \mathcal{N} \hat{a}^\dagger |\alpha\rangle$.

- Найдите нормировочный множитель $\mathcal{N}$.
- Найдите разложение этого состояния в базисе чисел фотонов (упрощать результат не требуется).
- Найдите математическое ожидание координаты.
- Найдите волновую функцию SPACS для действительного α .

¹ Во всех последующих задачах используйте перемасштабированные наблюдаемые координаты и импульса, т. е. $[\hat{X}, \hat{P}] = i$.

- е) К какому квантовому состоянию приближается SPACS в пределе $\alpha = 0$? $\alpha \rightarrow \infty$?

Задача 3.16. Рассмотрим состояние гармонического осциллятора, разложение которого в базисе чисел квантов имеет вид

$$|\psi(t=0)\rangle = \alpha|0\rangle - \beta|2\rangle,$$

где α и β действительны и $\alpha^2 + \beta^2 = 1$.

- Найдите волновую функцию $|\psi(t=0)\rangle$ в координатном базисе.
- Определите поведение $|\psi(t)\rangle$ этого состояния в зависимости от времени в числовом базисе.
- Найдите математическое ожидание и дисперсию энергии в зависимости от времени.
- Найдите математическое ожидание и дисперсию координаты в зависимости от времени.
- Для каких значений α и β состояние $|\psi(t=0)\rangle$ является сжатым по координате, т.е. дисперсия координаты меньше, чем в вакуумном состоянии?

Задача 3.17. Рассмотрим следующее состояние двух гармонических осцилляторов:

$$|\psi\rangle = \alpha|0,0\rangle - \beta|1,1\rangle,$$

где α и β действительны и $\alpha^2 + \beta^2 = 1$.

- Для каких значений α и β это состояние демонстрирует двумодовое сжатие по координате, т.е. дисперсия $\hat{X}_A - \hat{X}_B$ меньше, чем в двойном вакуумном состоянии?
- Ответьте на этот же вопрос для импульса.

Задача 3.18. Рассмотрим когерентные суперпозиции когерентных состояний $|S_{\pm}\rangle = \mathcal{N}_{\pm}(|\alpha\rangle \pm |-\alpha\rangle)$, где $\mathcal{N}_{\pm}$ — нормирующие множители, а амплитуда α действительна и положительна¹.

¹ Данное состояние иногда называют «кошкой Шрёдингера», хотя оно и не полностью соответствует оригинальному мысленному эксперименту Шрёдингера с запутанностью между микроскопическим и макроскопическим объектом. Тем не менее это суперпозиция двух «классических» и потенциально макроскопических когерентных состояний, поэтому оно в высшей степени неклассично. Построение таких состояний со все большими амплитудами α может помочь нам определить пределы применимости квантовой физики — см. подразд. 2.4.3. Поэтому они являются предметом активного изучения.

- а) Найдите $\mathcal{N}_{\pm}$.
- б) Найдите матрицы (волновые функции) этих состояний
- в фоковском базисе;
 - в координатном базисе;
 - в импульсном базисе.
- с) Покажите, что для малых амплитуд α данные состояния можно аппроксимировать до двух первых членов фоковского разложения состояниями

$$|S_+\rangle \approx \hat{S}(r_+)|0\rangle, \quad |S_-\rangle \approx \hat{S}(r_-)|1\rangle,$$

и найдите $r_{\pm}(\alpha)$, для которого такое приближение оптимально.

Задача 3.19. Для операторов смещения в фазовом пространстве

$$\hat{D}_{XP}(X_{\alpha}, P_{\alpha}) \text{ и } \hat{D}_{XP}(X_{\beta}, P_{\beta})$$

при $\alpha, \beta = \frac{X_{\alpha, \beta} + iP_{\alpha, \beta}}{\sqrt{2}}$:

- а) выразите оператор $\hat{D}_{XP}(X_{\beta}, P_{\beta})\hat{D}_{XP}(X_{\alpha}, P_{\alpha})$ через $\hat{D}_{XP}(X_{\alpha} + X_{\beta}, P_{\alpha} + P_{\beta})$;
- б) выразите состояние $\hat{D}_{XP}(X_{\beta}, P_{\beta})|\alpha\rangle$ через вектор когерентного состояния $|\alpha + \beta\rangle$.

Задача 3.20. Для оператора координатного смещения $\hat{D}_X(X_0)$ в перемасштабированных переменных:

- а) найдите $\hat{D}_X^{\dagger}(X_0)\hat{a}\hat{D}_X(X_0)$ и $\hat{D}_X^{\dagger}(X_0)\hat{a}^{\dagger}\hat{D}_X(X_0)$;
- б) найдите $[a, \hat{D}_X(X_0)]$ и $[a^{\dagger}, \hat{D}_X(X_0)]$;
- с) найдите фоковское разложение смещенного однофотонного состояния $\hat{D}_X(X_0)|1\rangle$.

Подсказка: $|n\rangle = (\hat{a}^{\dagger})^n|0\rangle / \sqrt{n!}$.

Задача 3.21. Гармонический осциллятор, находящийся первоначально в вакуумном состоянии, эволюционировал под действием гамильтониана $\hat{H}_1 = r[\hat{a}^2 + (\hat{a}^{\dagger})^2]/2$ или $\hat{H}_2 = r\hat{P}^2$, с действительным и положительным r , на протяжении времени t_0 . Проведите следующие вычисления для получившегося состояния.

- а) Найдите среднее значение и дисперсию обобщенного наблюдаемого квадратуры $\hat{X}_{\theta} = \hat{X} \cos \theta + \hat{P} \sin \theta$ для произвольного угла θ .

- б) Определите, какой угол отвечает максимальному сжатию.
 в) Определите, чему равна дисперсия соответствующей квадратуры.
 Выполните эти вычисления как для гамильтониана $\hat{H}_1$, так и $\hat{H}_2$.

Задача 3.22. Два гармонических осциллятора, находящиеся первоначально в вакуумном состоянии $|0\rangle \otimes |0\rangle$, взаимодействуют под действием гамильтониана

$$\hat{H} = \hbar\chi\hat{X}_A\hat{P}_B$$

при действительном и положительном χ .

- Напишите дифференциальные уравнения для наблюдаемых координаты и импульса $\hat{X}_{A,B}(t)$ и $\hat{P}_{A,B}(t)$ в представлении Гейзенберга.
- Решите эти уравнения и получите выражения для $\hat{X}_{A,B}(t)$ и $\hat{P}_{A,B}(t)$.
- Найдите математическое ожидание и дисперсию наблюдаемых $\hat{X}_{A,B}$, $\hat{P}_{A,B}$, $\hat{X}_{\pm} = (\hat{X}_A \pm \hat{X}_B)/\sqrt{2}$ и $\hat{P}_{\pm} = (\hat{P}_A \pm \hat{P}_B)/\sqrt{2}$ в зависимости от времени t .
- Для каких значений t наблюдается двумодовое сжатие, т.е. неопределенность $\hat{X}_{\pm}$ или $\hat{P}_{\pm}$ ниже неопределенности вакуумного состояния в момент времени $t = 0$?
- Найдите в фоковском базисе приближение первого порядка состояния, в которое эволюционирует двойной вакуум под действием гамильтониана $\hat{H}$, в представлении Шрёдингера и в предположении $\chi t / \hbar \ll 1$.
- Найдите среднее квадратичное значение $\langle X_{\pm}^2 \rangle$ для этого состояния. Соплассуетсся ли ваш результат с результатом части d)?

МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

Весь век вертяться вокруг своей оси, не зная ни азимута, ни аза И, даже угадав орбиту, двигаться все же поперек.

4.1. Трехмерное движение

Теперь, когда мы разобрались в одномерной квантовой механике, пора вспомнить, что пространство, в котором мы живем, является трехмерным. Поэтому, чтобы дать квантово-теоретическое описание реальных физических объектов, таких как атомы, необходимо обобщить наши результаты на три измерения. Для этого мы говорим, что гильбертово пространство трехмерных состояний точечной частицы представляет собой тензорное произведение гильбертовых пространств, связанных с отдельными координатами:

$$\mathbb{V}_{3D} = \mathbb{V}_x \otimes \mathbb{V}_y \otimes \mathbb{V}_z. \quad (4.1)$$

Трехмерные операторы координат и импульса — это векторы¹, компонентами которых являются координатные и импульсные наблюдаемые отдельных одномерных пространств²: $\hat{\vec{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, $\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$. Перестановочные отношения между компонентами наблюдаемых трехмерных координат и импульса выглядят так: $[\hat{r}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$. То есть координата и импульс не коммутируют между собой в том и только том случае, когда принадлежат одному и тому же гильбертову пространству.

Под *собственными состояниями* векторных операторов мы понимаем одновременные собственные состояния их компонентов. Напри-

¹ Чтобы избежать путаницы, мы не будем в этой главе использовать термин «вектор» в смысле «элемент гильбертова пространства». Будем применять его только для обозначения наблюдаемых, имеющих x -, y - и z -компоненты.

² Иногда мы будем пользоваться альтернативной системой записи, имеющей такой вид: $\hat{\vec{r}} = (\hat{r}_1, \hat{r}_2, \hat{r}_3)$, $\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3)$.

мер, состояние $|\vec{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$ удовлетворяет сразу трем уравнениям:

$$\begin{aligned}\hat{x}|\vec{r}\rangle &= (\hat{x} \otimes \hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{\mathbf{1}})(|x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle) = x|\vec{r}\rangle; \\ \hat{y}|\vec{r}\rangle &= (\hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{y} \otimes \hat{\mathbf{1}})(|x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle) = y|\vec{r}\rangle; \\ \hat{z}|\vec{r}\rangle &= (\hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{z})(|x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle) = z|\vec{r}\rangle,\end{aligned}\quad (4.2)$$

так что $|\vec{r}\rangle$ есть собственное состояние $\hat{\vec{r}}$.

Сразу хотелось бы подчеркнуть, что векторный оператор не является тензорным произведением операторов в смысле подразд. 2.1.3, а представляет собой набор из трех операторов. Это означает, к примеру, что, подействовав оператором $\hat{\vec{r}}$ на тензорное произведение собственных состояний координат $|\vec{r}\rangle \equiv |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$, мы будем иметь набор из трех состояний $(x|\vec{r}\rangle, y|\vec{r}\rangle, z|\vec{r}\rangle)$. Если бы $\hat{\vec{r}}$ был тензорным произведением операторов, мы вместо этого получили бы единственное состояние $x y z |\vec{r}\rangle$.

Как и в одномерном случае, волновая функция любого состояния $|\psi\rangle$ задается формулой

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle. \quad (4.3)$$

Упражнение 4.1. Покажите, что:

- а) произвольное состояние $|\psi\rangle$ связано со своей волновой функцией (4.3) согласно

$$|\psi\rangle = \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle dx dy dz; \quad (4.4)$$

- б) скалярное произведение двух состояний $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ в $\mathbb{V}_{3D}$ задается формулой

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}) dx dy dz. \quad (4.5)$$

Упражнение 4.2. Напишите трехмерную волну де Бройля, т. е. скалярное произведение состояний $|\vec{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$ и $|\vec{p}\rangle = |p_x\rangle \otimes |p_y\rangle \otimes |p_z\rangle$.

Ответ:

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(xp_x + yp_y + zp_z)} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}}. \quad (4.6)$$

Теперь посмотрим на гамильтониан, управляющий движением в трехмерном пространстве. Как и при рассмотрении одномерного случая, одной из наших целей в данной главе будет поиск волновых функций энергетических собственных состояний для различных потенциалов.

Гамильтониан механического движения представляет собой сумму кинетической и потенциальной энергий. В трех измерениях он принимает вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2M} + \frac{\hat{p}_y^2}{2M} + \frac{\hat{p}_z^2}{2M} + V(\vec{r}). \quad (4.7)$$

Наблюдаемое кинетической энергии в $\mathbb{V}_{3D}$ есть сумма кинетических энергий, соответствующих отдельным координатам. Если с потенциальной энергией дело обстоит так же, т.е. если можно разложить $V(\vec{r}) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$, то мы сможем искать решения стационарного уравнения Шрёдингера среди разделимых состояний в соответствии с упр. 2.26 (с). Простой пример такой ситуации — случай свободного пространства при $V(\vec{r}) = 0$. Действительно, трехмерная волна де Бройля (4.6), представляющая некоторое собственное состояние этого гамильтониана, есть произведение волн де Бройля для отдельных координат.

Упражнение 4.3. Покажите, что состояние $|\vec{p}\rangle$ является собственным состоянием оператора кинетической энергии $\hat{p}^2/2M = (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)/2M$ с собственным значением $(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2M$.

Еще один пример можно найти в следующем упражнении.

Упражнение 4.4*. Найдите энергетические собственные значения и их степени вырождения для трехмерного изотропного гармонического осциллятора с $V(\vec{r}) = M\omega^2 r^2 / 2$, где $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$.

В общем случае, однако, потенциал не есть сумма потенциалов для отдельных координат. Это приводит к тому, что эволюция под действием гамильтониана (4.7), как правило, запутывает состояния, которые первоначально были тензорными произведениями векторов в $\mathbb{V}_x$, $\mathbb{V}_y$ и $\mathbb{V}_z$. Собственные состояния гамильтониана также будут запутаны по отношению к трем пространствам-компонентам. Чтобы проиллюстрировать это, запишем стационарное уравнение Шрёдингера для трехмерного движения в координатном базисе.

Упражнение 4.5. Покажите, что в координатном базисе:

- а) действие одного из компонентов оператора импульса на произвольное состояние $|\psi\rangle$ в координатном представлении есть

$$\langle \vec{r} | \hat{p}_i | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_i} \langle \vec{r} | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_i} \psi(\vec{r});$$

- б) действие *вектора* оператора импульса в координатном базисе есть $\langle \vec{r} | \hat{\vec{p}} | \psi \rangle = -i\hbar \vec{\nabla} \langle \vec{r} | \psi \rangle = -i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{r})$, где $\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$ (иными словами, в координатном базисе $\hat{\vec{p}} \simeq -i\hbar \vec{\nabla}$);

- с) стационарное уравнение Шрёдингера принимает вид

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2M} + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (4.8)$$

или

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (4.9)$$

где $\nabla^2 = \partial^2 / \partial x^2 + \partial^2 / \partial y^2 + \partial^2 / \partial z^2$ — оператор Лапласа, или *лапласиан*.

Мы получили трехмерное дифференциальное уравнение в частных производных. Его решение, как правило, не может быть записано как произведение функций отдельных декартовых переменных — так проявляется упомянутая выше запутанность.

Решение уравнения (4.9) в общем виде весьма затруднительно. К счастью, физические задачи, требующие подобных усилий, встречаются относительно редко. Обычно потенциал обладает какими-нибудь симметриями, которые облегчают решение. Мы разберем один такой случай.

4.2. Центрально-симметричный потенциал

4.2.1. Сферические координаты

Рассмотрим вращательно-инвариантный потенциал $V(\vec{r}) = V(r)$, где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ — есть длина радиус-вектора в точку (x, y, z) , — такой как потенциал электрического поля атомного ядра, в котором дви-

жутся электроны. Если мы научимся решать стационарное уравнение Шрёдингера для этого потенциала, то сможем и вычислять волновые функции стационарного состояния электрона в атоме.

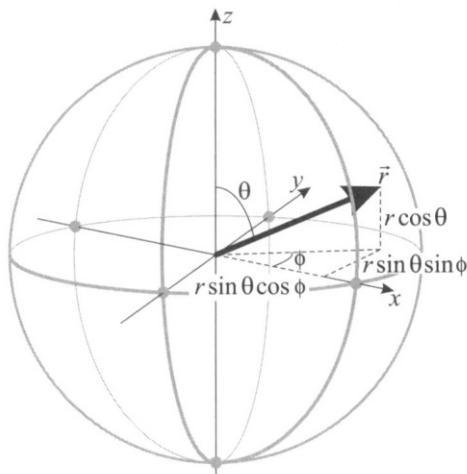


Рис. 4.1. Сферические координаты

Как бы мы рассчитывали классическое движение частицы во вращательно-инвариантном потенциале? Скорее всего, рассмотрели бы две степени свободы такого движения — радиальную и угловую, и отметили, что они в значительной степени отвязаны друг от друга, потому что момент импульса сохраняется. Подобная отвязанность позволила бы нам записать и решить уравнения движения для каждой степени свободы отдельно. Математически это означает, что использование сферических, а не декартовых координат значительно упростило бы вычисления.

В квантовом случае мы применим аналогичную стратегию. Начнем с представления V_{3D} в виде тензорного произведения гильбертовых пространств, связанных со сферическими координатами:

$$V_{3D} = V_r \otimes V_\theta \otimes V_\phi \quad (4.10)$$

при (рис. 4.1)

$$x = r \sin \theta \cos \phi; \quad (4.11a)$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi; \quad (4.11b)$$

$$z = r \cos \theta. \quad (4.11c)$$

Соответственно, волновая функция $\psi(\vec{r})$ становится функцией от r , θ и ϕ . Преимущество перехода к сферическим координатам состоит в том, что центрально-симметричный потенциал при этом станет оператором только в $\mathbb{V}_r$. За это, однако, приходится расплачиваться кинетической энергией. В отличие от декартовой системы координат здесь она не может быть представлена как сумма слагаемых, каждое из которых локально в пределах своего компонента гильбертова пространства. Тем не менее использование такого подхода дает определенное преимущество, которое мы увидим еще до конца текущего раздела.

Чтобы двигаться дальше, нам необходимо ввести правило вычисления скалярных произведений двух состояний, волновые функции которых выражены в сферических координатах. Скалярное произведение в координатном базисе задается уравнением (4.5). Чтобы перевести переменные интегрирования из декартовых координат в сферические, мы должны включить в уравнение якобиан:

$$\langle \psi | \phi \rangle \stackrel{(4.5)}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}) dx dy dz = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \psi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}) |J| dr d\theta d\phi,$$

абсолютное значение которого задается формулой

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial x}{\partial \phi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \phi} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \phi} \end{vmatrix} = r^2 \sin \theta. \quad (4.12)$$

Для скалярного произведения (4.5) мы, таким образом, должны записать

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \psi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi. \quad (4.13)$$

Упражнение 4.6. Докажите второе равенство в уравнении (4.12).

Традиционно принято объединять два гильбертовых пространства, связанных с угловым движением, в единое пространство тензорных произведений $\mathbb{Y} \equiv \mathbb{V}_\theta \otimes \mathbb{V}_\phi$, так что

$$\mathbb{V}_{3D} = \mathbb{V}_r \otimes \mathbb{Y}. \quad (4.14)$$

Отступление 4.1. Нормирование в гильбертовых пространствах в сферических координатах

Дополнительный множитель $r^2 \sin \theta$ в уравнении (4.13) может вызвать вопросы. Мы вывели соотношение (3.6) и его многомерный аналог (4.5) из фундаментальных принципов, поэтому, казалось бы, скалярное произведение двух состояний, выраженных в *любом* непрерывном базисе, должно иметь одинаковый вид, без всяких дополнительных множителей. Объяснение заключается в том, что уравнение (3.6) было выведено с использованием правила нормирования (3.1a) для координатных собственных состояний. Собственные состояния трех сферических наблюдаемых не обязаны следовать этому правилу, поскольку обладают другими свойствами. Например, сферические координаты могут принимать значения из ограниченных диапазонов: $r \in [0, +\infty)$, $\theta \in [0, \pi]$, $\phi \in [0, 2\pi)$, в отличие от координаты x , значения которой лежат в диапазоне от $-\infty$ до $+\infty$.

Подробное исследование данного вопроса завело бы нас от физики слишком глубоко в математические дебри, поэтому мы не будем этим заниматься. Однако вы можете попробовать поработать самостоятельно, в порядке тренировки. Для этого вам потребуется определить скалярные произведения собственных состояний в сферических координатах $\langle r_1 | r_2 \rangle$, $\langle \theta_1 | \theta_2 \rangle$, $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle$ и использовать их для получения аналогов соотношений из разд. 3.1, не забывая при этом позаботиться о том, чтобы они согласовывались друг с другом и с уравнением (4.13).

Элементы пространства $\mathbb{V}_r$ представлены волновыми функциями радиуса $R(r)$, тогда как функции двух углов $Y_\lambda(\theta, \phi)$ определяют элементы $\mathbb{Y}$.

Имея (4.13), естественно определить скалярное произведение пространств $\mathbb{V}_r$ и $\mathbb{Y}$ следующим образом:

$$\langle R_1 | R_2 \rangle = \int_0^\infty R_1^*(r) R_2(r) r^2 dr \quad (4.15a)$$

$$\langle Y_1 | Y_2 \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_1^*(\theta, \phi) Y_2(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi, \quad (4.15b)$$

где $R_{1,2}(r)$ и $Y_{1,2}(\theta, \phi)$ — волновые функции произвольных состояний $|R_{1,2}\rangle$ и $|Y_{1,2}\rangle$ в $\mathbb{V}_r$ и $\mathbb{Y}$ соответственно.

Упражнение 4.7. Покажите, что:

- скалярные произведения (4.15) согласуются с определением А.9;
- скалярные произведения (4.15) согласуются с таковым в $\mathbb{V}_{3D}$, согласно определению (2.4) скалярного произведения в пространстве тензорных произведений.

4.2.2. Квантовый момент импульса

Следуя в русле классического подхода к движению во вращательно-инвариантном потенциальном поле, введем теперь понятие квантового *момента импульса* — наблюдаемого, которое определяется как

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}. \quad (4.16)$$

Это векторное произведение, знакомое нам из геометрии и механики. Его можно записать множеством разных способов. Мы можем сделать это для каждого его компонента явно:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y; \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z; \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Или же можно применить символ Леви-Чивиты¹:

$$\hat{L}_j = \epsilon_{jkl} \hat{r}_k \hat{p}_l. \quad (4.19)$$

Здесь мы воспользовались эйнштейновским соглашением, по которому знак суммы опускается, а суммирование по повторяющимся индексам подразумевается (мы будем придерживаться этого соглашения во всей главе).

Упражнение 4.8. Покажите, что оператор момента импульса — эрмитов.

¹ Символ Леви-Чивиты, известный также как антисимметричный единичный тензор третьего ранга, определяется следующим образом:

- Для любых j, k, l значение ϵ_{jkl} меняет знак, как только любые два индекса меняются местами. Следовательно, всякий раз, когда любые два индекса равны, $\epsilon_{jkl} = 0$.
- $\epsilon_{123} \equiv \epsilon_{xyz} = 1$.

В явном виде:

$$\epsilon_{xyz} = 1, \epsilon_{xzy} = -1, \epsilon_{zxy} = 1, \epsilon_{zyx} = -1, \epsilon_{yxz} = 1, \epsilon_{yxz} = -1, \quad (4.18)$$

все остальные $\epsilon_{jkl} = 0$.

Упражнение 4.9^s. Покажите, что оператор момента импульса в координатном базисе представляется так¹:

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right); \quad (4.20)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right);$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Теперь выведем перестановочные свойства оператора момента импульса. Эту задачу значительно упрощает использование символа Леви-Чивиты. Поэтому я рекомендовал бы вам освоиться с этим символом (если вы не знакомы с ним из классической электродинамики). В частности, нам потребуется соотношение из следующего упражнения.

Упражнение 4.10. Покажите, что

$$\varepsilon_{jkl} \varepsilon_{jmn} = \delta_{km} \delta_{ln} - \delta_{kn} \delta_{lm}. \quad (4.21)$$

Упражнение 4.11. Проверьте следующие равенства (для произвольных $j, k \in \{1, 2, 3\}$):

- a) $[\hat{L}_j, \hat{r}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{r}_l$;
- b) $[\hat{L}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{p}_l$;
- c) $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{L}_l$;
- d) $[\hat{L}_j, \hat{r}^2] = 0$;
- e) $[\hat{L}_j, \hat{p}^2] = 0$;
- f) $[\hat{L}_j, \hat{L}^2] = 0$.

Упражнение 4.12. Покажите, что определение (4.16) момента импульса может быть записано как $\hat{\vec{L}} = -\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{r}}$, несмотря на то что наблюдаемые координат и импульса в общем случае не коммутируют.

¹ Как говорилось в разд. 3.3.1 (см. также разд. А.2), символ « $\simeq$ » означает, что уравнение (4.20) применимо к волновым функциям исключительно в координатном базисе. В полном виде уравнение (4.20) выглядело бы так:

$$\langle \vec{r} | \hat{L}_x | \Psi \rangle = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi(\vec{r}),$$

Упражнение 4.13. Покажите, что если потенциал вращательно инвариантен [т.е. $V(\vec{r}) = V(r)$], то:

- каждый компонент $\hat{L}_i$, а также квадрат $\hat{L}^2$ вектора момента импульса коммутирует с гамильтонианом (4.7);
- в любом состоянии $|\psi\rangle$ среднее значение каждого компонента момента импульса сохраняется: $\frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{L}_i | \psi \rangle = 0$.

У этого результата есть прямая классическая аналогия: согласно теореме Эмми Нётер, в центрально-симметричном потенциальном поле момент импульса сохраняется.

Теперь давайте включим наблюдаемое момента импульса в уравнение Шрёдингера.

Упражнение 4.14

- Покажите, что

$$\hat{L}^2 = \hat{r}^2 \hat{p}^2 - (\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}})^2 + i\hbar \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}. \quad (4.22)$$

Как изменится этот результат для классического момента импульса?

- Перепишите стационарное уравнение Шрёдингера (4.8) как

$$\left[\frac{(\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}})^2 - i\hbar \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}}{2M} + \frac{\hat{L}^2}{2M} + \hat{r}^2 V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = \hat{r}^2 E \psi(\vec{r}). \quad (4.23)$$

Уравнение (4.23) благоприятно с точки зрения разделения переменных, о котором говорилось в предыдущем разделе. Действительно, каждое слагаемое в левой части уравнения есть локальный оператор или в $\mathbb{V}_r$, или в $\mathbb{Y}$. Первое слагаемое, например, выражено через оператор $\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}$, классический аналог которого пропорционален проекции импульса на радиус-вектор. Можно ожидать, что эта проекция влияет только на радиальную степень свободы, т.е. представляет собой локальный оператор в $\mathbb{V}_r$. Второе слагаемое — момент импульса — влияет только на вращательную степень свободы: оно локально в $\mathbb{Y}$. Третье слагаемое, разумеется, локально в $\mathbb{V}_r$, если потенциал вращательно инвариантен: $V(\vec{r}) = V(r)$.

Чтобы показать эту разделимость строго, мы должны перевести первые два слагаемых (4.23), которые в настоящий момент известны нам

в декартовых координатах, в сферические. Мы сделаем это, воспользовавшись правилом для замены переменных в частных производных, известным нам из курса анализа функций многих переменных. Вычисления эти несложны, но весьма утомительны, так что если вы не чувствуете себя профессионалом в этом вопросе, то можете при первом прочтении просто бегло просмотреть решение.

Упражнение 4.15*

а) Покажите, что

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}; \quad (4.24a)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}; \quad (4.24b)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}. \quad (4.24c)$$

б) Выведите компоненты оператора момента импульса в сферических координатах из выражений (4.20) для таковых в декартовых координатах:

$$\hat{L}_x \approx i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad (4.25a)$$

$$\hat{L}_y \approx i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad (4.25b)$$

$$\hat{L}_z \approx -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (4.25c)$$

с) Покажите, что

$$\hat{L}^2 \approx -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (4.26)$$

д) Выразите операторы $\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}$ и $(\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}})^2$ в сферических координатах:

$$\vec{r} \cdot \vec{p} \approx -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r}; \quad (4.27)$$

$$(\vec{r} \cdot \vec{p})^2 \approx -\hbar^2 \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + r \frac{\partial}{\partial r} \right). \quad (4.28)$$

Мы видим, что выражения (4.25) для момента импульса в сферических координатах зависят только от θ и ϕ , но не от r , тогда как для оператора $\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}$ все наоборот. Это подтверждает наши интуитивные предполо-

жения: первый оператор в левой части стационарного уравнения Шрёдингера (4.23) локализован в пространстве $\mathbb{V}_r$, а второй — в пространстве $\mathbb{Y}$. Воспользуемся этим фактом, чтобы решить уравнение Шрёдингера.

В упражнении 4.13 мы обнаружили, что эрмитов оператор $\hat{L}^2$ коммутирует с гамильтонианом. Как нам известно (упр. 1.36), два коммутирующих эрмитовых оператора имеют общий собственный базис, в котором оба они принимают диагональный вид. Поэтому, казалось бы, для нахождения энергетических собственных состояний достаточно найти собственные состояния $\hat{L}^2$.

К сожалению, прямолинейно это рассуждение не работает. Проблема в том, что, как мы говорили, $\hat{L}^2$ локализован в $\mathbb{Y}$. Соответственно, собственные состояния эквивалентного ему оператора $\hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{L}^2$ в $\mathbb{V}_{3D}$ задаются формулой $|R\rangle \otimes |\lambda\rangle$, где $|\lambda\rangle$ есть собственное состояние $\hat{L}^2$ в $\mathbb{Y}$, а $|R\rangle$ — произвольное состояние в $\mathbb{V}_r$ (упр. 2.23).

Иными словами, каждое собственное значение λ оператора $\hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{L}^2$ сильно вырождено¹, а значит, нет никакой гарантии, что произвольное состояние вида $|R\rangle \otimes |\lambda\rangle$ автоматически является собственным состоянием гамильтониана. Мы можем сказать лишь, что у гамильтониана *существует* собственный базис, такой что каждый из его элементов имеет вид $|R\rangle \otimes |\lambda\rangle$. Следовательно, наша стратегия должна состоять в том, чтобы *отобрать* из состояний вида $|R\rangle \otimes |\lambda\rangle$ те, что являются собственными состояниями гамильтониана.

Чтобы осуществить отбор, запишем эти состояния в координатном базисе

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_\lambda(\theta, \phi) \tag{4.29}$$

и продемонстрируем следующее.

Упражнение 4.16. Пусть волновая функция вида (4.29) представляет собственное состояние гамильтониана с собственным значением E [т. е. удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера]. Покажите, что для этого необходимо и достаточно, чтобы радиальная часть волновой функции (4.29) удовлетворяла *радиальному уравнению*

¹ Это независимо от того факта, что собственные состояния $\hat{L}^2$ вырождены даже в $\mathbb{Y}$, как мы увидим в следующем разделе.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2Mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\lambda}{2Mr^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r). \quad (4.30)$$

Таким образом, мы разделили задачу на две более простые: привести $\hat{L}^2$ к диагональному виду и решить обыкновенное дифференциальное уравнение (4.30)¹. Более того, только вторую из этих задач требуется решать заново для каждого конкретного потенциала. Первая же задача не зависит от того, о каком потенциале идет речь, поэтому ее понадобится решить лишь однажды. Это и будет нашей целью в следующем разделе.

4.3. Собственные состояния момента импульса

4.3.1. Матричное представление момента импульса

Задача нахождения собственных значений и собственных состояний наблюдаемого $\hat{L}^2$ осложняется следующим обстоятельством.

Упражнение 4.17. Покажите, что в $\mathbb{Y}$ существуют вырожденные собственные значения $\hat{L}^2$.

Подсказка: используйте тот факт, что два наблюдаемых одновременно приводятся к диагональному виду в том и только том случае, если они коммутируют (упр. 1.36), к операторам $\hat{L}^2$, $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$.

Приведенный результат означает, что собственного значения λ может быть недостаточно для однозначной идентификации собственного состояния оператора $\hat{L}^2$. Как нам известно из упр. А.70, каждое λ определяет *подпространство* собственных состояний $\hat{L}^2$, и это подпространство может быть не одномерным. Нам нужно найти базис и размерность для каждого из этих подпространств.

С данной целью введем в картину дополнительное наблюдаемое в $\mathbb{Y}$, которое коммутирует с $\hat{L}^2$. Тогда это наблюдаемое будет иметь с $\hat{L}^2$ общий набор собственных состояний (см. упр. 1.36) и, следовательно, породит ортонормальный собственный базис в каждом λ -подпространстве. В случае удачного выбора этого дополнительного наблюдаемого данные собственные базисы будут невырожденными по отношению к собственному

¹ Этот подход — частный случай метода разделения переменных для решения дифференциальных уравнений в частных производных.

значению μ этого нового наблюдаемого; тогда пара собственных значений λ, μ однозначно идентифицирует состояния.

Традиционно в качестве наблюдаемого, удовлетворяющего этому условию (как мы увидим позже), выбирают $\hat{L}_z$ ¹. Так что наша задача — найти общие собственные состояния $|\lambda\mu\rangle$ $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ ².

Волновые функции состояний $|\lambda\mu\rangle$ можно, в принципе, получить, решив уравнения

$$\begin{aligned}\hat{L}^2|\lambda\mu\rangle &= \lambda|\lambda\mu\rangle, \\ \hat{L}_z|\lambda\mu\rangle &= \mu|\lambda\mu\rangle\end{aligned}$$

в координатном базисе с использованием дифференциальных операторов (4.25с) и (4.26). Однако эта дорога быстро завела бы нас в джунгли громоздкой математики. К счастью, существует и другой путь. Мы можем много узнать об этих состояниях, о соответствующих им собственных значениях и даже о матрицах компонентов оператора момента импульса просто из перестановочных соотношений между этими компонентами. Когда мы получим эти данные, нам все равно понадобится некоторое количество матанализа, чтобы определить волновые функции, но усилий потребуется намного меньше, чем при прямых вычислениях.

Мы будем следовать стратегии, напоминающей метод, которым мы пользовались в подразд. 3.8.2 при работе с гармоническим осциллятором. Начнем с того, что определим аналоги операторов рождения и уничтожения — *повышающий и понижающий операторы* (raising and lowering operators, иногда также называемые *лестничными*) — как

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \quad (4.31a)$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y. \quad (4.31b)$$

Упражнение 4.18. Покажите, что:

- $\hat{L}_- = \hat{L}_+^\dagger$;
- $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$, $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$, $[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z$;
- $\hat{L}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z$.

¹ С тем же успехом мы могли бы выбрать $\hat{L}_x$ или $\hat{L}_y$. Несколько примеров такого рода мы увидим позже в этом разделе.

² Обозначение $|\lambda\mu\rangle$ может ошибочно навести на мысль, что данное состояние представляет собой тензорное произведение. Конечно, это не так: $|\lambda\mu\rangle$ есть элемент единственного гильбертова пространства $\mathcal{Y}$.

Упражнение 4.19. Пусть некоторое состояние $|\lambda\mu\rangle$ есть общее собственное состояние $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$. Покажите, что тогда:

- состояние $\hat{L}_+|\lambda\mu\rangle$ также является общим собственным состоянием этих операторов с собственными значениями $\lambda, \mu + \hbar$;
- состояние $\hat{L}_-|\lambda\mu\rangle$ также является общим собственным состоянием этих операторов с собственными значениями $\lambda, \mu - \hbar$.

Подсказка: попробуйте применить тот же подход, что и в упр. 3.61.

Данное упражнение показывает, что состояния $\hat{L}_+|\lambda\mu\rangle$ и $\hat{L}_-|\lambda\mu\rangle$ пропорциональны нормированным состояниям $|\lambda, \mu + \hbar\rangle$ и $|\lambda, \mu - \hbar\rangle$ соответственно. В следующем упражнении мы найдем коэффициент пропорциональности.

Упражнение 4.20. Покажите, что, пренебрегая произвольным фазовым множителем,

$$\hat{L}_+|\lambda\mu\rangle = \sqrt{\lambda - \mu(\mu + \hbar)}|\lambda, \mu + \hbar\rangle; \quad (4.32a)$$

$$\hat{L}_-|\lambda\mu\rangle = \sqrt{\lambda - \mu(\mu - \hbar)}|\lambda, \mu - \hbar\rangle. \quad (4.32b)$$

Подсказка: используя упр. 4.18, с), найдите $\langle\lambda\mu|\hat{L}_+\hat{L}_-|\lambda\mu\rangle$ и $\langle\lambda\mu|\hat{L}_-\hat{L}_+|\lambda\mu\rangle$ и согласуйте результат с утверждениями, доказанными в упр. 4.19.

Упражнение 4.21. Покажите, что μ^2 не может быть больше λ .

Упражнение 4.22. Покажите, что утверждение, содержащееся в упр. 4.21 может выполняться, только если $\lambda = \hbar^2 l(l + 1)$ и $\mu = \hbar m$ при том, что:

- l есть неотрицательное целое или полуцелое число $(0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots)$;
- для заданного $l, m \in \{-l, -l + 1, \dots, l - 1, l\}$.

Подсказка: примените ту же логику, что и в подразд. 3.8.2, где мы доказывали, что собственные значения оператора числа квантов гармонического осциллятора должны быть целыми.

Это один из основных результатов данного раздела. Если мы пытаемся измерить наблюдаемое $\hat{L}^2$ в некотором состоянии, то мы можем получить только значения $\hbar^2 l(l + 1)$, где $l \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\}$. Далее если мы сначала приготовим нашу систему в состоянии с заданным $\hat{L}^2$ (например, измерив его), а затем произведем измерение наблюдаемого

$\hat{L}_z$, то мы получим одно из $2l + 1$ возможных значений в диапазоне от $-\hbar l$ до $\hbar l$ с шагом $\hbar$. Мы видим, что, как и говорилось в начале этого раздела, собственные значения $\hat{L}^2$ вырождены, и степень вырождения (число ортогональных собственных состояний, соответствующих одному и тому же собственному значению) составляет $2l + 1$.

В дальнейшем мы будем использовать нотацию $|lm\rangle$ вместо $|\lambda\mu\rangle$ для обозначения общих собственных состояний $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ с собственными значениями $\lambda = \hbar^2 l(l + 1)$ и $\mu = \hbar m$ соответственно. В контексте движения материальной точки значение l называется *орбитальным квантовым числом*¹, а m — *магнитным квантовым числом*.

Упражнение 4.23[§]. Покажите, что уравнения (4.32) можно переписать следующим образом:

$$\hat{L}_+ |lm\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m+1\rangle = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m+1\rangle; \quad (4.33a)$$

$$\hat{L}_- |lm\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} |l, m-1\rangle = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |l, m-1\rangle. \quad (4.33b)$$

Обратите внимание, что упр. 4.22 устанавливает только необходимые условия для существования общих собственных состояний $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ с заданными собственными значениями. Мы пока не знаем, существует ли собственное состояние для заданной пары (l, m) , даже если она удовлетворяет приведенным условиям, и является ли это собственное состояние единственным. Мы обратимся к данному вопросу в следующем разделе. Пока же просто примем единственность и существование состояний $|lm\rangle$ как факт. Из этого будет следовать, что они согласно спектральной теореме (упр. А.60) образуют ортонормальный базис в $\mathbb{Y}$. В контексте физики момента импульса мы будем называть базис $\{|lm\rangle\}$ *каноническим*.

Упражнение 4.24. Покажите, что элементы матрицы $\langle lm | \hat{A} | l'm' \rangle$, где $\hat{A} = \hat{L}^2$, $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$, обнуляются всякий раз, когда $l \neq l'$, не вычисляя их в явном виде.

Согласно приведенному результату, матрицы всех компонентов $\hat{L}$, как и $\hat{L}^2$, имеют структуру, показанную в табл. 4.1. Это блочно-диагональная матрица, каждый блок которой описывает оператор момента

¹ Иногда орбитальное квантовое число l называют просто «момент импульса». Этот термин используется в профессиональном жаргоне, чтобы подчеркнуть, что значение $\hbar l$ есть квантовый эквивалент классического абсолютного значения вектора момента импульса.

импульса в пределах подпространства гильбертова пространства $\mathbb{Y}$, связанного с каким-то конкретным значением l . Размер каждого блока составляет $(2l + 1) \times (2l + 1)$. В каждом блоке значения m традиционно располагаются в порядке *уменьшения*.

Таблица 4.1. Структура матриц компонентов оператора момента импульса (упр. 4.25) (в затемненных клетках могут располагаться ненулевые матричные элементы)

	l'	0	1/2	1	3/2	
l	$\begin{matrix} m' \\ m \end{matrix}$	0	$\frac{1}{2} \quad -\frac{1}{2}$	1 0 -1	$-\frac{1}{2} \quad -\frac{1}{2} \quad -\frac{3}{2}$	
0	0					
1/2	$\begin{matrix} 1/2 \\ -1/2 \end{matrix}$					
1	$\begin{matrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix}$					
3/2	$\begin{matrix} 3/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \\ -3/2 \end{matrix}$					

Упражнение 4.25. Найдите элементы матрицы $\langle lm | \hat{A} | l'm' \rangle$, где $\hat{A} = \hat{L}^2, \hat{L}_\pm, \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$.

Упражнение 4.26^s. Выпишите матрицы из упр. 4.25 в явном виде для подпространств гильбертова пространства, связанных с:

- a) $l = 1/2$,
- b) $l = 1$.

Ответ:

$$\begin{aligned}
 \text{a) } \hat{L}_x &\simeq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{L}_y \simeq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\
 \hat{L}_z &\simeq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{L}^2 \simeq \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}
 \tag{4.34}$$

$$\begin{aligned}
 \text{б) } \hat{L}_x &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{L}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \\
 \hat{L}_z &= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \hat{L}^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{4.35}$$

Убедитесь в обоих случаях, что матрицы момента импульса подчиняются уравнению $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \hat{L}^2$.

Обратите внимание, что матрицы момента импульса для подпространства $l = 1/2$ пропорциональны матрицам Паули [см. (1.7)]. Это тождество объясняет физику, которая стоит за индексами x , y и z , присваиваемыми нами этим матрицам на протяжении всего курса.

Упражнение 4.27. Предположим, вы производите измерения компонентов x или y момента импульса некоторой частицы.

а) Какие возможные значения могут быть получены при измерении, если известно, что частица приготовлена в состоянии s :

1) $l = 1/2$,

2) $l = 1$?

Ответ:

1) $\{\hbar/2, -\hbar/2\}$,

2) $\{\hbar, 0, -\hbar\}$.

б) Найдите состояния, в которые схлопнется состояние частицы, выразив их в каноническом базисе.

Результат последнего упражнения — то, что собственные значения $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$ ложатся в диапазон от $-\hbar l$ до $\hbar l$ с шагом $\hbar$, — не удивителен. Хотя мы выбрали $\hat{L}_z$ для помощи в поиске базиса $\mathbb{Y}$, в оси z , если говорить о физических свойствах, нет ничего необычного. Пространство изотропно, так что наблюдаемые $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$ ведут себя при квантовых измерениях точно так же, как $\hat{L}_z$. Более того, эти же свойства наблюдались бы и в том случае, если бы мы рассматривали проекцию момента импульса на любую произвольную ось.

Упражнение 4.28. Пусть наблюдаемое $\hat{L}_{\theta\phi}$ определено проекцией момента импульса на единичный вектор $\hat{R}_{\theta\phi}$, характеризующий сфе-

рическими углами (θ, ϕ) . Ограничьте свой анализ подпространством с $l = 1/2$.

- а) Покажите, что собственные значения $\hat{L}_{\theta\phi}$ равны $\pm\hbar/2$, и найдите соответствующие собственные состояния в каноническом базисе.

Подсказка: найдите матрицу оператора

$$\hat{L}_{\theta\phi} = \sin\theta\cos\phi\hat{L}_x + \sin\theta\sin\phi\hat{L}_y + \cos\theta\hat{L}_z \text{ в каноническом базисе.}$$

- б) Найдите средние значения $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ в этих состояниях и покажите, что они пропорциональны проекциям вектора $\vec{R}_{\theta\phi}$ на соответствующие координатные оси.

Ответ:

$$(\langle L_x \rangle, \langle L_y \rangle, \langle L_z \rangle) = \pm \frac{\hbar}{2} \vec{R}_{\theta\phi} \text{ для собственных значений } \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (4.36)$$

Перед тем как закончить разговор о матрицах момента импульса, кратко коснемся принципа неопределенности Гейзенберга.

Упражнение 4.29. Найдите математические ожидания и дисперсии операторов $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$ в состоянии $|lm\rangle$. Проверьте принцип неопределенности. Превращается ли неравенство в равенство для каких-либо значений l или m ?

Ответ:

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0;$$

$$\langle \Delta L_x^2 \rangle = \langle \Delta L_y^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m^2].$$

Принцип неопределенности принимает вид

$$\langle \Delta L_x^2 \rangle \langle \Delta L_y^2 \rangle \geq \frac{\hbar^4}{4} m^2.$$

Полезно взглянуть на принцип неопределенности для состояний с $m = \pm l$, таких что L_z принимает максимально возможное значение для данного L^2 . В классическом варианте это подразумевало бы, что $L_x^2 = L_y^2 = 0$. Но в квантовом случае $\langle L_z^2 \rangle = l^2 \hbar^2$, что меньше, чем $\langle L^2 \rangle = l(l+1) \hbar^2$. Следовательно, остается некий «люфт» для x - и y -компонентов момента импульса: $\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \langle \hat{L}_y^2 \rangle = (\langle \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \rangle) / 2 = \hbar^2 [l(l+1) - l^2] / 2 = \hbar^2 l / 2$. Это гарантирует выполнение принципа неопределенности для данных компонентов.

4.3.2. Волновые функции собственных состояний момента импульса

Замечательно, что все выведенное в предыдущем подразделе — а вывели мы немало — следует исключительно из перестановочных соотношений между компонентами момента импульса, которые мы вывели в упр. 4.11. Помимо упомянутых соотношений, мы не использовали непосредственно ни определение этого наблюдаемого, ни какие бы то ни было его физические свойства. Но сейчас наша цель — найти волновые функции состояний $|lm\rangle$. И здесь нам уже не обойтись без явных выражений для операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ в координатном базисе, которые мы вычислили в упр. 4.15.

Упражнение 4.30. Покажите, что волновая функция любого собственного состояния оператора $\hat{L}_z$ с собственным значением m должна иметь вид

$$T(\theta) e^{im\phi}. \quad (4.37)$$

Упражнение 4.31^s. Покажите, что операторы повышения и понижения в координатном базисе задаются выражениями

$$\hat{L}_+ \approx \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right); \quad (4.38a)$$

$$\hat{L}_- \approx \hbar e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \quad (4.38b)$$

Подсказка: воспользуйтесь уравнениями (4.25) и (4.31).

Упражнение 4.32. Покажите методом математической индукции, что волновые функции состояний $|lm\rangle$ задаются *сферическими гармониками*¹

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \mathcal{N}_l \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \sin^{-m} \theta \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} \sin^{2l} \theta e^{im\phi}, \quad (4.39)$$

¹ Стандартное определение сферических гармоник использует связанные полиномы Лежандра. Однако в нашем определении, позаимствованном из книги R. Shankar. Principles of quantum mechanics (Kluwer, 1990), эти полиномы не задействованы, поэтому оно менее громоздко. Этот вид определения соответствует договоренности, которая чаще всего используется в квантовой механике.

где

$$N_l = (-1)^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{1}{2^l l!} \quad (4.40)$$

есть коэффициент нормирования¹, посредством следующих шагов.

- а) Если применить оператор повышения к состоянию $|lm\rangle$ при $m = l$, должен получиться нуль, согласно (4.33а). Убедитесь, что это верно для волновой функции $Y_l^l(\theta, \phi)$ состояния $|ll\rangle$, задаваемой уравнением (4.39).
- б) Убедитесь в верности нормирующего множителя (4.40).

Подсказка:

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx = \frac{2^{2l+1} (l!)^2}{(2l+1)!}. \quad (4.41)$$

- в) Примените оператор $\hat{L}^2$, который в координатном базисе задается уравнением (4.26), к $Y_l^l(\theta, \phi)$, чтобы убедиться, что эта функция представляет собственное состояние $\hat{L}^2$ с собственным значением $l(l+1)\hbar^2$.
- г) Пусть волновая функция состояния $|lm\rangle$ задается уравнением (4.39) при некотором m . Примените оператор понижения (4.38б), чтобы показать, что уравнение (4.39) задает также волновую функцию состояния $|l, m-1\rangle$.

Обратите внимание: достаточно проверить, что $Y_l^m(\theta, \phi)$ нормирована и является собственной волновой функцией $\hat{L}^2$ только при $m = l$, что было сделано в частях (б) и (с). Это так потому, что, согласно (4.33), мы уже знаем: оператор понижения сохраняет как собственное значение $\hat{L}^2$, так и нормирование (с множителем $\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$).

Упражнение 4.33[§]. Вычислите явно сферические гармоники для всех возможных значений m , которые допустимы при $l = 0$ и $l = 1$.

Ответ:

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}};$$

$$Y_1^1(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\phi};$$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta;$$

¹ Множитель $(-1)^l$ в уравнение (4.40) добавляется по соглашению.

$$Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}.$$

Абсолютные величины сферических гармоник вплоть до $l = 2$ показаны на рис. 4.2. В соответствии с тем, что мы выяснили в упр. 4.30, эти абсолютные значения не зависят от ϕ и, следовательно, аксиально симметричны.

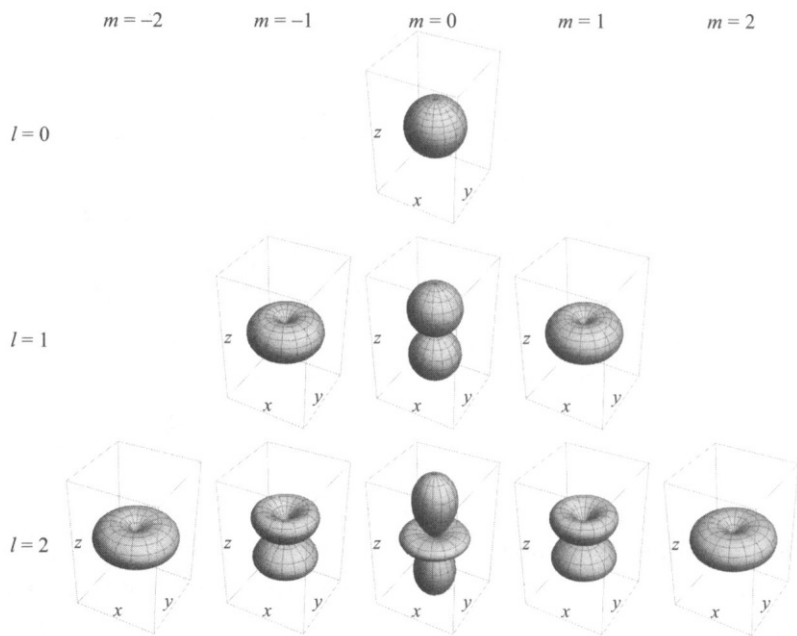


Рис. 4.2. Абсолютные величины сферических гармоник для первых трех значений l , построенные как радиусы, зависящие от сферических углов θ и ϕ

Ранее в этом разделе — когда мы выводили условия физически разрешенных значений l и m — я упоминал, что это лишь необходимые условия и не все они могут реализовываться. Вычислив в явном виде волновые функции состояний $|lm\rangle$, мы доказали существование (и единственность) этих состояний, но только для целых l и m . Действительно, сферические гармоники содержат множитель $e^{im\phi}$. При полуцелом l квантовое число m тоже полуцелое, и такой множитель дает $\psi(r, \theta, \phi) = -\psi(r, \theta, \phi + 2\pi)$, а это невозможно. Поэтому точечная частица в радиально-симметричном поле должна иметь целое орбитальное квантовое число.

4.3.3. Спин

Частицы могут иметь «встроенный» момент импульса — *спин* $\hat{S}$. Визуально его можно представить как вращение частицы вокруг своей оси — в отличие от «орбитального» движения точечной частицы во внешнем поле, которое мы изучали до сих пор. Спиновая степень свободы подчиняется правилам для собственных состояний момента импульса, выведенных в подразд. 4.3.1. В частности, возможные собственные значения наблюдаемого $\hat{S}^2$ задаются формулой $s(s+1)\hbar^2$, где s — неотрицательное целое или полуцелое число¹. Поскольку спиновая степень свободы не имеет представления в координатном базисе, s имеет право принимать полуцелые значения.

Конкретное значение s определяется природой частицы, на него невозможно повлиять внешними средствами. Скажем, электроны, протоны и нейтроны имеют $s = \frac{1}{2}$, тогда как у фотонов $s = 1$.

Физики иногда используют термин «спин» для обозначения именно этого значения s — точно так же, как они используют термин «момент импульса» для обозначения значения l — несмотря на то, что эти значения не представляют реальных абсолютных величин $\hat{S}$ или $\hat{L}$. Например, говорят, что спин электрона равен $1/2$.

Частицы с полуцелым спином называются *фермионами*, а с целым — *бозонами*. Согласно *принципу запрета Паули*, два идентичных фермиона не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии. Этот принцип крайне важен для многих физических явлений, например, для периодического закона химических элементов (подразд. 4.4.3). Однако физические причины, стоящие за принципом Паули, требуют понимания квантовой электродинамики и потому выходят за рамки данного курса.



Вольфганг Паули

Компонент $\hat{S}_z$ наблюдаемого спина вдоль оси z имеет собственные значения, заданные $m_s\hbar$, где $m_s \in \{-s, \dots, s\}$ называется *спиновым квантовым числом*. В отличие от числа s , значения проекции спинового оператора частицы на конкретную ось не определяются природой частицы. Мы можем приготовить состояния спина с любыми значени-

¹ В применении к спину вместо l обычно используется символ s . Символ l зарезервирован для обозначения орбитального момента импульса.

ями m_s из диапазона, разрешенного спином частицы, а также произвольные их суперпозиции.

4.4. Атом водорода

4.4.1. Радиальные волновые функции

В разделе 3.5 я упоминал, что одним из основных мотивов нашего интереса к стационарному уравнению Шрёдингера является то, что оно позволяет нам получить энергетические уровни электронов в атомах. Поскольку переходы между энергетическими уровнями связаны с поглощением или испусканием оптического фотона, эти теоретические расчеты можно непосредственно проверить экспериментально. Теперь мы вооружены знаниями и можем рассчитать энергетические уровни и соответствующие им волновые функции атома водорода. Точное совпадение результатов этих расчетов с экспериментальными данными по эмиссионному спектру атомарного водорода стало одним из самых значительных триумфов квантовой механики (см. отступление 3.2).

В атоме водорода электрон движется в электростатическом потенциале, создаваемом тяжелым ядром:

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}, \quad (4.42)$$

где e — заряд электрона, а ϵ_0 — электрическая постоянная (мы пользуемся системой СИ). Следовательно, задача об атоме водорода представляет собой частный случай движения в центральном поле. Поэтому мы можем воспользоваться стратегией, изложенной в подразд. 4.2.2, а именно искать энергетическую собственную волновую функцию в виде произведения (4.29). В этом произведении, как мы теперь знаем, $\lambda = \hbar^2 l(l+1)$, а угловой компонент волновой функции $Y_{\lambda}(\theta, \phi) = Y_l^m(\theta, \phi)$ — одна из сферических гармоник, так что мы можем переписать его как

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{El}(r) Y_l^m(\theta, \phi). \quad (4.43)$$

Все, что нам теперь нужно сделать, — это найти радиальный компонент, который мы обозначили $R_{El}(r)$.

Упражнение 4.34^s. Напишите радиальное уравнение (4.30) для атома водорода.

Ответ:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right] R_{El}(r) = ER_{El}(r). \quad (4.44)$$

Хотя это обыкновенное дифференциальное уравнение, решить его довольно трудно. Первый шаг в его упрощении — простая замена переменной.

Упражнение 4.35. Переопределите

$$R_{El}(r) = U_{El}(r)/r \quad (4.45)$$

и перепишите (4.44) для $U_{El}(r)$.

Ответ:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right] U_{El}(r) = EU_{El}(r). \quad (4.46)$$

Распространенный подход при решении дифференциальных уравнений — попытаться угадать общий вид решения, а затем подогнать его параметры так, чтобы они удовлетворяли уравнению. В данном случае мы попробуем искать решение в виде

$$U_{El}(r) = \sum_{j=l+1}^n A_j r^j e^{-\kappa r}, \quad (4.47)$$

где n — некоторое натуральное число, $A_{l+1} \neq 0$ и

$$\kappa = \sqrt{-2ME} / \hbar. \quad (4.48)$$

Следующее упражнение поможет понять, как мы пришли к этой догадке.

Упражнение 4.36. Покажите, что асимптотическое поведение $U_{El}(r)$, заданное приведенным выше уравнением, согласуется с (4.46) при $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$.

А теперь найдем коэффициенты A_j и верхний предел суммирования в (4.47).

Упражнение 4.37. Покажите, что для выполнения уравнения (4.46) должно удовлетворяться следующее соотношение:

$$\left[2\kappa j - \frac{2}{a} \right] A_j + [l(l+1) - j(j+1)] A_{j+1} = 0, \quad (4.49)$$

где

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{Me^2} \approx 0,53 \text{ \AA}. \quad (4.50)$$

Последняя величина имеет размерность длины и известна как *боровский радиус*. Его физический смысл мы вскоре выясним.

Из (4.49) мы знаем, что $A_{j+1}/A_j \rightarrow 2\kappa/j$ при больших j . Если бы ряд (4.47) с таким свойством был бесконечен ($n = \infty$), то он расходился бы. И действительно, в пределе при $j \rightarrow \infty$ мы имели бы $A_j \sim (2\kappa)^j/j!$ и, следовательно, при $r \rightarrow \infty$

$$U_{El}(r) \sim \sum_j \frac{(2\kappa r)^j}{j!} e^{-\kappa r} \rightarrow e^{2\kappa r} e^{-\kappa r} = e^{\kappa r},$$

где мы воспользовались разложением экспоненты в ряд Тейлора. Как нам известно, волновая функция, которая стремится к бесконечности, нефизична.

Для предотвращения этого мы должны потребовать, чтобы ряд был конечен. Данное условие выполняется, если множитель перед A_j в (4.49) обнуляется при некотором $j = n$. В этом случае

$$2\kappa n = \frac{2}{a} \quad (4.51)$$

и все A_j при $j > n$ обнуляются.

Упражнение 4.38. Вычислите радиальные волновые функции $R_{nl}(r)$ атома водорода при

- а) $n = 1, l = 0$;
- б) $n = 2, l = 0$;
- в) $n = 2, l = 1$.

Пронормируйте эти волновые функции согласно $\int |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = 1$.

Подсказка:

$$\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n! \quad (4.52)$$

Ответ (рис. 4.3):

$$R_{10}(r) = 2a^{-3/2} e^{-r/a}; \quad (4.53)$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a} \right) e^{-r/2a}; \quad (4.54)$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}} a^{-5/2} r e^{-r/2a}. \quad (4.55)$$

Теперь мы понимаем физический смысл боровского радиуса: он определяет характерный размер волновых функций энергетических собственных состояний, а также примерный радиус орбитали основного состояния.

4.4.2. Энергетический спектр и переходы

Объединяя уравнения (4.48) и (4.51), получаем

$$E_n = -\frac{1}{2M} \left(\frac{\hbar}{na} \right)^2 = - \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{M}{2n^2\hbar^2}. \quad (4.56)$$

Этот результат отмечает важную веху: мы рассчитали энергетический спектр атома водорода¹.

Интересно, что, хотя радиальные волновые функции зависят от орбитального квантового числа l , энергетические собственные значения (4.56) от него не зависят, а определяются верхним пределом n суммы (4.47). Поэтому n называется *главным квантовым числом*.

Каждый энергетический уровень, обозначаемый величиной n , вырожден по отношению к орбитальному квантовому числу l , которое может принимать любое целое значение от 0 до $n - 1$. Но реальная вырожденность энергетических уровней еще выше. Чтобы убедиться в этом, вспомним, что волновая функция (4.43) электрона в атоме водорода имеет в дополнение к радиальной угловую часть. Угловая часть волновой функции зависит от магнитного квантового числа m , которое не влияет на энергию. Кроме того, каждый электрон имеет спиновую степень свободы, соответствующую двумерному гильбертову пространству.

Упражнение 4.39. Покажите, что степень вырождения энергетического уровня с главным квантовым числом n равна $2n^2$.

Прежде чем продолжить, введем следующее соглашение. Поскольку главное, орбитальное и магнитное квантовые числа определяют состояние движения электрона в атоме, мы будем обозначать это состояние $|nlm\rangle$ и перепишем уравнение (4.43) следующим образом:

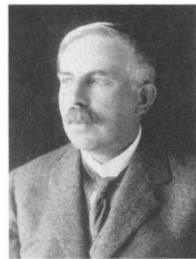
$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi). \quad (4.57)$$

¹ Энергии отрицательны, как и ожидалось для связанных состояний.

Отступление 4.2. Модель атома: краткая история

Хотя идея атома восходит еще к древнегреческим философам (само слово «атом» имеет греческое происхождение и означает «неделимый»), его первую физическую модель предложил в 1904 г. Дж. Дж. Томсон вскоре после совершенного им же открытия электрона. Он предположил, что отрицательно заряженные электроны размещаются внутри комка положительно заряженного вещества, как изюминки в пудинге.

Гипотеза Томсона была опровергнута при помощи экспериментов, проведенных Эрнестом Резерфордом; в этих экспериментах металлическая фольга подвергалась бомбардировке альфа-частицами. Резерфорд с коллегами обнаружил, что хотя большая часть частиц пролетала сквозь фольгу так, будто ее там не было, очень небольшая их доля (~1/8000) отражалась назад. Резерфорд интерпретировал это наблюдение как свидетельство того, что положительные заряды в атоме сосредоточены в крохотных, но тяжелых ядрах. После этого, в 1911 г., Резерфорд предложил планетарную модель атома*, согласно которой электроны обращаются вокруг ядер примерно так же, как планеты вокруг Солнца. Легенда гласит, что однажды утром Резерфорд, войдя в лабораторию, громко объявил: «Теперь я знаю, как выглядит атом!»



Эрнест Резерфорд

У модели Резерфорда, однако, был серьезный недостаток, который сам ученый и его коллеги сразу же осознали. Обращаясь вокруг ядра, электрон должен создавать вокруг себя переменные электрическое и магнитное поля, порождая тем самым электромагнитную волну, которая должна будет унести с собой часть энергии электрона. В результате частица упадет на ядро в течение пикосекунд.

Резерфорд попросил своего сотрудника, молодого теоретика Нильса Бора, разрешить это противоречие. Не прошло и двух лет, как Бор нашел для него частичное решение**. Он постулировал существование дискретного множества «стационарных» орбит, на которых электрон может находиться, ничего при этом не излучая. А именно, орбита является стационарной, если ее момент импульса равен целому числу постоянных Планка $\hbar$:



Нильс Бор

$$pr = n\hbar. \quad (4.58)$$

Если электрон переходит с одной стационарной орбиты на другую, он излучает или поглощает фотон, энергия которого равна разности энергий между уровнями. Спектр оптических переходов атома водорода, рассчитанный Бором на основании предложенной им модели (см. упр. 4.41), вполне укладывался, как оказалось, в формулу Ридберга (4.61), которая к тому моменту уже была известна эмпирически (см. отступление 4.3), и демонстрировал прекрасное совпадение с экспериментальными данными.

Недостатком модели Бора была ее чисто эмпирическая природа. Хотя эта модель и объясняла экспериментальные результаты, физика, лежащая в ее основе, оставалась загадкой. Некоторый свет на эту физику пролил Луи де Бройль в 1924 г. Он применил модель Бора с концепцией материальной волны (см. отступление 3.2 и упр. 4.42). В последующие годы модель атома претерпела множество доработок, самую известную из которых осуществил Вольфганг Паули в 1926 г., и постепенно приобрела современный вид, который мы сегодня и изучаем.

* E. Rutherford, *The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom*, Philosophical Magazine **21**, 669 (1911).

** N. Bohr, *On the Constitution of Atoms and Molecules*, Philosophical Magazine **26**, 1–24 and 476–502 (1913).

До сих пор мы считали, что ядро является бесконечно тяжелым, так что электрон движется в стационарном потенциальном поле (4.42). Но учесть конечную массу ядра тоже несложно. Как нам известно из классической механики, задача двух тел может быть сведена к задаче о движении единственной частицы в системе отсчета, связанной с центром масс, *приведенная масса* (reduced mass) которой

$$M = \frac{M_e}{1 + M_e / M_p},$$

где M_e и M_p в нашем случае массы покоя электрона и ядра (протона). Эта приведенная масса меньше массы электрона на $1/1836$.

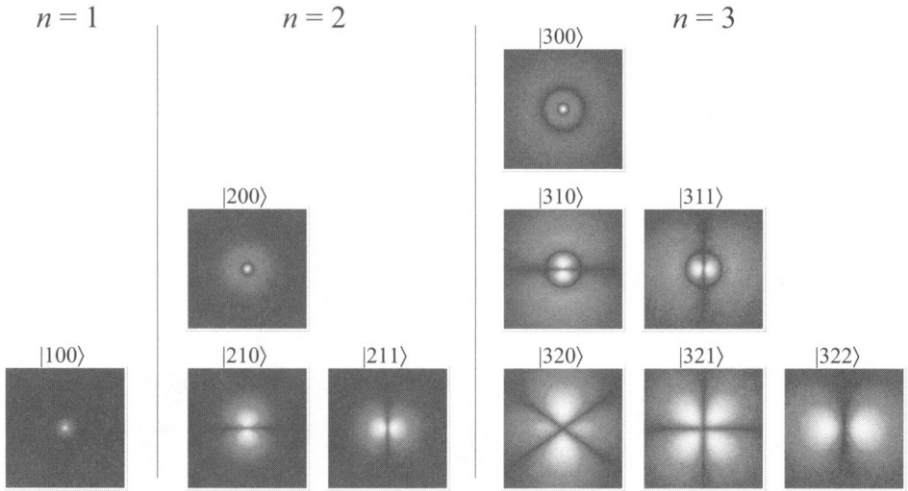


Рис. 4.3. Абсолютные величины волновых функций низлежащих минимальных собственных состояний $|nlm\rangle$ атома водорода. Показаны сечения в плоскости x - z ; диапазон от $-20a$ до $20a$ в обоих направлениях.

Уравнение (4.56), устанавливающее энергетические уровни атома водорода, может быть записано в виде

$$E_n = -\frac{1}{1 + M_e / M_p} \frac{\text{Ry}}{n^2}, \quad (4.59)$$

где

$$\text{Ry} = -\frac{e^4 M_e}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \approx 2,17987217 \times 10^{-18} \text{ J} \approx -13,6056925 \text{ эВ} \quad (4.60)$$

есть *постоянная Ридберга*. Это одна из наиболее значительных и наиболее точно измеренных фундаментальных физических констант. Поскольку водород во Вселенной встречается всюду, его излучение приходит на Землю от самых разных астрономических объектов. Часть этого излучения возникла на ранних стадиях существования Вселенной. Измеряя его спектр, мы можем выяснить, изменилось ли значение постоянной Ридберга и, следовательно, фундаментальные законы физики за время жизни Вселенной.

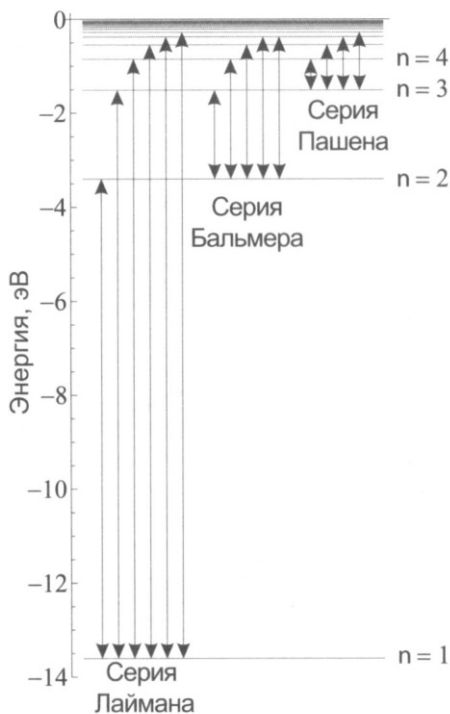


Рис. 4.4. Энергетический спектр атома водорода

Упражнение 4.40. Используя постулат Бора о том, что переход между атомными уровнями сопровождается поглощением или излучением фотона, энергия которого равна разнице между энергиями уровней, выведите уравнение (известное как *формула Ридберга*) для длин волн линий, наблюдаемых в спектре водорода:

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = \frac{1}{1 + M_e / M_p} \text{Ry} \left| \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right|, \quad (4.61)$$

где n_1 и n_2 — положительные целые числа.

Отступление 4.3. Открытие Бальмера

Открытие формулы Ридберга достойно отдельного рассказа. Частный случай при $n_1 = 2$, $n_2 \geq 3$ открыл *Йоганн Бальмер* еще в 1885 г., почти за 30 лет до рождения модели Бора (отступление 4.2). Примечательно, что Бальмер даже не был физиком; он преподавал математику в швейцарской школе. Очевидно, в качестве хобби Бальмер изучал данные о солнечном спектре, которые опубликовал в 1868 г. *Андерс Йонас Ангстрём*. Эти данные включали в себя следующий набор линий, которые приписывались атомарному водороду:

656,3 нм
486,1 нм
434,0 нм
410,2 нм

Движимый исключительно глубокой убежденностью в том, что миром правит математическая гармония, Бальмер занялся ее поиском и нашел в этом наборе чисел закономерность. Его выражение для этой закономерности было похоже на (4.61), за исключением того, что n_1 равнялось двум. Тремя годами позже, в 1888 г., шведский физик *Йоганн Ридберг* узнал о формуле Бальмера и обобщил ее, распространив на другие значения n_1 .

Понятно, что серия линий, которая теперь носит имя Бальмера, была открыта первой потому, что она целиком лежит в пределах видимого спектра. Примерно через 20 лет *Теодор Лайман* и *Фридрих Пашен* измерили две серии, соответствующие $n_1 = 1$ и $n_1 = 3$, в ультрафиолетовом и инфракрасном диапазонах соответственно. Обе эти серии прекрасно легли в формулу Ридберга.



Йоганн Якоб Бальмер

Оцените численно диапазоны экспериментально наблюдаемых длин волн переходов серий Лаймана ($n_2 = 2, 3, 4, \dots \rightarrow n_1 = 1$), Бальмера ($n_2 = 3, 4, 5, \dots \rightarrow n_1 = 2$) и Пашена ($n_2 = 4, 5, 6, \dots \rightarrow n_1 = 3$) (рис. 4.4).

Упражнение 4.41. Воспроизведите результат (4.56) для энергетического спектра водорода, пользуясь полуклассической теорией Бора (отступление 4.2). Считая электрон точечным объектом, обращающимся по круговой орбите радиуса r вокруг протона, получите соотношение между орбитальным радиусом и скоростью, исходя из того, что центростремительное ускорение объясняется электростатическим притяжением протона. Затем сведите это соотношение с (4.58) в Отступлении 4.2, чтобы найти параметры орбиты в зависимости от n и определить соответствующие кинетическую и потенциальную энергии.

Упражнение 4.42. Воспроизведите результат (4.56), используя уравнение де Бройля (3.28) в Отступлении 3.2.

Два последних упражнения могут навести на мысль, что полноценная квантовая теория в том виде, в каком она использовалась в предыдущем подразделе, необязательна для описания атома водорода; те же результаты можно получить гораздо более простыми способами. Но на самом деле подходы, предложенные Бором и де Бройлем, имеют ситуативную природу: они дают верную формулу, описывающую одно конкретное наблюдение, но не могут использоваться для надежного предсказания результатов любого другого эксперимента. Даже в пределах физики атома водорода диапазон возможных вопросов выходит далеко за рамки простого перечисления спектральных линий. Ответы на эти вопросы можно найти при помощи квантовой механики, но не методами Бора и де Бройля.

Упражнение 4.43. Для состояния $|n, l = n - 1, m\rangle$ с произвольным главным квантовым числом n :

- Вычислите радиальную волновую функцию.
- Вычислите среднее значение и дисперсию расстояния между электроном и ядром.

Ответ: $\langle r \rangle = an \left(n + \frac{1}{2} \right).$

- Сравните ваш результат с результатом, полученным из модели Бора (упр. 4.41).

Атомы в состояниях с высокими главными квантовыми числами называются *ридберговскими*. Мы видим, что эти атомы очень большие по размеру: радиус орбитали электрона растет как квадрат n . Например, в состоянии с $n = 137$ водород имеет атомный радиус ~ 1 мкм. Ридберговские атомы имеют много интересных свойств, которые делают их объектом интенсивных исследований, особенно в приложении к квантовой информатике.

Упражнение 4.44. Найдите математическое ожидание и неопределенность наблюдаемых $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ в состоянии $|1, 0, 0\rangle$.

Упражнение 4.45. Определите без вычислений, какие из матричных элементов наблюдаемых $\hat{r}_i = \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ в (a) $\langle 1, 0, 0 | \hat{r}_i | 2, 0, 0 \rangle$, (b) $\langle 1, 0, 0 | \hat{r}_i | 2, 1, 0 \rangle$, (c) $\langle 1, 0, 0 | \hat{r}_i | 2, 1, \pm 1 \rangle$ обнуляются.

Подсказка: матричные элементы имеют вид $\int r_i \psi_{nlm}(\vec{r}) \psi_{n'l'm'}(\vec{r}) d^3r$ с волновыми функциями, заданными (4.57). Воспользуйтесь симметриями сферических гармоник, чтобы определить, четной или нечетной функцией является подынтегральное выражение, и найдите, как она зависит от ϕ .

Упражнение 4.46. Вычислите необнуляющиеся элементы матрицы из упр. 4.45 в явном виде.

Предыдущие два упражнения позволяют нам определить, какие переходы между соответствующими состояниями в атоме водорода могут иметь место благодаря взаимодействию с оптическим полем. К примеру, они сообщают нам, можно ли атом в состоянии $|1, 0, 0\rangle$ возбудить до состояния $|2, 1, 1\rangle$ при помощи резонансного лазера, поляризованного вдоль оси x , или, напротив, может ли атом в состоянии $|2, 1, 1\rangle$ испустить фотон, поляризованный вдоль x , и перейти в состояние $|1, 0, 0\rangle$. Дело в том, что механизм взаимодействия свет — атом реализуется через связь между электрическим полем и атомным электрическим диполем, который имеет вид $\vec{d} = e\vec{r}$. Сила этого взаимодействия определяется величиной матричного элемента дипольного момента, связанного с соответствующим переходом.

4.4.3. Периодическая система элементов

Периодический закон, открытый Дмитрием Менделеевым в 1869 г., гласит, что химические свойства элементов проявляют периодическую зависимость от заряда их атомных ядер¹. Мы можем до некоторой степени понять периодический закон, обобщив физику атома водорода на другие элементы.

В нормальном состоянии атомы нейтральны, так что электронов в них столько же, сколько и протонов. Водород имеет один протон и один электрон, гелий по два того и другого, литий по три и т.д. Когда число электронов в атоме больше одного, они начинают взаимодействовать друг с другом, и задача вычисления их волновых функций и энергетических уровней становится неразрешимой. Поэтому мы для начала будем считать, что электроны не взаимодействуют друг с другом. Разумеется, это сильное упрощение, но оно позволит нам

¹ Первоначальная формулировка Менделеева гласила, что периодическая зависимость наблюдается от атомного веса элемента, поскольку в то время атомное ядро еще не было открыто.

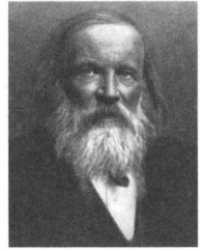
Таблица 4.2. Основная электронная конфигурация для химических элементов вплоть до $Z = 36$ (для каждого элемента приводится список населенностей энергетических уровней, определяемой квантовыми числами n и l)

	n	1	2	3	4
Элемент	l Z	0	0 1	0 1 2	0 1 2 3
Водород	1	1			
Гелий	2	2			
Литий	3	2	1		
Бериллий	4	2	2		
Бор	5	2	2 1		
Углерод	6	2	2 2		
Азот	7	2	2 3		
Кислород	8	2	2 4		
Фтор	9	2	2 5		
Неон	10	2	2 6		
Натрий	11	2	2 6	1	
Магний	12	2	2 6	2	
Алюминий	13	2	2 6	2 1	
Кремний	14	2	2 6	2 2	
Фосфор	15	2	2 6	2 3	
Сера	16	2	2 6	2 4	
Хлор	17	2	2 6	2 5	
Аргон	18	2	2 6	2 6	
Калий	19	2	2 6	2 6	1
Кальций	20	2	2 6	2 6	2
Скандий	21	2	2 6	2 6 1	2
Титан	22	2	2 6	2 6 2	2
Ванадий	23	2	2 6	2 6 3	2
Хром	24	2	2 6	2 6 5	1
Марганец	25	2	2 6	2 6 5	2
Железо	26	2	2 6	2 6 6	2
Кобальт	27	2	2 6	2 6 7	2
Никель	28	2	2 6	2 6 8	2
Медь	29	2	2 6	2 6 10	1
Цинк	30	2	2 6	2 6 10	2
Галлий	31	2	2 6	2 6 10	2 1
Германий	32	2	2 6	2 6 10	2 2
Мышьяк	33	2	2 6	2 6 10	2 3
Селен	34	2	2 6	2 6 10	2 4
Бром	35	2	2 6	2 6 10	2 5
Криптон	36	2	2 6	2 6 10	2 6

установить «в нулевом приближении» базис для дальнейшего обсуждения.

Есть два фундаментальных принципа, которые мы должны принять во внимание. Первый — это принцип минимума энергии. Элек-

троны, как правило, должны занимать состояние (или одно из состояний) с минимальной возможной энергией (*основное состояние* — ground state). Этот принцип следует из статистики Больцмана: если атом находится в тепловом равновесии со средой, вероятность его нахождения в состоянии с энергией E пропорциональна $e^{-E/kT}$, где k — постоянная Больцмана, а T — температура среды. Коль скоро $kT \ll E_1 - E_0$ (где $E_1 - E_0$ есть разность энергии между первым возбужденным энергетическим состоянием и основным состоянием), вероятность найти атом в возбужденном состоянии низка.



Дмитрий Менделеев

Упражнение 4.47. Оцените вероятность того, что атом водорода самопроизвольно возбудится до состояния с $n = 2$ при комнатной температуре. **Подсказка:** не забудьте учесть вырожденность энергетических уровней.

Если бы многоэлектронные атомы управлялись исключительно принципом минимальной энергии, то все электроны находились бы на энергетическом уровне с $n = 1$. Однако этого не допускает *принцип запрета Паули* (Pauli exclusion principle). Как мы обнаружили в упр. 4.39, энергетический уровень [или оболочка (shell), сказали бы химики] $n = 1$ вмещает всего два электрона. Если атом имеет больше двух электронов, то оставшиеся будут вытеснены на оболочку $n = 2$, которая вмещает 8 электронов, $n = 3$ вмещает 18 электронов, и т.д. Чем выше атомный номер, тем больше оболочек в атоме заполнено.

А теперь введем в картину взаимодействия между электронами. Квантовую задачу многих тел можно упростить, заметив, что электроны на разных оболочках, как правило, слабо взаимодействуют между собой. Так происходит потому, что, как видно из рис. 4.3, электроны более низких оболочек располагаются в среднем намного ближе к ядру. Пространственные перекрытия волновых функций, связанных с разными оболочками, относительно невелики, так что электроны проводят мало времени в непосредственной близости друг к другу. «С точки зрения» электронов внешних оболочек, частицы внутренних оболочек, по существу, играют роль плотной отрицательно заряженной сферы (отсюда и термин «оболочка») вокруг ядра, экранируя его притягивающий потенциал своим отрицательным зарядом.

Химические свойства элемента определяются прежде всего электронами самой внешней занятой оболочки — *валентной*. Дело в том, что они

обладают наибольшими энергиями (рис. 4.4) и потому скорее вступают в химические реакции. Принципиальным фактором является число электронов на внешней оболочке. Если она *заполнена* (принцип Паули не позволяет дополнительным электронам проникать в нее), то атом неохотно реагирует с другими атомами — это характерно для инертных газов. Как можно увидеть из табл. 4.2, так обстоит дело с гелием (атомный номер $Z = 2$) и неоном ($Z = 2 + 8 = 10$). Обратите внимание, что следующий инертный газ — аргон — имеет атомный номер $Z = 18$, а не $2 + 8 + 18 = 28$, так что он не следует данному правилу. Я объясню это чуть позже.

Если валентная оболочка содержит только один электрон (у лития с $Z = 2 + 1 = 3$, натрия с $Z = 10 + 1 = 11$, калия с $Z = 18 + 1 = 19$ и т. д.), он слабо взаимодействует с электронами внутренних оболочек и ведет себя так, будто является единственным электроном в атоме. Эти элементы называются щелочными металлами. При вступлении в химические реакции такие атомы чаще всего отдают свой единственный валентный электрон и превращаются в положительные ионы. Происходит это потому, что энергия связанного состояния внешнего электрона близка к нулю.

У галогенов (фтора с $Z = 10 - 1 = 9$, хлора с $Z = 18 - 1 = 17$ и т. д.), напротив, в валентной оболочке не хватает только одного электрона, а значит, подобным атомам выгоднее «перетащить» к себе какой-нибудь электрон и заполнить таким образом свою внешнюю оболочку, придя в низкоэнергетическое собственное состояние. Именно поэтому щелочные металлы и галогены склонны мощно реагировать друг с другом, образуя стабильные соединения, такие как поваренная соль (NaCl).

У группы элементов в табл. 4.2, которая начинается с калия ($Z = 19$), оболочка $n = 4$ начинает заполняться еще до того, как заполнилась оболочка $n = 3$, $l = 2$. Причина в следующем. Мы уже выяснили, что в атоме водорода состояния с одним и тем же главным квантовым числом n , но с разными орбитальными квантовыми числами l обладают одинаковой энергией. Оказывается, это уникальное свойство атомов и ионов, имеющих всего один электрон. Электроны с большими значениями момента импульса располагаются в среднем дальше от ядра. Следовательно, в многоэлектронном атоме электрон в состоянии с большим l заслонен от поля ядра другими электронами, а потому обладает большей энергией, чем его собрат с тем же n , но меньшим l ¹. Это свойство особенно ярко проявляется при высоких значениях n и l . В частности,

¹ Магнитное же квантовое число m не влияет на энергию даже в многоэлектронных атомах.

состояния с $n = 3, l = 2$ обладают большей энергией, чем состояния с $n = 4, l = 0$. Поэтому после аргона, у которого состояния с $n = 3$ и $l = 0, 1$ заполнены, начинает заполняться четвертая оболочка, хотя в третьей еще есть вакантные места. Именно по этой причине аргон ведет себя как инертный газ.

Разумеется, третья оболочка тоже должна будет когда-то заполниться. Такое происходит при значениях Z от 21 до 30, от скандия до цинка. Поскольку у всех этих элементов (кроме хрома и меди) на внешней оболочке находится два электрона, все они имеют относительно схожие химические свойства.

4.5. Сфера Блоха

В предыдущем разделе мы нашли собственные состояния операторов, связанных с проекциями вектора момента импульса на разные оси. Теперь давайте поставим перед собой обратную задачу. Можно ли рассматривать произвольный элемент гильбертова пространства как собственное состояние проекции момента импульса на какую-то конкретную ось? Иными словами, можно ли ассоциировать вектор момента импульса определенного направления с некоторым состоянием движения, как это делается в классической физике? Ответ оказывается утвердительным, но только для подпространства, связанного с $l = \frac{1}{2}$.

Упражнение 4.48. Рассмотрим произвольное нормированное спинное состояние $|\psi\rangle = \psi_{\uparrow}|\uparrow\rangle + \psi_{\downarrow}|\downarrow\rangle$, где $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ — обозначения состояний частицы со спином $1/2$, соответствующих магнитным квантовым числам $m_s = 1/2$ и $-1/2$. Без потери общности определим общую квантовую фазу этого состояния так, что $\psi_{\uparrow}$ действительно и неотрицательно.

- а) Покажите, что для любого состояния $|\psi\rangle$ мы можем определить единственную пару углов $\theta \in [0, \pi]$ и $\phi \in [0, 2\pi]$, такую что

$$\psi_{\uparrow} = \cos \frac{\theta}{2}; \quad (4.62a)$$

$$\psi_{\downarrow} = \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi}. \quad (4.62b)$$

- б) Покажите, что состояние $|\psi\rangle$ есть собственное состояние проекции момента импульса $\hat{S}^1$ на вектор $\vec{R}_{\theta\phi}$, направленный вдоль сферических углов θ, ϕ с собственным значением $\hbar/2$.

¹ Мы используем символ $\hat{S}$, а не $\hat{L}$, чтобы подчеркнуть, что подпространство $l = 2$ может соответствовать только спиновой степени свободы.

- с) Покажите, что декартовы координаты вектора $\vec{R}_{\text{вф}}$ равны средним значениям наблюдаемых $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ для соответствующего состояния $|\psi\rangle$.

Подсказка: вспомните упр. 4.28.

Из упражнения 4.48 мы узнаем, что для каждого спинового состояния $|\psi\rangle$ можно определить вектор, такой что спин в этом состоянии «указывает в направлении» этого вектора. Он называется *вектором Блоха* состояния $|\psi\rangle$, а полное множество таких векторов называется *сферой Блоха*.

Упражнение 4.49. Объясните, почему аналогичное соответствие не может быть установлено для подпространств с моментом импульса $l > \frac{1}{2}$.

Упражнение 4.50^s. Убедитесь, что собственные состояния операторов $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ соотносятся с точками на сфере Блоха так, как показано на рис. 4.5.

Упражнение 4.51. Покажите, что любые два состояния, представленные противоположными точками на сфере Блоха, ортогональны.

Гильбертово пространство, связанное с частицей со спином $\frac{1}{2}$, представляет собой кубит. И в самом деле, его базис состоит из двух элементов: «спин-вверх» $|\uparrow\rangle$ и «спин-вниз» $|\downarrow\rangle$. Это означает, что мы можем установить однозначное соответствие (изоморфизм¹) между состояниями спина и любого другого кубита — например, спиновое состояние $\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$ ставится в соответствие поляризационному $\alpha|H\rangle + \beta|V\rangle$. Тогда собственные состояния $\hat{S}_x$ будут отображаться на состояния диагональной поляризации $|+\rangle$ и $|-\rangle$, а собственные состояния $\hat{S}_y$ — на состояния круговой поляризации $|R\rangle$ и $|L\rangle$.

¹ Изоморфизм $f(\cdot)$ между линейными пространствами V и W есть взаимно однозначное отображение $|a\rangle \in V \mapsto f(|a\rangle) \in W$, такое что для любых $|a\rangle, |b\rangle \in V$ и числа λ

$$f(|a\rangle + |b\rangle) = f(|a\rangle) + f(|b\rangle); \quad (4.63)$$

$$f(\lambda|a\rangle) = \lambda f(|a\rangle).$$

Обратите внимание на разницу между изоморфизмом и линейным оператором (определение А.15). Линейный оператор есть отображение в пределах единого линейного пространства, тогда как изоморфизм может связывать два разных линейных пространства. Кроме того, линейный оператор не обязан быть взаимно однозначным отображением.

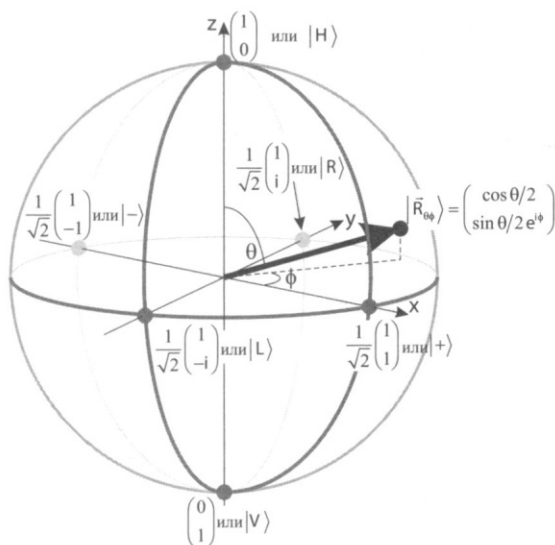


Рис. 4.5. Сфера Блоха

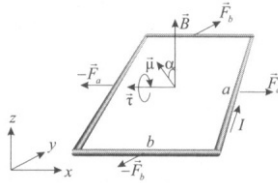
Исходя из сказанного, мы можем представить поляризационные состояния при помощи точек на сфере Блоха (рис. 4.5). Обратите внимание, что линейные поляризационные состояния $|\alpha\rangle = \cos \alpha |H\rangle + \sin \alpha |V\rangle$ (где α — угол поляризации) могут в то же время быть записаны в соответствии с (4.62) как $|\alpha\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |H\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |V\rangle$ (где θ — полярный угол на сфере Блоха). Это означает, что данный угол равен удвоенному углу поляризации. К примеру, как видно из рис. 4.5, состояния $|H\rangle$ и $|V\rangle$ разделены на сфере Блоха углом 180° , а состояния $|H\rangle$ и $|\pm\rangle$ — углом 90° .

Обратите внимание на разницу в логике нашей работы с операторами Паули и их собственными векторами при изучении поляризации фотона в главе 1 и спина в данной главе. В первом случае мы сначала ввели три поляризационных базиса, а затем в упр. 1.29 определили операторы Паули как наблюдаемые, связанные с этими базисами. Здесь же мы сначала в упр. 4.26 получили операторы Паули из физики момента импульса, а затем вычислили их собственные состояния.

Упражнение 4.52. Горизонтально поляризованный фотон проходит через:

- полуволновую пластинку;
- * четвертьволновую пластинку

Отступление 4.4. Магнитный момент в магнитном поле: классическая физика



Предположим, что прямоугольная рамка размером $a \times b$, по которой протекает ток I , помещается в магнитное поле $\vec{B}$, ориентированное вдоль оси z . Нормаль к рамке располагается под углом α к оси z , как показано на рисунке. На каждую сторону рамки действует сила Ампера, которая в общем виде выражается так: $\vec{F} = I\vec{l} \times \vec{B}$, где $\vec{l}$ — вектор длины этой стороны. Силы, действующие на стороны длиной a , скомпенсируют друг друга, а вот силы, действующие на стороны длиной b (величина их равна $F_b = IbB$), породят момент силы величиной $\tau = 2F_b \times (a/2) \sin \alpha = IBab \sin \alpha = IBA \sin \alpha$, где A — площадь рамки.

Магнитный момент $\vec{\mu}$, носителем которого является рамка, представляет собой вектор величины

$$\mu = Iab = IA, \quad (4.64)$$

перпендикулярный плоскости рамки. Следовательно, момент силы, действующий на рамку, равен

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}. \quad (4.65)$$

В этом виде соотношение имеет достаточно общий характер и верно для рамок любой формы.

Каждый из проводников, на которые действуют магнитные силы, обладает вследствие этого потенциальной энергией. Вычислим полную потенциальную энергию рамки в зависимости от угла α , считая, что рамка может вращаться вокруг оси, совпадающей с одной из ее сторон длиной b , и что $\alpha = \pi/2$ соответствует положению с нулевой энергией. Поворот рамки из этого положения в положение с другим α означает смещение другой стороны длиной b на расстояние $\pm a \cos \alpha$ в направлении y и совершение работы $W = -F_b a \cos \alpha = -IBab \cos \alpha = -\mu B \cos \alpha$. Следовательно, потенциальная энергия задается уравнением

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (4.66)$$

Последнее выражение опять же не зависит от формы рамки или положения оси. Потенциальная энергия магнитного диполя в магнитном поле минимальна, когда диполь и поле коллинеарны.

В дополнение к току заряженные частицы, проходящие по рамке, несут с собой массу, так что их движение имеет момент импульса $\vec{L}$. Магнитный момент пропорционален моменту импульса

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{L}, \quad (4.67)$$

где коэффициент пропорциональности есть *гиромагнитное отношение* (gyromagnetic ratio — см. также упр. 4.54).

Действие момента силы на этот момент импульса равно $\dot{\vec{L}} = \vec{\tau}$. Воспользовавшись (4.65) и (4.67), получаем

$$\dot{\vec{L}} = \gamma \vec{L} \times \vec{B}. \quad (4.68)$$

Как мы знаем из классической механики, решение дифференциального уравнения (4.68) есть *прецессия* рамки вокруг направления магнитного поля с угловой частотой

$$\Omega_L = \gamma B, \quad (4.69)$$

известной как *частота Лармора*.

с оптической осью, ориентированной под углом α к горизонтали. Постройте траекторию получающихся поляризационных состояний на сфере Блоха для всех возможных значений α .

Подсказка: обратитесь к упр. 1.24. Часть б) может быть решена численно.

Упражнение 4.53. Пара электронов, общая для Алисы и Боба, приготовлена в запутанном спиновом состоянии

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle).$$

Алиса измеряет проекцию спина своего электрона на вектор $\vec{R}_{\theta,\phi}$, определенный сферическими углами (θ, ϕ) . Найдите вероятность каждого возможного результата этого измерения и результирующее состояние электрона Боба. Где находится это состояние и результат соответствующего измерения Алисы на сфере Блоха?

4.6. Магнитный момент и магнитное поле

4.6.1. Момент импульса и магнитный момент

Многие элементарные частицы электрически заряжены, поэтому наличие у них момента импульса подразумевает, что их электрический заряд движется по кругу. Это движение порождает магнитный момент, который может взаимодействовать с внешними магнитными полями (отступление 4.4). Такое взаимодействие имеет широкий спектр применений — от квантовой информатики до медицины.

Упражнение 4.54. Для классического движения точечной частицы с массой M и зарядом e по круговой орбите с моментом импульса $\vec{L}$ покажите, что гиромагнитное отношение¹ задается формулой

$$\gamma = \frac{e}{2M}. \quad (4.70)$$

Хотя мы получили этот результат классическими методами, он остается верным и в квантовом мире — с той поправкой, что квантовое гиромагнитное отношение включает в себя безразмерный множитель, известный как *g-фактор*:

¹ Определение гиромагнитного отношения см. в Отступлении 4.4.

$$\gamma = g \frac{e}{2M}. \quad (4.71)$$

Этот множитель зависит от природы движения. Если момент импульса возникает только из-за орбитального движения, $g = 1$ (так что квантовое выражение совпадает с классическим). Для спина электрона он равен 2,0023, для протона — 5,5857.

Для спина g -фактор может быть выведен теоретически при помощи методов релятивистской квантовой электродинамики. Для наглядного понимания можно вообразить вращающийся электрон не совсем точечной, но конечного размера частицей. Масса и заряд распределяются по объему электрона по-разному: если масса сосредоточена больше в центре частицы, то заряд распределен по ее периферии. В результате отношение между магнитным моментом и механическим моментом импульса выше, чем можно было бы ожидать для частицы с одинаковым распределением массы и заряда.

Упражнение 4.55. Для заряженной частицы с орбитальным или спиновым моментом импульса покажите, что:

- а) проекция магнитного момента на ось z квантуется согласно

$$\mu_z = \hbar \gamma m; \quad (4.72)$$

- б) энергетические собственные значения под действием постоянного магнитного поля B равны

$$E_m = -\hbar \Omega_L = -\hbar \gamma B m, \quad (4.73)$$

где m — соответствующее магнитное или спиновое квантовое число, а Ω_L — частота Лармора (4.69).

Расщепление энергетического уровня в магнитном поле, которое мы обнаружили в части (б), называется *эффектом Зеемана* (рис. 4.6). В атомной и ядерной физике он встречается повсеместно.

Если в упражнении выше момент импульса является орбитальным, то, используя (4.70), мы видим, что квант проекции магнитного момента на ось z равен

$$\mu_B = \frac{e}{2M} \hbar. \quad (4.74)$$

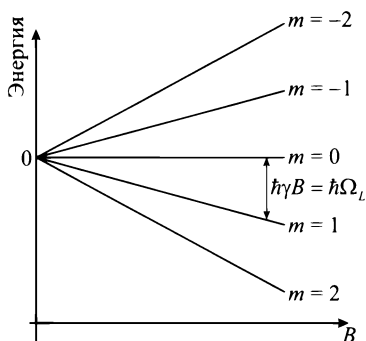


Рис. 4.6. Зеемановское расщепление энергии в магнитном поле. В примере на рисунке $L = 2$. Электрический заряд вращающейся частицы и, следовательно, гиромагнитное отношение γ считаются положительными.

Для электрона ($M = M_e$) эта величина называется *магнетоном Бора*. Она равна $5,8 \times 10^{-9}$ эВ/Гаусс = $9,3 \times 10^{-24}$ Дж/Тл.

Упражнение 4.56[§]. Убедитесь, что данные в последней колонке табл. 4.3 согласуются с данными в других колонках.

Таблица 4.3. Магнитно-дипольные свойства некоторых элементарных частиц

Частица	Масса, кг	Заряд, Кл	Спин	g-фактор	Частота Лармора, МГц/Тл
Электрон	$9,10938 \times 10^{-31}$	$1,60218 \times 10^{-19}$	$1/2$	2,0023	28025
Протон	$1,67262 \times 10^{-27}$			5,5857	42,5781
Мюон	$1,883532 \times 10^{-28}$			2,0023	135,539

4.6.2. Прибор Штерна — Герлаха

Частица с магнитным моментом, помещенная во внешнее магнитное поле, обладает потенциальной энергией, задаваемой уравнением (4.66). Если магнитное поле меняется в зависимости от координаты,

данная потенциальная энергия имеет градиент, который проявляется как сила $\vec{F} = -\vec{\nabla}U$. Пользуясь (4.66), мы можем переписать это выражение в виде $\vec{F} = \vec{\nabla}(\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B})$. Если мы определим ось z так, чтобы она была направлена вдоль магнитного поля, то результат упростится до

$$\vec{F} = (\vec{\nabla}B)\hat{\mu}_z. \quad (4.75)$$

Величина этой силы пропорциональна проекции ее магнитного момента на направление поля.

Подобное наблюдение можно использовать, чтобы измерять компоненты вектора квантового момента импульса. Прибор Штерна — Герлаха¹ оснащен постоянным магнитом такой формы, что поле, которое он порождает, существенно неоднородно. Когда частица движется сквозь это поле, она испытывает действие силы и отклоняется от своего первоначального направления. О поведении частицы можно судить благодаря чувствительному экрану, помещенному за магнитом (рис. 4.7).

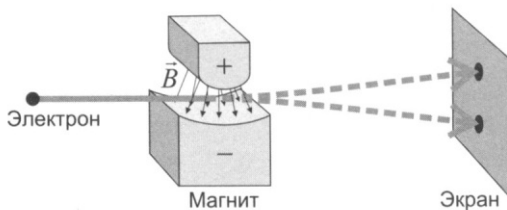


Рис. 4.7. Прибор Штерна — Герлаха

Поскольку магнитный момент пропорционален моменту импульса, прибор Штерна — Герлаха, по существу, измеряет компонент момента импульса вдоль направления поля. Так как значения этого компонента квантованы, частица должна попадать в дискретные точки на экране-мишени. Например, свободный электрон может попасть в две точки, соответствующие $m_s = \pm \frac{1}{2}$. В контексте спин-поляризационного изоморфизма (разд. 4.5) измерение z -проекции

¹ W. Gerlach and O. Stern, Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld, Zeitschrift für Physik 9, 349–352 (1922); W. Gerlach and O. Stern, Das magnetische Moment des Silberatoms, Zeitschrift für Physik 9, 353–355 (1922); W. Gerlach and O. Stern, Der experimentelle Nachweis des magnetischen Moments des Silberatoms, Zeitschrift für Physik 8, 110–111 (1922).

спина электрона прибором Штерна — Герлаха эквивалентно измерению поляризации фотона в каноническом базисе при помощи поляризующего светоделителя (разд. 1.4).

Упражнение 4.57. Электрон, приготовленный в собственном состоянии компонента спина, ориентированного вдоль вектора с полярными координатами (θ, ϕ) , с собственным значением $\frac{\hbar}{2}$, проходит через прибор Штерна — Герлаха с вектором поля, ориентированным вдоль оси z . Чему равны вероятности того, что электрон окажется в каждой из двух точек на экране?

Упражнение 4.58. В приборе Штерна — Герлаха направления поля и его градиента могут быть разными. Какое из этих двух направлений определяет базис измерения?

Упражнение 4.59. Пучок частиц со спином $s = 1$ в собственном состоянии $\hat{S}_x$ с нулевым собственным значением проходит сквозь прибор Штерна — Герлаха с вектором поля, направленным вдоль оси y . Сколько точек образуется на мишени и в какой пропорции поделятся частицы между этими точками?

Упражнение 4.60. Пучок электронов, приготовленных так, что их спины указывают в отрицательном z -направлении, проходит через прибор Штерна — Герлаха с вектором поля, ориентированным в плоскости x - z под углом θ_0 к оси z . В какой пропорции расщепится пучок?

4.6.3. Эволюция магнитных состояний

Из классической физики (отступление 4.4) мы знаем, что магнитный момент, помещенный в магнитное поле, будет прецессировать вокруг этого поля. Следует ли нам ожидать подобного эффекта и в квантовом мире? Чтобы ответить на вопрос, нам потребуется изучить эволюцию нашей квантовой системы под действием гамильтониана (4.66). Принимая во внимание (4.67), перепишем данный гамильтониан как

$$\hat{H} = -\hat{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \hat{L} \cdot \vec{B}. \quad (4.76)$$

Обратите внимание, что мы обращаемся с макроскопическим магнитным полем как с классическим вектором, а не как с оператором.

Упражнение 4.61. Записав дифференциальное уравнение эволюции компонентов вектора момента импульса в представлении Гейзенберга, воспроизведите классический результат (4.68).

Мы видим, что в представлении Гейзенберга поведение квантового магнитного момента в поле аналогично классическому: он прецессирует вокруг поля с ларморовой частотой $\Omega_L = \gamma B$ (рис. 4.8). Как мы знаем, если нас интересуют *средние* значения оператора вектора момента импульса, этот результат годится независимо от того, используем мы при расчетах представление Гейзенберга или Шрёдингера. Например, в случае частицы со спином 1/2 вектор Блоха [компонентами которого являются $R_{x,y,z} = \langle \sigma_{x,y,z} \rangle$, как показано в упр. 4.48, с)] эволюционирует в соответствии с

$$\dot{\vec{R}} = \gamma \vec{R} \times \vec{B}. \quad (4.77)$$

Этот важный результат наглядно демонстрирует полезность представления Гейзенберга: получить его в представлении Шрёдингера куда сложнее. Мы сделаем это в следующем упражнении для нескольких частных случаев.

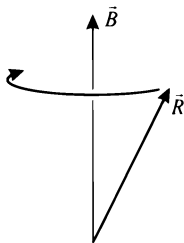


Рис. 4.8. Прецессия вектора Блоха вокруг магнитного поля. Гиромагнитное отношение считается положительным.

Упражнение 4.62. Найдите эволюцию в представлении Шрёдингера спинового состояния свободного электрона под действием постоянного магнитного поля $\vec{B}$, заданного следующими условиями:

- начальное состояние представлено произвольной точкой (θ_0, ϕ_0) на сфере Блоха, а магнитное поле ориентировано вдоль оси z ;
- начальное состояние соответствует спину, указывающему вдоль оси z , а магнитное поле ориентировано вдоль оси y ;
- начальное состояние соответствует спину, указывающему вдоль оси z , а магнитное поле ориентировано вдоль вектора с полярными углами $(\theta_0, 0)$.

Представьте решение в матричном виде в каноническом базисе и в виде траекторий на сфере Блоха. Убедитесь, что ваш результат согласуется с (4.77). Для каждого ответа найдите соотношение вероятностей результатов, которое будет наблюдаться при измерении Штерна — Герлаха с магнитным полем, ориентированным в z -направлении.

Подсказка: родственную задачу см. в упр. 1.47.

Упражнение 4.63. Фотон и электрон приготовлены в запутанном состоянии

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\downarrow\rangle - |V\uparrow\rangle) \quad (4.78)$$

и распределены между Алисой и Бобом, которые используют их, чтобы осуществить квантовую телепортацию другого фотона в состоянии $|\chi\rangle = \alpha|H\rangle + \beta|V\rangle$ на спин электрона Боба. С этой целью Алиса производит измерение Белла над своими двумя фотонами. Для каждого возможного результата этого измерения найдите направление и абсолютную величину магнитного поля $\vec{B}$, которым Бобу нужно будет подействовать на свой электрон в течение заданного времени τ , чтобы привести его спин в состояние $\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$.

4.7. Магнитный резонанс

4.7.1. Вращающийся базис

Пусть частица со спином $\frac{1}{2}$ помещена в постоянное магнитное поле B_0 , направленное вдоль оси z . Как говорилось ранее [упр. 4.55, b)], состояния $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ являются собственными состояниями гамильтониана с энергиями $E_{\uparrow,\downarrow} = \mp \frac{\hbar}{2}\Omega_0$, где $\Omega_0 = \gamma B_0$ есть частота Лармора¹, а γ — гиромагнитное отношение частицы. Наша цель в данном разделе состоит в том, чтобы изучить явления, которые возникают, если дополнительно приложить вдоль оси x относительно слабое магнитное поле, колеблющееся с частотой ω , близкой к Ω_0 ²:

¹ В этом разделе мы будем использовать для обозначения частоты Лармора символ Ω_0 , а не Ω_L .

² Это магнитное поле обычно называют радиочастотным (rf, radio-frequency), потому что ω , как правило, лежит в диапазоне, где осуществляются радио- и телетрансляции. Поле B_0 называют постоянным (dc, direct current) полем.

$$\vec{B} = B_0 \hat{k} + B_{\pi} \cos \omega t \hat{i}. \tag{4.79}$$

Иными словами, мы хотели бы знать, что происходит, если это переменное поле близко к *резонансу с двухуровневой системой*, которую образуют состояния $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ (рис. 4.9).

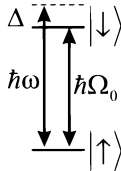


Рис. 4.9. Магнитный резонанс в двухуровневой системе

Упражнение 4.64. Напишите гамильтониан и дифференциальные уравнения для шрёдингеровой эволюции спинового состояния частицы $|\psi(t)\rangle$ в базисе $(|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle)$.

Ответ:

$$H = -\frac{\hbar}{2} \gamma (B_0 \hat{\sigma}_z + B_{\pi} \hat{\sigma}_x \cos \omega t) \approx \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\Omega_0 & -\gamma B_{\pi} \cos \omega t \\ -\gamma B_{\pi} \cos \omega t & \Omega_0 \end{pmatrix}; \tag{4.80}$$

$$\dot{\psi}_{\uparrow} = \frac{i}{2} \Omega_0 \psi_{\uparrow} + \frac{i\gamma}{2} B_{\pi} \cos \omega t \psi_{\downarrow}; \tag{4.81a}$$

$$\dot{\psi}_{\downarrow} = -\frac{i}{2} \Omega_0 \psi_{\downarrow} + \frac{i\gamma}{2} B_{\pi} \cos \omega t \psi_{\uparrow}, \tag{4.81b}$$

где $\psi_{\uparrow}(t) = \langle \uparrow | \psi(t) \rangle$, $\psi_{\downarrow}(t) = \langle \downarrow | \psi(t) \rangle$.

Уравнения (4.81) аналогичны тем, с которыми мы имели дело, когда изучали квантовую эволюцию в любом двумерном гильбертовом пространстве (см., например, упр. 1.47). Но теперь коэффициенты в правой части зависят от времени. Это сильно усложняет расчеты. Однако при $B_{\pi} \ll B_0$ и вблизи резонанса существует элегантное приближенное решение. В качестве первого шага в его разработке определим новый, зависящий от времени, базис в нашем гильбертовом пространстве:

$$|\tilde{\uparrow}\rangle = |\uparrow\rangle e^{\frac{i}{2} \omega t}; \tag{4.82a}$$

$$|\tilde{\downarrow}\rangle = |\downarrow\rangle e^{-\frac{i}{2} \omega t}. \tag{4.82b}$$

По причине, которая станет очевидной в следующем упражнении, этот базис называется *вращающимся* (rotating basis). Обозначим коэффициенты разложения состояния $|\psi\rangle$ во вращающемся базисе как

$$\tilde{\psi}_{\uparrow}(t) = \langle \tilde{\uparrow} | \psi(t) \rangle = \psi_{\uparrow}(t) e^{-\frac{i}{2}\omega t}; \quad (4.83a)$$

$$\tilde{\psi}_{\downarrow}(t) = \langle \tilde{\downarrow} | \psi(t) \rangle = \psi_{\downarrow}(t) e^{\frac{i}{2}\omega t}. \quad (4.83b)$$

Первоначальный канонический базис $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ будем называть *стационарным*.

Упражнение 4.65. Покажите, что векторы Блоха в стационарном и вращающемся базисах¹ связаны поворотом на угол ωt вокруг оси z .

Мы знаем, что в отсутствие радиочастотного поля блоховский вектор в стационарном базисе прецессирует вокруг магнитного поля с ларморовой частотой Ω_0 . Во вращающемся базисе блоховский вектор прецессирует много медленнее, с угловой скоростью $\Omega_0 - \omega$.

Упражнение 4.66. Покажите, что уравнения (4.81), записанные для $\dot{\tilde{\psi}}_{\uparrow}$ и $\dot{\tilde{\psi}}_{\downarrow}$, принимают вид

$$\dot{\tilde{\psi}}_{\uparrow} = -\frac{i}{2}\Delta\tilde{\psi}_{\uparrow} + \frac{i\gamma}{4}B_{\text{rf}}(1 + e^{-2i\omega t})\tilde{\psi}_{\downarrow}; \quad (4.84a)$$

$$\dot{\tilde{\psi}}_{\downarrow} = \frac{i}{2}\Delta\tilde{\psi}_{\downarrow} + \frac{i\gamma}{4}B_{\text{rf}}(1 + e^{2i\omega t})\tilde{\psi}_{\uparrow}, \quad (4.84b)$$

где $\Delta = \omega - \Omega_0$ есть *отстройка* (detuning) радиочастотного поля от резонанса.

До сих пор наши вычисления были точными. Но теперь пришла пора использовать важный прием, известный как *приближение вращающейся волны* (rotating wave approximation). Мы пренебрежем быстро осциллирующими членами, содержащими $e^{\pm 2i\omega t}$, в правой части уравнений (4.84). Довод в пользу этого заключается в том, что на периоде колебаний $2\pi/\omega$ эти члены усредняются к нулю, т. е. их действие становится пренебрежимо малым по сравнению с остальными членами, которые не колеблются. Данное приближение применимо, если $\Delta \ll \omega, \Omega_0$ и $B_{\text{rf}} \ll B_0$.

¹ Блоховский вектор в новом базисе получается подстановкой $(\tilde{\psi}_{\uparrow}, \tilde{\psi}_{\downarrow})$ в (4.62) вместо $(\psi_{\uparrow}, \psi_{\downarrow})$.

Отступление 4.5. Нефизичная природа гамильтониана вращающейся волны

Имея в виду, что стационарный и вращающийся базисы связаны между собой комплексным фазовым сдвигом (4.82), мы могли бы ожидать, например, что $\langle \uparrow | \hat{H} | \uparrow \rangle = \langle \hat{\tau} | \hat{H} | \hat{\tau} \rangle$. Но это равенство, очевидно, не согласуется с матрицами стационарного и вращающегося гамильтонианов, задаваемыми (4.80) и (4.85) соответственно: $H_{\uparrow\uparrow} = -\hbar\Omega_0/2$, тогда как $(H_{\text{RWA}})_{\uparrow\uparrow} = \hbar\Delta/2$. Откуда же берется такое расхождение? Приближение вращающейся волны не может быть ответом на этот вопрос, поскольку оно меняет только недиагональные элементы гамильтониана, но не диагональные.

На самом деле причина в том, что мы можем выразить уравнение Шрёдингера в матричном виде, таком как (1.32), только для статического, не зависящего от времени базиса. Лишь в этом случае мы можем написать, к примеру, что $\langle \uparrow | \left(\frac{d}{dt} | \psi \rangle \right) = \frac{d}{dt} \langle \uparrow | \psi \rangle$. Если базис зависит от времени, то нам придется учесть также производную элемента базиса по времени, так что приведенное уравнение не будет верным. Но при выводе матрицы гамильтониана вращающейся волны (4.85) из эволюции (4.84) мы этим пренебрегли, обращаясь с вращающимся базисом как со статическим.

В результате гамильтониан вращающейся волны нефизичен, или *фиктивен*: он не представляет реального наблюдаемого энергии*. В частности, элемент $(H_{\text{RWA}})_{\uparrow\uparrow}$ его матрицы не равен математическому ожиданию $\langle \hat{\tau} | \hat{H} | \hat{\tau} \rangle$ полного гамильтониана $\hat{H}$. Тем не менее H_{RWA} дает верное математическое описание (4.84) эволюции спинового состояния. Если наша цель — найти эту эволюцию, мы можем не беспокоиться о физике гамильтониана вращающейся волны, а просто использовать его как формальный инструмент для теоретического разбора.

* В действительности уравнение (4.85) корректно представляет гамильтониан системы в так называемом *представлении взаимодействий*, которое мы здесь не изучаем.

Упражнение 4.67. Покажите, что в приближении вращающейся волны эволюция, определенная уравнениями (4.84), такая же, как и под действием гамильтониана

$$\hat{H}_{\text{RWA}} \simeq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Delta & -\Omega \\ -\Omega & -\Delta \end{pmatrix}, \quad (4.85)$$

где $\Omega = \gamma B_{\text{rf}}/2$ называется *частотой Раби*.

Мы видим, что во вращающемся базисе и в приближении вращающейся волны эволюция, вызванная *изменяющимся во времени* полем, описывается *постоянным* гамильтонианом, и это сильно облегчает расчеты. Кроме того, как мы сейчас увидим, данный гамильтониан дает нам следующий способ представить себе эту эволюцию наглядно.

Отступление 4.6. Осцилляции Раби и фотоэлектрический эффект

Фотоэлектрический эффект представляет собой эмиссию свободных электронов с поверхности, на которую падает свет. Он обладает следующими характерными свойствами, установленными экспериментально:

- Кинетическая энергия испускаемых электронов зависит от длины волны света, но не зависит от его интенсивности.
- Электроны испускаются только в том случае, если длина волны ниже определенного порогового значения.

Эти свойства, не укладывающиеся в рамки классической физики, объяснил в 1905 г. Эйнштейн при помощи понятия кванта света. Согласно данному объяснению, энергия фотона $\hbar\omega$, поглощенная поверхностью, частично уходит на преодоление потенциала U , привязывающего электрон к поверхности, которой он принадлежит; остаток ($K = \hbar\omega - U$) становится кинетической энергией фотоэлектрона. Из этого следует, что только свет с $\hbar\omega \geq U$ может высвобождать фотоэлектроны.

Интуитивно понятная природа объяснения Эйнштейна и прекрасное совпадение его с экспериментальными данными сыграли существенную роль в единодушном признании квантовой теории физическим сообществом. Нобелевской премии Эйнштейн был удостоен в 1921 г. в первую очередь именно за это открытие.

Квантовая физика двухуровневых систем, которую мы здесь изучаем, допускает альтернативное объяснение фотоэлектрического эффекта. Переходы между энергетическими уровнями в веществе из-за действия резонансных электромагнитных полей управляются теми же законами, что и в магнитном резонансе. Когда (классическая) волна с частотой ω находится в резонансе с переходом между связанным состоянием энергии $-U$ и состоянием с энергией K свободного электрона в непрерывном спектре, между двумя этими состояниями возникают осцилляции Раби. Как только электрон оказывается в суперпозиции связанного и несвязанного состояний, он может наблюдаться в несвязанном состоянии и коллапсировать именно на это состояние, демонстрируя таким образом фотоэлектрический эффект.

Итак, для объяснения фотоэлектрического эффекта нет необходимости привлекать фотоны. Достаточно рассмотреть вещество квантово, а электромагнитную волну — классически.

Упражнение 4.68. Покажите, что гамильтониан с матрицей, идентичной (4.85), получается в ситуации, когда спин помещается в постоянное магнитное поле $\vec{B}$ величиной

$$B = \frac{\sqrt{\Omega^2 + \Delta^2}}{\gamma}, \quad (4.86)$$

с компонентами

$$B_x = \frac{\Omega}{\gamma}, B_y = 0, B_z = -\frac{\Delta}{\gamma}. \quad (4.87)$$

Мы видим, что гамильтониан вращающейся волны можно интерпретировать как возникающий благодаря постоянному магнитному

полю, ориентированному под определенным углом. Разумеется, это поле тоже нефизично, поскольку выводится из фиктивного гамильтониана (отступление 4.5); оно не имеет никакого отношения к реальному полю (4.79). Тем не менее представление о нем очень удобно, поскольку позволяет непосредственно применять полученные в предыдущем разделе результаты для квантовой эволюции спина в постоянном магнитном поле к задаче магнитного резонанса.

4.7.2. Эволюция в приближении вращающейся волны

Как мы выяснили в упр. 4.61, поведение вектора Блоха в магнитном поле идентично классическому. Это означает, что его эволюция во вращающемся базисе под действием гамильтониана (4.85) состоит в прецессии вокруг фиктивного поля (4.87), как показано на рис. 4.10 а.

В случае точного резонанса, $\Delta = 0$, фиктивное поле $\vec{B}$ имеет абсолютную величину Ω/γ и направлено вдоль оси x , так что траектория блоховского вектора представляет собой меридиан, пересекающий ось y . Прецессия происходит с угловой скоростью $\gamma B = \Omega$. Соответственно, населенности¹ состояний со спинами, ориентированными вверх и вниз, будут колебаться синусоидально с частотой Раби. Это явление известно как *осцилляции Раби* (Rabi oscillations — см. отступление 4.6).

Отстройка радиочастотного поля от резонанса (так, чтобы $\Delta \neq 0$) имеет двоякий эффект (рис. 4.10 а, b). Во-первых, частота осцилляций Раби будет увеличиваться за счет слагаемого Δ^2 в абсолютной величине фиктивного поля (4.86). Во-вторых, направление этого поля перестает быть горизонтальным. Если траектория начинается в состоянии «спин-вверх», то она уже не будет доходить до южного полюса сферы Блоха, так что мы никогда не сможем наблюдать состояние «спин-вниз» со 100%-ной вероятностью.

Упражнение 4.69. Найдите максимальную вероятность $p_{\uparrow \max}$ наблюдения состояния «спин-вниз» за цикл Раби в зависимости от отстройки частоты Δ . Цикл начинается в состоянии «спин-вверх».

Подсказка: хотя эту задачу можно решить путем вычисления шрёдингеровой эволюции под действием гамильтониана (4.85) (и мы сделаем

¹ Населенность квантового состояния есть полное число частиц в этом состоянии. В нашем случае населенности состояний со спинами, ориентированными вверх и вниз, равны, соответственно, $n p_{\uparrow}$ и $n p_{\downarrow}$, где n — полное число электронов в образце.

это в следующем упражнении), ответить на данный вопрос намного проще, если внимательно рассмотреть геометрию сферы Блоха.

Ответ:

$$\text{pr}_{\downarrow \max} = \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + \Delta^2}. \quad (4.88)$$

Теперь понятно, почему это явление называется «резонанс». Лоренцева форма кривой (4.88) (рис. 4.10 с) очень похожа на отклик механического гармонического осциллятора или электронного колебательного контура на действие периодического внешнего воздействия. Но обратите внимание на важное различие: в случае гармонического осциллятора ширина резонанса определяется коэффициентом затухания, но не зависит от возбуждающего поля. Ширина магнитного резонанса, напротив, пропорциональна частоте Раби, т.е. амплитуде радиочастотного поля. Это явление называется *полевым уширением* и характерно для двухуровневых систем.

Двухуровневая система обладает ограниченной энергией: собственным состоянием с максимальной энергией для нее является состояние «спин-вниз». Какой бы высокой ни была прикладываемая мощность радиочастотного поля, оно не может еще сильнее повысить энергию системы; система *насыщается* (saturates). Гармонический же осциллятор имеет бесконечно много энергетических уровней и потому не насыщается: когда мы разгоняем его сильнее, он отвечает тем, что переходит во все более высокие энергетические состояния. Соответственно, он не демонстрирует никакого полевого уширения¹.

Упражнение 4.70. Найдите эволюцию спинового состояния $|\psi(t)\rangle$ под действием гамильтониана (4.85), начиная с начального состояния $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$. Найдите вероятности состояний «спин-вверх» и «спин-вниз» в зависимости от времени, частоты Раби и отстройки. Сравните ваш результат с тем, что получен в упр. 4.69, и с рис. 4.10 b.

Подсказка: воспользуйтесь упр. 4.62, с).

Упражнение 4.71*. Найдите гамильтониан вращающейся волны для ситуации, в которой радиочастотное поле задается $B_{\text{rf}} \cos(\omega t + \beta)$, где β — произвольная фаза, и направлено:

¹ Обсуждение близкой темы см. в подразд. 3.8.2.

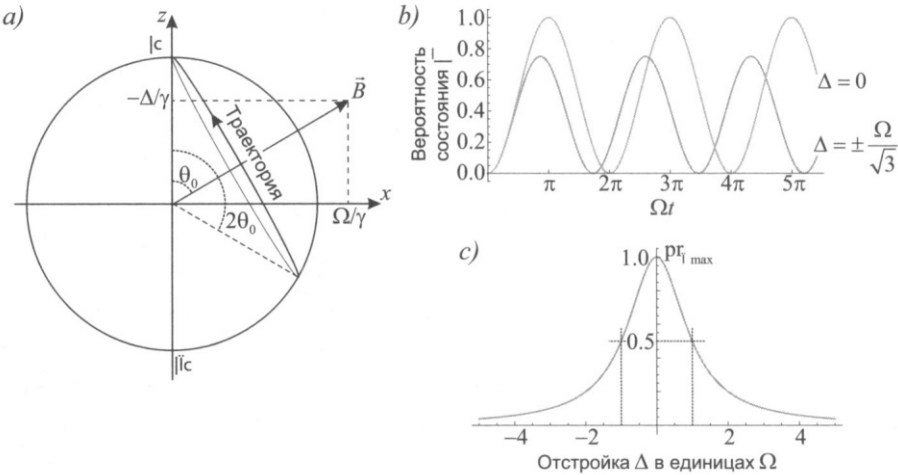


Рис. 4.10. Эволюция в гамильтониане вращающейся волны (4.85), при начальном состоянии частицы «спин-вверх»: *a* — траектория на блоховской сфере, построенная для $\Delta = -\Omega/\sqrt{3}$ и показанная в плоскости x - z ; *b* — вероятность обнаружения состояния «спин-вниз» в зависимости от времени; *c* — кривая резонанса (4.88). Пунктирные линии показывают ширину резонанса по уровню 0,5 максимума.

- а) вдоль оси x ;
- б) вдоль оси y .

Найдите координаты вектора соответствующего фиктивного магнитного поля. Покажите, что, если rf-частота резонансна с двухуровневым переходом, это поле всегда горизонтально.

Ответ: фиктивное магнитное поле дается вектором

а) $B = \left(\frac{\Omega}{\gamma} \cos \beta, -\frac{\Omega}{\gamma} \sin \beta, -\frac{\Delta}{\gamma} \right);$

б) $B = \left(\frac{\Omega}{\gamma} \sin \beta, \frac{\Omega}{\gamma} \cos \beta, -\frac{\Delta}{\gamma} \right).$

Упражнение 4.72. Напишите уравнение Шрёдингера в стационарном базисе для радиочастотного поля, направленного вдоль оси z . Покажите, что в этом случае переходов между состояниями спина «вверх» и «вниз» не будет.

4.7.3. Площадь импульса

В предыдущем разделе мы видели, что резонансное радиочастотное поле с частотой Раби, равной Ω , действующее на протяжении времени t , поворачивает вектор Блоха на угол Ωt . Во многих практических приложениях (см., например, отступление 4.7) резонансное радиочастотное поле применяется импульсно, так что его амплитуда и, следовательно, частота Раби зависят от времени: $\Omega = \Omega(t)$. Такой импульс повернет блоховский вектор на угол $\int \Omega(t) dt$. Эта величина известна как *площадь импульса*¹. Понятие площади импульса удобно, потому что представляет собой единственный параметр, который полностью описывает действие этого импульса на спин; необязательно знать точную форму импульса, если известен его интеграл.

Так, применение импульса площадью $\pi/2$ к состоянию «спин-вверх» переведет его в состояние со спином, указывающим вдоль оси y , $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$. Если мы подействуем на это же состояние еще одним импульсом площадью $\pi/2$, мы получим состояние «спин-вниз». Вместе эти два импульса составят импульс площадью π , действие которого переворачивает блоховский вектор относительно оси x^2 .

Если радиочастотное поле включается импульсно, получение макроскопической площади импульса требует относительно высокой частоты Раби. Тогда нам не нужно беспокоиться о точной настройке радиочастотного поля, коль скоро $\Omega \gg \Delta$ верно для большей части длительности импульса (но мы по-прежнему должны следить за соблюдением $\Omega \ll \Omega_0$). Тогда фиктивное магнитное поле (4.87) почти горизонтально, и эффект отстройки пренебрежимо мал.

Упражнение 4.73. Первоначально частица находится в состоянии «спин-вверх». Она подвергается действию импульса площадью $\pi/2$, за которым следует еще один импульс $\pi/2$, в котором фаза радиочастотного поля сдвинута на угол β . Найдите итоговую населенность состояния «спин-вниз» в зависимости от β . Интерпретируйте свой результат для $\beta = 0$ и $\beta = \pi$.

¹ Отсылка к тому, что интеграл представляет собой «площадь под кривой».

² Импульс площадью π соответствует логической операции НЕ над спиновым кубитом: он преобразует $|0\rangle = |\uparrow\rangle$ в $|1\rangle = |\downarrow\rangle$, и наоборот.

4.7.4. Приложения магнитного резонанса

Пусть мы имеем большой набор (*ансамбль*) частиц со спином $\frac{1}{2}$, приготовленных первоначально в состоянии $|\uparrow\rangle$ вдоль постоянного магнитного поля. Если мы применим к этому ансамблю импульс площадью $\pi/2$, спины перейдут в горизонтальное положение. По окончании импульса, если постоянное поле по-прежнему присутствует, они начнут прецессировать вокруг оси z с частотой Ω_0 .

Упражнение 4.74. Короткий импульс площадью $\pi/2$ применяется к частице, находившейся сначала в состоянии «спин-вверх», и заканчивается в момент $t = 0$. Вычислите средние значения трех декартовых компонентов наблюдаемого магнитного момента при $t > 0$:

- а) во вращающемся базисе;
- б) в стационарном базисе.

Прецессирующий магнитный момент будет излучать электромагнитное поле с частотой прецессии. Это поле, амплитуда которого пропорциональна горизонтальному компоненту Блоховского вектора, может быть обнаружено при помощи обыкновенного радиоприемника, давая нам доступ к важной информации о веществе, в которой находятся спины. Поговорим о свойствах этого излучения.

Сигнал, полученный в качестве отклика на единичный импульс, называется *спадом свободной индукции* (free induction decay). Название связано с тем, что этот сигнал со временем быстро теряет силу в результате действия различных механизмов демпфирования и декогеренции. Главный механизм, вызывающий затухание, — это некоторая неоднородность постоянного магнитного поля в разных точках пространства. Она вызывает *неоднородное уширение* (inhomogeneous broadening) резонанса: каждый спин имеет свою отстройку Δ в определенном диапазоне Δ_0 , известном как *неоднородная ширина*. Блоховские векторы с разными отстройками будут прецессировать вокруг оси z с разными угловыми скоростями и разойдутся по всему экватору сферы Блоха за время порядка Δ_0^{-1} (рис. 4.11, а2). Тогда поля, генерируемые разными спинами, приобретут различные фазы и скомпенсируют друг друга.

Упражнение 4.75. Ансамбль спинов неоднородно уширен, так что его отстройки распределены следующим образом:

$$p(\Delta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta_0} e^{-(\Delta/\Delta_0)^2}.$$

В условиях упр. 4.74 вычислите средний вектор магнитного момента спина в этом ансамбле в зависимости от времени $t > 0$ во вращающемся базисе.

Подсказка: воспользуйтесь упр. Г.9, с).

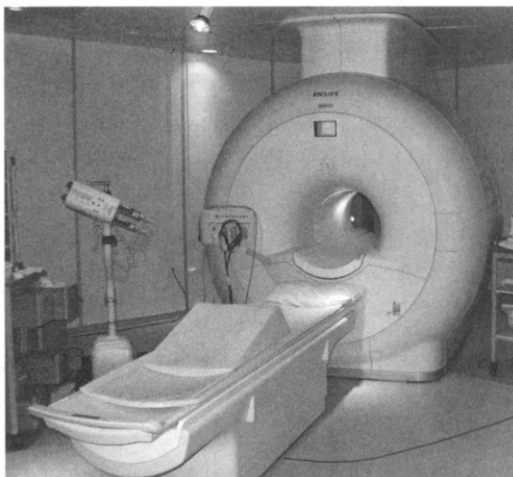
Ответ:

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \left(0, \frac{\hbar\gamma}{2} e^{-\frac{(\Delta_0 t)^2}{4}}, 0 \right). \quad (4.89)$$

Горизонтальная черта над $\langle \vec{\mu} \rangle$ означает, что после квантового усреднения выполняется еще статистическое усреднение по ансамблю. Обратите также внимание, что среднее направление спина во вращающемся базисе постоянно указывает вдоль оси y ; в стационарном базисе это соответствует прецессии с частотой ω , согласно упр. 4.65.

Неоднородное уширение часто является главным ограничивающим фактором для времени спада свободной индукции. В этом качестве оно не позволяет измерить временные постоянные, связанные с другими механизмами деградации спинового состояния — декогеренцией и термализацией, — известными под общим названием *однородного дефазирования* (homogeneous dephasing; также употребляется термин relaxation — *релаксация*). Но в таких приложениях, как медицинская томография (отступление 4.7), нам интересны как раз эти последние временные постоянные, поскольку именно они характеризуют для нас вещество образца.

К счастью, от эффекта неоднородного уширения можно избавиться при помощи красивой методики, известной как *спиновое эхо*. После окончания спада свободной индукции можно послать дополнительный импульс площадью π , чтобы перевернуть все блоховские векторы вокруг оси x . Как видно на рис. 4.11, это инвертирует угловые положения всех блоховских векторов по отношению к среднему по ансамблю. В результате расхождение спинов сменится на схождение: хотя каждый отдельный спин будет продолжать эволюционировать с той же скоростью, что и прежде, его движение *от среднего* превратится в движение *к среднему*. Спины воссоединятся в едином направлении в момент времени $t = 2t_0$, порождая при этом сильное электромагнитное поле — эхо-импульс.

Отступление 4.7. Магнитно-резонансная томография

Медицинский магнитно-резонансный сканер. Тороидальная структура — это сверхпроводящая катушка, порождающая постоянное поле. Источник: *Wikipedia*

Магнитно-резонансная томография основывается на регистрации спинного эхо-сигнала от протонов (ядер водорода), которые содержатся в молекулах воды внутри тела пациента. Данный сигнал анализируют, чтобы определить характерное время релаксации этих спинов, которое картируется в соответствии с положением источника сигнала, в результате чего получается трехмерное изображение. Поскольку время дефазирования зависит от вещества, в котором находятся излучающие спины, это трехмерное изображение отражает структуру органа и ткани, а также их патологии. Например, серое и белое вещества в человеческом мозге различаются по времени дефазирования примерно на 30%.

Для реализации томографии на практике мы должны знать, из какой точки исходит каждый эхо-сигнал. Чтобы этого добиться, постоянному полю придают градиент, благодаря которому резонансная частота зависит от координаты. Таким способом добиваются того, что на радиочастотное поле конкретной частоты отзываются только те протоны, что локализованы в тонком слое тела пациента. Для создания трехмерного изображения используется сложная последовательность импульсов, для каждого из которых постоянное поле имеет градиент в другом направлении. Результатом этого становится спинной эхо-сигнал со сложной временной зависимостью, которая несет в себе информацию о положении источников.

Одна из множества проблем магнитно-резонансной томографии состоит в том, что приготовить все спины в одинаковом начальном состоянии трудно. До включения радиочастотных импульсов спины протонов находятся в тепловом равновесии с окружающей средой, а это означает, что между плотностями протонов в состояниях со спинами «вверх» и «вниз» наблюдается лишь небольшая разница (упр. 5.54). В ходе эволюции блоховские векторы этих групп протонов будут ориентированы противоположно, и излучаемые ими сигналы в значительной степени компенсируют друг друга. В этом смысле налицо отличие от атомной физики (упр. 4.47), где энергетическая разница между уровнями, а значит, и различие в их населенности намного выше.

Упражнение 4.76. В условиях упр. 4.75, после истечения времени $t_0 \gg 1/\Delta_0$, ансамбль подвергается действию очень короткого π -импульса. Рассчитайте средний магнитный момент во вращающемся базисе в зависимости от времени $t > t_0$. Релаксацией пренебrecь.

Ответ:

$$\overline{\langle \vec{\mu} \rangle} = \left(0, -\frac{\hbar\gamma}{2} e^{-\frac{[\Delta_0(t-2t_0)]^2}{4}}, 0 \right). \quad (4.90)$$

Явления релаксации, которыми мы пренебрегли в данном расчете, ведут к ослаблению эхо-сигнала с ростом t_0 . Измерив действие, которое производит изменение t_0 на силу эха, можно измерить характерное время релаксации.

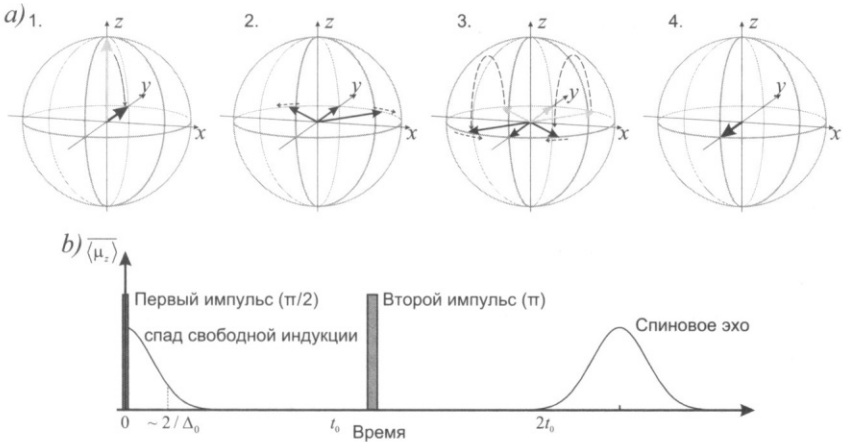


Рис. 4.11. Спад свободной индукции и спиновое эхо. *a* — представление на сфере Блоха: 1) импульс $\pi/2$ в момент $t = 0$ поворачивает блоховские векторы всех спинов так, чтобы они указывали в положительном y -направлении; 2) спины с различной отстройкой расходятся по экватору сферы Блоха; 3) в момент t_0 π -импульс переворачивает все блоховские векторы относительно оси x ; 4) в момент $2t_0$ блоховские векторы вновь сходятся; *b* — зависимость поля, генерируемого ансамблем (пропорционально среднему y -компоненту спина), от времени.

Еще одной крупной областью применения магнитного резонанса является метрология времени. Предположим, нам нужно узнать в точности, попадает ли наше радиочастотное поле в резонанс со спиновым переходом. Это можно сделать при помощи метода, известного как *спектроскопия Рамзея*.

Упражнение 4.77. Рассмотрите следующую процедуру, совершаемую над спином, который первоначально находился в состоянии $|\uparrow\rangle$.

1. Подается короткий импульс площадью $\pi/2$. Частота Раби выбирается такая, что $\Omega \gg \Delta$, поэтому мы можем пренебречь отстройкой во время импульса и считать площадь импульса равной в точности $\pi/2$.
2. Радиочастотное поле выключается на время t , так что атом свободно эволюционирует.
3. Подается еще один импульс площадью $\pi/2$.
4. Измеряется населенность состояний $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$.

Покажите, что конечная вероятность обнаружения частицы в состоянии $|\downarrow\rangle$ ведет себя как $|\psi_{\downarrow}|^2 = \cos^2 \Delta t / 2$. Решите задачу во вращающемся базисе двумя способами:

- 1) используя геометрию, чтобы проследить поведение вектора Блоха в зависимости от времени;
- 2) рассчитав матрицу оператора эволюции, задаваемую двумя импульсами и периодом свободной эволюции.

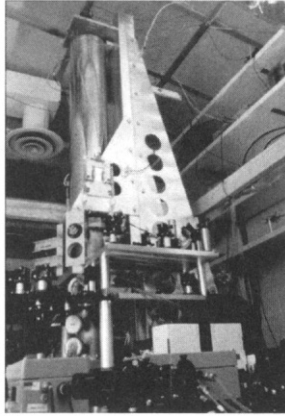
Преимущество метода Рамзея состоит в том, что в период свободной эволюции двухуровневую систему «не тревожат», оптимизируя тем самым ее точность как стандарта частоты (отступление 4.8).

Явление биений Рамзея (Ramsey fringes) может показаться парадоксальным. Зависимость конечной населенности от Δt возникает в результате свободной эволюции атома в период, когда радиочастотное поле выключено. Как может отстройка поля, которое выключено, повлиять на экспериментально измеряемую величину?

Ответ заключается в том, что отстройка радиочастотного поля определяет разность фаз двух импульсов $\pi/2$ по отношению друг к другу. Как мы выяснили в упр. 4.73, эта разность имеет принципиальное значение для конечной населенности энергетических уровней. При решении упр. 4.77 мы использовали один и тот же оператор для двух импульсов, что можно делать только в том случае, если оба импульса «вырезаны» из волны, описываемой уравнением (4.79). Другими словами, обе фазы жестко привязаны к единому «хронометру» $\cos \omega t$, который работает в течение всего эксперимента. Отстройка частоты этого хронометра сдвинула бы эти фазы, а следовательно, и повлияла бы на результат измерения конечной населенности.

Отступление 4.8. Атомные часы

В атомных часах в качестве «маятника» работает узкополосный, стабильный и воспроизводимый атомный переход. Например, определение секунды привязано к частоте, соответствующей переходу между двумя сверхтонкими уровнями основного состояния атома цезия-133. Секунда определена таким образом, что частота перехода $\Delta E/2\pi\hbar$, где ΔE — энергетическая разность между уровнями, равна в точности 9 192 631 770 Гц.



На фотографии (источник: *Wikipedia*) можно видеть атомные часы на цезиевом фонтане NIST F1 в Колорадо — главный стандарт времени и частоты в США во время написания данной книги. Относительная неопределенность этих часов составляет $3,1 \times 10^{-16}$, что соответствует примерно одной секунде за 100 млн лет. В часах используется спектроскопия Рамзея. Атомы цезия собираются и охлаждаются до миллионных долей кельвина в магнито-оптической ловушке, а затем «подбрасываются» вверх при помощи лазерного луча. В ходе свободного падения они подвергаются действию двух импульсов Рамзея, разделенных периодом свободного падения длительностью 0,56 с. Использование свободного падения гарантирует, что энергии атомных уровней не тревожатся в ходе экспериментального цикла. В постоянном поле нет необходимости, потому что расщепление энергетического уровня присутствует здесь само по себе.

После второго импульса Рамзея измеряется населенность двух атомных уровней. Полученные данные показывают, насколько частота генератора радиочастотного поля, выдающего импульсы Рамзея, отклонилась от частоты атомного перехода. Затем эта частота подстраивается при помощи механизма обратной связи.

4.8. Задачи

Задача 4.1. Найдите общий вид коммутатора $[\hat{L}_j, [\hat{L}_k, \hat{r}_l]]$. Проверьте свой ответ на конкретных примерах: $[\hat{L}_x, [\hat{L}_y, \hat{r}_z]]$, $[\hat{L}_x, [\hat{L}_x, \hat{r}_z]]$ и $[\hat{L}_x, [\hat{L}_z, \hat{r}_x]]$.

Задача 4.2. Выведите дифференциальный оператор (4.26) для квадрата момента импульса из выражения для лапласиана в сфериче-

ских координатах, известного из курса дифференциального исчисления:

$$\hat{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right], \quad (4.91)$$

а также из выражений (4.22), (4.27) и (4.28).

Задача 4.3. Из выражений (4.25) для компонентов момента импульса в сферических координатах выведите эти компоненты в декартовых координатах (4.20).

Задача 4.4. Покажите, что $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$ для компонентов момента импульса, выраженных как дифференциальные операторы:

- а) в декартовых координатах;
- б) в сферических координатах.

Задача 4.5'. Выполните упр. 4.4 в сферических координатах и проверьте согласованность результата с решением в декартовых координатах.

Задача 4.6. Для $l = 3/2$:

- а) найдите матрицы $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$, $\hat{L}_+$ и $\hat{L}_-$ в явном виде;
- б) убедитесь, что эти матрицы подчиняются $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \hat{L}^2$;
- в) определите коммутаторы $[\hat{L}_i, \hat{L}_j]$ в матричном виде и убедитесь, что они согласуются с известными коммутационными соотношениями для компонентов момента импульса.

Задача 4.7. Обобщите упр. 4.28 на подпространство с произвольной l . Рассмотрите собственное состояние $|lm_{\theta\phi}\rangle$ наблюдаемого $\hat{L}_{\vec{R}_{\theta\phi}}$ (которое представляет собой проекцию $\hat{L}$ на вектор $\vec{R}_{\theta\phi}$) с собственным значением $m\hbar$. Найдите средние значения $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ в этом состоянии и покажите, что они пропорциональны проекциям вектора $\vec{R}_{\theta\phi}$ на соответствующие координатные оси.

Подсказка: измените систему отсчета на (x', y', z') , где новая ось z' параллельна $\vec{R}_{\theta\phi}$, и выразите $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ и $\hat{L}_z$ через $\hat{L}_{x'}$, $\hat{L}_{y'}$ и $\hat{L}_{z'}$.

Задача 4.8. Считая радиус протона $r_p \sim 10^{-15}$ м, оцените долю времени, которую электрон в состоянии $|1, 0, 0\rangle$ проводит внутри ядра. Как изменится ваш ответ, если электрон заменить на мюон (мюон

имеет тот же заряд, что электрон, и массу $M_\mu = 207 M_e$)? Почему мюонные атомы считаются полезными для изучения ядерной структуры?

Задача 4.9. Рассмотрим два объекта с состояниями момента импульса $|l_1, m_1 = l_1\rangle$ и $|l_2, m_2 = l_2\rangle$. Покажите, что состояние тензорного произведения $|l_1, m_1 = l_1\rangle \otimes |l_2, m_2 = l_2\rangle$ представляет собой собственное состояние операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ (где $\hat{L} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2$) с собственными значениями, соответствующими $l = m = l_1 + l_2$.

Подсказка: выразите $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$ через $\hat{L}_{\pm,1}$ и $\hat{L}_{\pm,2}$.

Задача 4.10. Как мы знаем, операторы повышения и понижения $\hat{L}_\pm$ соответственно увеличивают и уменьшают собственное значение $\hat{L}_z$ на $\hbar$. Постройте аналогичные операторы $\hat{L}_\pm^x$, которые будут повышать и понижать собственные состояния $\hat{L}_x$. Считая $l = 1$:

- найдите матрицы $\hat{L}_\pm^x$ в каноническом базисе;
- найдите собственные состояния $\hat{L}_x$ в матричном виде;
- примените $\hat{L}_\pm^x$ к этим собственным состояниям и убедитесь, что их действие аналогично действию $\hat{L}_\pm$ на собственные состояния $\hat{L}_z$ (с точностью до произвольного фазового множителя, который может возникнуть случайным образом при определении собственных состояний $\hat{L}_x$).

Задача 4.11. Электрон в атоме водорода приготовлен в состоянии, которое одновременно является собственным для следующих наблюдаемых:

- энергии с собственным значением $\sim -(13,6/4)$ эВ,
- квадрата орбитального момента импульса с собственным значением $2\hbar^2$,
- проекции орбитального момента импульса на ось x с собственным значением $\hbar$.

Напишите волновую функцию этого состояния.

Задача 4.12. Найдите математическое ожидание и дисперсию наблюдаемых $\hat{x}$, $\hat{y}$ и $\hat{z}$ в состояниях

- $|2, 1, 0\rangle$,
- $|2, 1, 1\rangle$

атома водорода.

Задача 4.13. Рассматривая земной шар как сферу Блоха, напишите в каноническом базисе спиновое состояние, соответствующее вашему городу. Гринвичский меридиан соответствует $\phi = 0$.

Задача 4.14. Для произвольного спинового состояния $\psi_{\uparrow}|\uparrow\rangle + \psi_{\downarrow}|\downarrow\rangle$ выразите декартовы компоненты соответствующего блоховского вектора через $\psi_{\uparrow}$ и $\psi_{\downarrow}$.

Задача 4.15. Линейно поляризованные фотоны с разными углами поляризации α проходят сквозь четвертьволновую пластинку, оптическая ось которой ориентирована:

- а) горизонтально;
- б) под 45° .

Найдите положение результирующих состояний на блоховской сфере.

Задача 4.16. Рассмотрим эволюцию спинового состояния частицы со спином 1 под действием постоянного магнитного поля $\vec{B}$, ориентированного вдоль оси x . Начальное состояние $|\psi(0)\rangle = |m_s = 1\rangle$.

- а) Найдите спиновое состояние $|\psi(t)\rangle$ в зависимости от времени в матричном виде в собственном базисе $\hat{S}_z$.
- б) Найдите средние значения $\langle \hat{S}_x(t) \rangle$, $\langle \hat{S}_y(t) \rangle$ и $\langle \hat{S}_z(t) \rangle$ и убедитесь, что они согласуются с тем, что ожидалось бы в классическом варианте.
- в) Состояние $|\psi(t)\rangle$ измерено с использованием прибора Штерна — Герлаха с магнитным полем, ориентированным вдоль оси y . Найдите вероятность того, что наша частица окажется в каждой из трех этих точек. Согласуются ли величины, найденные в моменты, соответствующие $1/4$ и $3/4$ периода Лармора, с тем, чего следовало бы ожидать, исходя из пункта б)?

Задача 4.17. Электрон помещен в гармонический потенциал и приготовлен в состоянии, в котором его спин и кинетические степени свободы находятся в запутанном состоянии

$$|\Psi\rangle = \mathcal{N}(|\uparrow\rangle|\alpha\rangle + |\downarrow\rangle|-\alpha\rangle),$$

где $|\alpha\rangle$ — когерентное состояние.

- а) Найдите нормирующий множитель $\mathcal{N}$.
- б) Измеряется число вибрационных квантов n . Для каждого n найдите вероятность соответствующего результата и направление спина после измерения.
- в) Измеряется проекция спина на вектор $\vec{R}_{\theta\phi}$. Найдите вероятность каждого возможного результата и волновую функцию электрона после измерения в координатном базисе.

Задача 4.18. Выполните упр. 4.74, а), 4.75 и 4.76 с использованием шрёдингеровой эволюции спинного состояния в матричном виде, не обращаясь к геометрии Bloch-вектора.

Задача 4.19. В эксперименте со спиновым эхо вместо стандартной возбуждающей последовательности импульсов $\left(\frac{\pi}{2}, \pi\right)$ применяется последовательность:

- а) $\left(\frac{\pi}{2}, \theta\right)$;
- б) (θ, π) .

Вычислите амплитуду полученного эхо-сигнала в сравнении с тем, который получается под действием стандартной последовательности.

Задача 4.20. В эксперименте со спектроскопией Рамзея вместо стандартной последовательности возбуждающих импульсов $\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ применяется последовательность:

- а) $\left(\frac{\pi}{2}, \theta\right)$;
- б) $\left(\theta, \frac{\pi}{2}\right)$;
- в) (θ, θ) .

Вычислите населенность состояний $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ в зависимости от θ и Δt , где Δ есть отстройка радиочастотного поля, а t — продолжительность эксперимента.

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА СЛОЖНЫХ СИСТЕМ

*Нам виден всякий дефект, распад,
Диверсия или другой разлад,
Но мы не из тех, кто бьет в набат
И мечется оголтело...*

5.1. Оператор плотности

5.1.1. Чистые и смешанные состояния

Во многих практических случаях у нас может не быть полной информации о состоянии квантовой системы. Наши знания могут иметь вид *статистического ансамбля*, или *смеси*: скажем, нам известно, что наша система находится в состоянии $|\psi_1\rangle$ с вероятностью p_1 , в состоянии $|\psi_2\rangle$ с вероятностью p_2 и т. д., с $\sum p_i = 1$. Все состояния $|\psi_i\rangle$ являются нормированными, но необязательно должны быть ортогональными; их число также не обязано равняться размерности гильбертова пространства.

Ситуации подобного ограниченного знания возникают очень часто. Один такой случай — это смешанное состояние, возникающее, когда мы теряем какую-то часть запутанного состояния, что обсуждалось в подразд. 2.2.4. Другой пример — если мы располагаем большим набором частиц в различных состояниях и нас интересует значение наблюдаемого, которое усредняется по всем этим частицам, как в случае неоднородно расширенных ансамблей при магнитном резонансе (подразд. 4.7.4).

Первое, что нам нужно сделать, — это придумать удобное математическое представление для имеющейся у нас информации об ансамбле. В принципе, перечисление всех возможных состояний и их вероятностей тоже годилось бы, но оно слишком громоздко и неудобно в работе. Существует куда более краткое описание, достаточное для всех практических целей. Это оператор

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (5.1)$$

который называется *оператором плотности* (density operator) ансамбля. Матрица оператора плотности $\rho_{jk} = \langle v_j | \hat{\rho} | v_k \rangle$ в любом ортонормальном базисе $\{|v_j\rangle\}$ называется *матрицей плотности*¹.

Упражнение 5.1. Для следующих ансамблей в рамках гильбертова пространства поляризационных состояний единичного фотона напишите операторы плотности в нотации Дирака и матрицы плотности в каноническом базисе:

- a) $|H\rangle$;
- b) $\psi_H |H\rangle + \psi_V |V\rangle$;
- c) $|+45^\circ\rangle$ с вероятностью $1/2$, $|-45^\circ\rangle$ с вероятностью $1/2$;
- d) $(|H\rangle + |V\rangle)/\sqrt{2}$ с вероятностью $1/2$, $|H\rangle$ с вероятностью $1/4$, $|V\rangle$ с вероятностью $1/4$.

Упражнение 5.2. Пусть некоторый ансамбль измеряется в базисе $\{|v_m\rangle\}$ ($1 \leq m \leq N = \dim \mathbb{V}$). Покажите, что вероятность обнаружения конкретного элемента базиса $|v_m\rangle$ равна соответствующему диагональному элементу матрицы плотности в этом базисе:

$$\text{pr}_m = \langle v_m | \hat{\rho} | v_m \rangle. \quad (5.2)$$

Подсказка: возможно, вам будет полезно ознакомиться с условными вероятностями (см. разд. Б.2).

Физические свойства квантового состояния проявляются через измерения. Упр. 5.2 показывает, что оператор плотности можно использовать для вычисления вероятности любого результата измерений с тем же успехом и с той же точностью, что и полное словесное описание статистического ансамбля. Таким образом, оператор плотности содержит исчерпывающую информацию об измеряемых физических свойствах ансамбля. Именно это я имел в виду ранее, когда говорил, что оператора плотности «достаточно для всех практических целей».

¹ Математическое представление, связанное с оператором плотности, предложили независимо друг от друга Джон фон Нейман и Лев Ландау в 1927 г. Термины «матрица плотности» и «оператор плотности» традиционно взаимозаменяемы.

Уравнение (5.2) представляет собой расширение правила Борна, которое мы изучали в контексте постулата об измерениях, на статистические ансамбли.

Упражнение 5.3. Поляризация фотона описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$. Поляризация измеряется в:

- а) каноническом,
- б) диагональном,
- с) круговом базисах.

Выразите вероятность каждого результата измерения через элементы матрицы $\hat{\rho}$ в каноническом базисе.

Упражнение 5.4. Покажите, что оператор плотности ансамбля ненормированных состояний $\{|\psi_i\rangle\}$ задается как $\hat{\rho} = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$.

Определенный оператор плотности необязательно представляет уникальный ансамбль, что станет очевидным из следующего упражнения.

Упражнение 5.5. Покажите, что следующие статистические ансамбли представляются одним и тем же оператором плотности:

- $|H\rangle$ с вероятностью $1/2$, $|V\rangle$ с вероятностью $1/2$;
- $|+\rangle$ с вероятностью $1/2$, $|-\rangle$ с вероятностью $1/2$;
- $|R\rangle$ с вероятностью $1/2$, $|L\rangle$ с вероятностью $1/2$;
- $|\theta\rangle$ с вероятностью $1/2$, $|\pi/2 + \theta\rangle$ с вероятностью $1/2$.

Разные ансамбли, описываемые одним оператором плотности (как в примере выше), демонстрируют идентичное физическое поведение, так что принципиально невозможно определить при помощи измерений, с каким из ансамблей мы имеем дело. Следовательно, по крайней мере некоторая часть информации, содержащейся в описании ансамбля как списка состояний и вероятностей, избыточна. Это дополнительный аргумент в пользу того, чтобы применять вместо такого описания матрицу плотности.

В дальнейшем мы будем использовать термин «состояние» как для чистых состояний (pure states), которые можно связать с каким-то конкретным элементом $|\psi\rangle$ гильбертова пространства, так и статистических ансамблей, описываемых оператором плотности. Если состояние не является чистым и его оператор плотности нельзя записать в виде $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, мы будем называть его смешанным (mixed).

Упражнение 5.6. Покажите, что ансамбль (5.1) с двумя или более ненулевыми слагаемыми с неравными $|\psi_i\rangle$ не может соответствовать чистому состоянию.

Управление 5.7. Какие из состояний в упр. 5.1 являются чистыми?

Особый статус среди смешанных состояний принадлежит *полностью смешанным*, оператор плотности которых равен $\hat{\rho} = \hat{\mathbf{1}} / N$ (где N — размерность гильбертова пространства). Как станет ясно из следующего упражнения, если система находится в полностью смешанном состоянии, это значит, что о данной квантовой системе нет вообще никакой информации.

Упражнение 5.8. Покажите, что если полностью смешанное состояние измеряется в любом ортонормальном базисе, то вероятность каждого результата составляет $1/N$.

Упражнение 5.9. Покажите, что все состояния в упр. 5.5 полностью смешанные.

Упражнение 5.10. Для подпространства, соответствующего орбитальному квантовому числу $l = 1$, найдите матрицу плотности каждого из собственных состояний наблюдаемого $\hat{L}_x$ с собственными значениями $\hbar$, 0 и $-\hbar$. Затем найдите матрицу плотности смеси этих состояний с вероятностью $1/3$ для каждого. Покажите, что результат — полностью смешанное состояние.

Подсказка: воспользуйтесь результатом упр. 4.27.

5.1.2. Диагональные и недиагональные элементы

Упражнение 5.11. Покажите, что диагональные элементы матрицы плотности некоторого физического состояния в любом базисе:

- а) действительны и неотрицательны;
- б) в сумме дают единицу.

Упражнение 5.12*. Для каждого недиагонального элемента ρ_{mn} матрицы плотности покажите, что:

- а) верно неравенство

$$|\rho_{mn}|^2 \leq \rho_{mm} \rho_{nn}, \quad (5.3)$$

- б) неравенство (5.3) становится равенством для всех элементов матрицы плотности тогда и только тогда, когда соответствующее состояние является чистым.

Из последнего упражнения, а также из упр. 5.2 видно, какие разные роли играют диагональные и недиагональные элементы матрицы плотности. Диагональные элементы показывают *вероятности* обнаружения системы в соответствующих базисных состояниях. Недиagonalные же демонстрируют, до какой степени соответствующие элементы базиса находятся в состоянии суперпозиции или статистической смеси — иными словами, степень *когерентности* между этими элементами (см. подразд. 2.4.2). Вот пример.

Упражнение 5.13^s. Найдите матрицы плотности следующих состояний спина электрона в каноническом спиновом базисе:

а) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$;

б) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$;

- с) смесь равновероятных состояний из пунктов а) и б).

Ответ:

а) $\frac{1}{2}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)(\langle\uparrow| + \langle\downarrow|) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$;

б) $\frac{1}{2}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)(\langle\uparrow| - \langle\downarrow|) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$;

с) $\frac{1}{2}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Все эти состояния содержат равные доли компонентов «спин-вверх» и «спин-вниз», поэтому во всех трех случаях диагональные элементы матрицы плотности одинаковы и равны $1/2$. Однако первые два из приведенных состояний чистые, а третье — полностью смешанное. Соответственно, первые два состояния имеют значительные недиагональные элементы, тогда как третье таких элементов не имеет.

Упражнение 5.14^s. Для частицы со спином $3/2$ найдите матрицы плотности следующих состояний:

$$\text{a) } |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{3}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2} \right\rangle \right);$$

$$\text{b) } |\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right);$$

$$\text{c) } \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi\rangle + |\phi\rangle);$$

d) равновероятная смесь $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$.

Ответ:

$$\text{a) } \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & & \\ & 1 & 1 & \\ & & & \\ & & & \end{pmatrix};$$

$$\text{b) } \frac{1}{2} \begin{pmatrix} & & & \\ & & & \\ & & 1 & 1 \\ & & 1 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\text{c) } \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\text{d) } \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & & \\ 1 & 1 & & \\ & & 1 & 1 \\ & & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Это несколько более хитроумный пример. Здесь, сравнивая случаи c) и d), мы видим, что недиагональные элементы, ответственные

за когерентность между состояниями $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$, присутствуют в матрице плотности суперпозиции, но в матрице плотности смеси их нет. При этом в матрице плотности d) недиагональные элементы $\rho_{12}, \rho_{21}, \rho_{34}, \rho_{43}$, возникающие из-за когерентности внутри отдельных состояний $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$, не исчезают, хотя это состояние и представляет собой смесь. В случае d) неравенство (5.3) превращается в равенство для некоторых, но не для всех, недиагональных элементов $\hat{\rho}$.

Упражнение 5.15. Покажите, что оператор плотности является эрмитовым.

Упражнение 5.16. Покажите, что для заданного оператора плотности существует спектральное разложение вида¹

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^N q_i |v_i\rangle\langle v_i|, \quad (5.4)$$

где $\{|v_i\rangle\}$ — ортонормальный базис, все $q_i \geq 0$ и $\sum_i q_i = 1$.

Приведенное выше спектральное разложение, приводящее матрицу плотности к диагональному виду, полезно в нескольких отношениях. Оно может сразу же сообщить нам, например, чистым или смешанным является интересующее нас состояние (см. упражнение 5.18). Кроме того, отсутствие недиагональных элементов означает, что между разными элементами диагонализующего базиса нет квантовой когерентности, а это, в свою очередь, означает, что состояние является вероятностной смесью этих элементов.

Упражнение 5.17. Найдите спектральное разложение операторов плотности в упр. 5.1.

Упражнение 5.18. Сколько ненулевых элементов может содержать диагонализированная матрица плотности чистого состояния?

Упражнение 5.19. Покажите, что оператор плотности неотрицателен.

¹ Обратите внимание, что существование спектрального разложения (5.4) не следует тривиальным образом из определения матрицы плотности (5.1). Два данных выражения очень похожи, но элементы суммы в (5.4) составляют ортонормальный базис, тогда как в (5.1) это просто произвольные состояния.

А теперь определим аналог матрицы плотности для непрерывных базисов, к примеру, координатных и импульсных. Как говорилось в главе 3 [см. (3.13)], операторы в таких базисах представлены функциями двух переменных, а не матрицами. В частности, оператор плотности (5.1) представляется как

$$\rho(x, x') = \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle = \sum_i p_i \psi_i(x) \psi_i^*(x'), \quad (5.5)$$

где $\psi_i(x)$ — волновые функции компонентов статистического ансамбля.

Упражнение 5.20. Выразите оператор плотности состояния $a|0\rangle + b|1\rangle$ гармонического осциллятора:

- а) в базисе Фока;
- б) в координатном базисе.

Упражнение 5.21. Для нормированного оператора плотности $\hat{\rho}$ покажите, что:

- а) $\hat{\rho}$ не может быть унитарным ни для какого гильбертова пространства размерности больше единицы;
- б) равенство $\hat{\rho} = \hat{\rho}^2$ верно в том и только том случае, если $\hat{\rho}$ представляет чистое состояние.

Упражнение 5.22. Рассмотрим смесь состояний, которые и сами суть статистические ансамбли: состояние $\hat{\rho}_1$ возникает с вероятностью p_1 , $\hat{\rho}_2$ — с вероятностью p_2 и т.д., причем $\sum_i p_i = 1$.

- а) Покажите, что такой ансамбль описывается оператором плотности

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i \hat{\rho}_i. \quad (5.6)$$

- б) Покажите, что этот ансамбль не может быть чистым, если по крайней мере один из его членов является смешанным.

5.1.3. Эволюция

Упражнение 5.23. Покажите, воспользовавшись уравнением Шрёдингера, что:

- а) дифференциальное уравнение для эволюции матрицы плотности во времени есть

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}]; \quad (5.7)$$

б) эволюцию оператора плотности можно записать как

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger, \quad (5.8)$$

$$\text{где } \hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}.$$

Дифференциальные уравнения для эволюции операторов плотности, такие как (5.7), часто называют *основными кинетическими уравнениями* (master equations).

Обратите внимание на противоположные знаки в (5.7) и (5.8) по сравнению с похожими на них (3.129) и (3.127) соответственно. Такая разница может показаться странной: почему эволюция матрицы плотности противоположна эволюции других операторов? Вот ответ: уравнения в разд. 3.9 записаны в представлении Гейзенберга, где мы считаем, что квантовые состояния стационарны, а операторы, соответствующие физическим наблюдаемым, эволюционируют. Здесь, напротив, мы работаем в представлении Шрёдингера, где эволюционируют состояния и, следовательно, матрица плотности, которая выражает состояние. Поэтому операторы наблюдаемых в разд. 3.9 и оператор плотности в этом разделе имеют разную природу, и нет никаких причин ожидать, что их эволюция будет описываться одними и теми же уравнениями.

Упражнение 5.24. Для состояния, которое в момент времени $t = 0$ представляет собой:

а) суперпозицию $(|E_1\rangle + |E_2\rangle)/\sqrt{2}$,

б) статистическую смесь $(|E_1\rangle\langle E_1| + |E_2\rangle\langle E_2|)/2$

энергетических собственных состояний, напишите матрицу плотности в зависимости от времени в энергетическом собственном базисе.

Ответ:

$$\text{а) } \hat{\rho}(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{\frac{i}{\hbar}(E_2 - E_1)t} \\ e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - E_1)t} & 1 \end{pmatrix};$$

$$\text{б) } \hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Обобщая упр. 5.24, а), мы видим, что если ансамбль является статистической смесью энергетических собственных состояний, то его оператор плотности не меняется в ходе шрёдингеровой эволюции. Этот результат тоже может показаться удивительным. Мы уже усвоили, что состояния с энергией E в ходе эволюции приобретают квантовую фазу $e^{-iEt/\hbar}$. Состояния, связанные с разными энергиями, должны приобретать разные фазы — так почему же мы не видим этого в ходе эволюции матрицы плотности?

Ответ состоит в том, что, когда мы имеем дело со *статистической смесью* состояний, их фазы нефизичны: их невозможно наблюдать при измерении. Смесью состояний $|E_1\rangle$ и $|E_2\rangle$ ведет себя в эксперименте точно так же, как смесь состояний $|E_1\rangle e^{-iE_1t/\hbar}$ и $|E_2\rangle e^{-iE_2t/\hbar}$. Ранее уже говорилось (подразд. 5.1.1), что задача матрицы плотности — как можно более сжато описать физические свойства состояния. Два состояния с одинаковыми свойствами будут описываться одинаковой матрицей плотности.

Напротив, если мы имеем *когерентную суперпозицию* двух состояний с разными энергиями (упр. 5.24, б), то матрица плотности (а именно ее недиагональные элементы) действительно эволюционирует, отражая изменение физических свойств состояния со временем.

Упражнение 5.25. Для состояния, первоначально представляющего собой смесь $|\uparrow\rangle$ с вероятностью $3/4$ и $|\downarrow\rangle$ с вероятностью $1/4$, потренируйтесь находить эволюцию матрицы плотности $\hat{\rho}(t)$ в магнитном поле B , направленном вдоль оси x , с использованием трех разных методов:

- вычислив эволюцию каждого компонента (чистого состояния) отдельно, а затем получив матрицу плотности ансамбля;
- вычислив матрицу плотности начального ансамбля, а затем проследив ее эволюцию согласно (5.8);
- решив уравнение (5.7) в матричном виде.

5.2. След

След оператора $\hat{A}$ равен сумме диагональных элементов его матрицы:

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_{m=1}^n A_{nn}. \quad (5.9)$$

Следы играют важную роль, поскольку выражают действие измерений на квантовые состояния в случаях, когда эти состояния записаны в виде матриц плотности. Прежде чем разбирать этот вопрос подробно, вспомним некоторые существенные свойства следа, известные нам из линейной алгебры, и выведем несколько новых его свойств, значимых именно в квантовой физике.

Упражнение 5.26. Покажите, что след оператора одинаков во всех ортонормальных базисах.

Этим объясняется, почему мы говорим «след оператора», а не «след матрицы». Один и тот же оператор будет иметь разные матрицы в разных ортонормальных базисах, но сумма диагональных элементов во всех этих матрицах будет одинакова.

Упражнение 5.27. Покажите, что след оператора плотности, представляющего какое-либо физическое состояние, равен единице.

Упражнение 5.28^s. Операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ характеризуются матрицами A_{ij} и B_{ij} соответственно в одном и том же ортонормальном базисе. Покажите, что

$$\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \sum_{ij} A_{ij} B_{ji}. \quad (5.10)$$

Упражнение 5.29. Покажите, что для любых операторов:

- а) $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A})$;
- б) $\text{Tr}(\hat{A}_1 \dots \hat{A}_k) = \text{Tr}(\hat{A}_k \hat{A}_1 \dots \hat{A}_{k-1})$ (*цепное правило* — chain rule).

Упражнение 5.30. Найдите пример, показывающий, что в общем случае $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) \neq \text{Tr}(\hat{B}\hat{A}\hat{C})$.

Упражнение 5.31. Для оператора $\hat{A}$ и векторов $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ покажите, что

$$\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle = \text{Tr}(\hat{A} |\phi\rangle \langle \psi|). \quad (5.11)$$

Упражнение 5.32. Покажите, что след квадрата матрицы плотности полезен в качестве меры степени чистоты состояния. В частности, для физического состояния $\hat{\rho}$ покажите, что $1/N \leq \text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1$, где первое неравенство становится равенством тогда и только тогда, когда $\hat{\rho}$ представляет полностью смешанное состояние, а второе — тогда и только тогда, когда $\hat{\rho}$ описывает чистое состояние.

Теперь давайте переформулируем постулат квантовой механики об измерениях на языке матриц плотности.

Упражнение 5.33. Пусть проективное измерение в базисе $\{|v_m\rangle\}$ выполняется на ансамбле $\hat{\rho}$ и выдает некоторый результат $|v_m\rangle$. Покажите, что:

- а) (ненормированный) ансамбль после измерения задается выражением

$$\hat{P}_m \hat{\rho} \hat{P}_m, \quad (5.12)$$

где $\hat{P}_m = |v_m\rangle\langle v_m|$ — оператор проекции;

- б) вероятность получения результата $|v_m\rangle$ равна

$$pr_m = \text{Tr}(\hat{P}_m \hat{\rho}) = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_m). \quad (5.13)$$

Упражнение 5.34. При помощи уравнения (5.12) определите вероятность обнаружения поляризации $+45^\circ$ у фотона, описанного каждым из ансамблей упр. 5.1. Убедитесь, что ваши результаты согласуются с вероятностями, которые получаются, если рассматривать каждое состояние как статистический ансамбль чистых состояний.

Упражнение 5.35. Состояние представлено в базисе $\{|v_m\rangle\}$ матрицей

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \cdots & \rho_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{N1} & \cdots & \rho_{NN} \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

Предположим, что это состояние измеряется в том же базисе $\{|v_m\rangle\}$. Измерение неразрушающее, но его результат нам неизвестен. Покажите, что матрица плотности после измерения будет иметь вид

$$\hat{\rho}_{\text{after}} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & & \\ & \ddots & \\ & & \rho_{NN} \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

То есть недиагональные элементы матрицы плотности после измерения исчезнут, а диагональные останутся прежними.

Подчеркну, что это простое правило действует только в том случае, если матрица плотности записана в том же самом базисе, в котором производится измерение. Проиллюстрируем это на примере.

Упражнение 5.36. Фотон, поляризованный под $+45^\circ$, измеряется в каноническом базисе. Найдите матрицу плотности до и после измерения:

- а) в каноническом базисе;
- б) в диагональном базисе.

Упражнение 5.37. Покажите, что среднее значение любого наблюдаемого $\hat{V}$ в состоянии $\hat{\rho}$ равно

$$\langle V \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{V}) = \text{Tr}(\hat{V} \hat{\rho}). \quad (5.16)$$

Упражнение 5.38. Пользуясь аппаратом матриц плотности в представлении Шрёдингера, а именно уравнениями (5.7) и (5.16), воспроизведите уравнение движения Гейзенберга (3.129) для среднего значения произвольного наблюдаемого:

$$\frac{d}{dt} \langle V \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{V}] \rangle. \quad (5.17)$$

5.3. Частичный след

Вернемся теперь к вопросу, который заинтересовал нас в главе 2. Предположим, что у Алисы и Боба имеется общее состояние $\hat{\rho}_{AB}$, представляющее собой матрицу плотности над гильбертовым пространством тензорных произведений. Алиса либо теряет свою часть состояния, либо измеряет ее в некотором базисе, но не сообщает Бобу результат. Какой станет часть состояния, принадлежащая Бобу? Или, формулируя вопрос на языке, который мы только что изучили, чему будет равен оператор плотности состояния Боба [иногда такой оператор называют *приведенным оператором плотности* (reduced density operator) Боба]?

Частичным следом (partial trace) двусоставного состояния $\hat{\rho}_{AB}$ над гильбертовым пространством $\mathbb{V}_A$ является оператор в гильбертовом пространстве $\mathbb{V}_B$, определяемый формулой

$$\text{Tr}_A(\hat{\rho}_{AB}) = \sum_{m=1}^N {}_A \langle v_m | \hat{\rho}_{AB} | v_m \rangle_A, \quad (5.18)$$

где $\{|v_m\rangle\}$ — ортонормальный базис в $\mathbb{V}_A$.

Упражнение 5.39. У Алисы и Боба имеется общее состояние $\hat{\rho}_{AB}$. Алиса производит локальное измерение в базисе $\{|v_m\rangle\}$ над своей частью ансамбля. Покажите, что:

- а) если известен конкретный результат измерения Алисы $|v_m\rangle$, то результирующее (ненормированное) двусоставное состояние описывается выражением $\hat{\Pi}_{A,m} \hat{\rho}_{AB} \hat{\Pi}_{A,m} = |v_m\rangle\langle v_m| \otimes \langle v_m| \hat{\rho}_{AB} |v_m\rangle$, а относящаяся к Бобу часть этого состояния равна

$$\hat{\rho}_{B,m} = \langle v_m | \hat{\rho}_{AB} | v_m \rangle = \text{Tr}_A (\hat{\Pi}_{A,m} \hat{\rho}_{AB}) = \text{Tr}_A (\hat{\Pi}_{A,m} \hat{\rho}_{AB} \hat{\Pi}_{A,m}); \quad (5.19)$$

- б) если результат измерения Алисы неизвестен, то приведенный оператор плотности состояния Боба представляет собой частичный след

$$\hat{\rho}_B = \text{Tr}_A (\hat{\rho}_{AB}).$$

Чтобы сделать эту теорию чуть менее абстрактной, рассмотрим пару примеров.

Упражнение 5.40. Проведите следующие вычисления в условиях упр. 2.45.

- а) В упомянутом упражнении мы нашли ансамбли, описывающие состояния фотона Боба, когда Алиса проводит свое измерение в каноническом и диагональном базисах. Для каждого из этих ансамблей найдите соответствующую матрицу плотности в каноническом базисе. Убедитесь, что матрица плотности не зависит от базиса Алисы.
- б) Найдите приведенные матрицы плотности фотона Боба в каноническом базисе с использованием частичного следа. Убедитесь, что результат согласуется с результатом пункта а).

Упражнение 5.41. Для каждого из четырех белловских состояний найдите приведенный оператор плотности, связанный с кубитами Алисы и Боба.

Приведенный оператор плотности Боба должен быть одинаковым вне зависимости от того, какой базис выберет Алиса для своего измерения. Если бы это было не так, Алиса могла бы мгновенно передавать информацию Бобу, просто выбирая определенный базис или решая,

выбросить ли свою часть состояния (см. упр. 2.43). Давайте покажем это строго на языке операторов плотности.

Упражнение 5.42. Покажите, что частичный след не зависит от выбора базиса Алисы, в котором он вычисляется.

Упражнение 5.43. Покажите, что $\text{Tr}_A(\hat{\rho}_{AB})$ имеет след 1, если $\hat{\rho}_{AB}$ — физическое состояние.

Упражнение 5.44. Пусть Алиса и Боб располагают двусоставным состоянием. Покажите, что:

- а) если двусоставный ансамбль находится в чистом разделимом (незапутанном) состоянии, то приведенные операторы плотности и Алисы, и Боба также представляют собой чистые состояния;
- б) приведенный оператор плотности запутанного состояния всегда представляет собой смешанное состояние.

Подсказка: воспользуйтесь уравнением (2.15).

Математический аппарат частичного следа позволяет нам воспроизвести предыдущий результат, описывающий действие измерения на матрицу плотности (упр. 5.35), но с более глубоким анализом измерения, при помощи модели фон Неймана.

Упражнение 5.45. Пусть начальное состояние квантовой системы описывается в некотором базисе $\{|v_i\rangle\}$ оператором плотности (5.14). Производится измерение этой системы в том же базисе $\{|v_i\rangle\}$. Данное измерение запутывает систему с прибором согласно (2.33). Покажите, что если удалить прибор из этого запутанного состояния, то приведенная матрица плотности системы будет иметь только диагональные элементы, как в (5.15).

Этот результат имеет важные следствия для декогеренции, которая, согласно нашему обсуждению в подразд. 2.4.2, может быть интерпретирована как «ненамеренное» фон-неймановское измерение системы средой в предпочтительном для декогеренции базисе и их взаимному запутыванию. После потери информации о среде состояние системы будет описываться частичным следом матрицы плотности этого запутанного состояния. В результате матрица плотности системы (записанная в предпочтительном с точки зрения декогеренции базисе) потеряет недиагональные элементы. В разд. 5.5 мы рассмотрим несколько примеров этого процесса.

Нахождение частичного следа — необратимая операция: получить $\hat{\rho}_{AB}$ обратно из $\text{Tr}_A(\hat{\rho}_{AB})$ невозможно. Это математическая причина того, что декогеренция, в отличие от унитарной квантовой эволюции, представляет собой необратимый процесс.

5.4. Матрица плотности и вектор Блоха

В разделе 4.5 мы связали любое состояние кубита с вектором на сфере Блоха. Если физическая система, связанная с кубитом, представляет собой частицу со спином $1/2$, то координаты блоховского вектора равны средним значениям соответствующих проекций момента импульса (упр. 4.48, с). Теперь я хотел бы расширить понятие блоховского вектора на матрицы плотности.

Это расширение вполне прямолинейно. Для любого ансамбля

$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ вектор Блоха определяется как

$$\vec{R}_\rho = \sum_i p_i \vec{R}_i, \tag{5.20}$$

где каждый $\vec{R}_i$ — это блоховский вектор соответствующего состояния $|\psi_i\rangle$. То есть блоховский вектор ансамбля есть взвешенное среднее его компонентов.

Упражнение 5.46. Покажите, что декартовы координаты блоховского вектора $\vec{R}_\rho$, определяемого (5.20), равны средним значениям наблюдаемых $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{\sigma}_z$ в соответствующем состоянии $\hat{\rho}$.

Подсказка: согласно (5.16), вам нужно показать, что

$$\vec{R}_\rho = \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{\sigma}]. \tag{5.21}$$

Упражнение 5.47^s. Выразите вектор Блоха явно через элементы матрицы плотности

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{\uparrow\uparrow} & \rho_{\uparrow\downarrow} \\ \rho_{\downarrow\uparrow} & \rho_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}.$$

Ответ:

$$R_x = \langle \sigma_x \rangle = \rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\downarrow\uparrow}; \tag{5.22a}$$

$$R_y = \langle \sigma_y \rangle = i\rho_{\uparrow\downarrow} - i\rho_{\downarrow\uparrow}; \tag{5.22b}$$

$$R_z = \langle \sigma_z \rangle = \rho_{\uparrow\uparrow} - \rho_{\downarrow\downarrow}. \tag{5.22c}$$

Упражнение 5.48. Покажите, что:

- а) длина блоховского вектора смешанного состояния меньше единицы;
- б) блоховский вектор полностью смешанного состояния равен нулю.

Упражнение 5.49. Мы показали ранее [см. (4.77)], что блоховский вектор частицы со спином $1/2$ в чистом состоянии прецессирует в магнитном поле таким же образом, как классический магнитный момент. Покажите, что этот результат применим также к состояниям, описываемым операторами плотности.

Упражнение 5.50. Вычислите траекторию блоховского вектора из зависящей от времени матрицы плотности, полученной в упр. 5.25, и покажите, что он прецессирует вокруг магнитного поля в соответствии с предсказанием (4.77) классической физики.

Упражнение 5.51. Покажите, что длина блоховского вектора связана с показателем чистоты соответствующего состояния (упр. 5.32) согласно

$$\text{Tr } \hat{\rho}^2 = \frac{|\vec{R}_\rho|^2}{2} + \frac{1}{2}. \quad (5.23)$$

Подсказка: пусть состояние $\hat{\rho}$ соответствует спектральному разложению $\hat{\rho} = p|v_1\rangle\langle v_1| + (1-p)|v_2\rangle\langle v_2|$. Соотнесите $|\vec{R}_\rho|$ и $\text{Tr } \hat{\rho}^2$ с p .

Упражнение 5.52. Покажите, что любой блоховский вектор длины $|\vec{R}_\rho| \leq 1$ единственным образом задает соответствующую матрицу плотности.

Резюмируем полученные результаты. Как и в случае с чистыми состояниями, вектор Блоха смешанного состояния соответствует квантовому среднему значению спинового векторного оператора в этом состоянии. Существует взаимно-однозначное соответствие между состояниями (чистыми или смешанными) и блоховскими векторами. Однако блоховские векторы смешанных состояний заканчиваются *внутри* блоховской сферы, а не на ее поверхности. Чем более смешанным является состояние, тем короче вектор Блоха; полностью смешанное состояние отвечает нулевому вектору в центре сферы Блоха.

5.5. Матрица плотности и магнитный резонанс

В главе 4 мы изучали основы магнитного резонанса. Однако формализм чистого состояния, который мы использовали, был недостаточен для рассмотрения взаимодействия между спинами и средой, или *релаксации (однородного дефазирования)*, которая является существенной частью этого явления. Поскольку релаксация связана с потерей чистоты состояния, ее анализ требует использования операторов плотности.

Существует два первичных механизма релаксации: декогеренция и термализация.

5.5.1. Декогеренция

Декогеренция спиновых состояний вызывается их взаимодействием; по этой причине данный механизм называется *спин-спиновой релаксацией*. Как обычно и бывает с внутренними степенями свободы (подразд. 2.4.2), предпочтительным для декогеренции является энергетический собственный базис. Когда частицы взаимодействуют между собой, населенности энергетических уровней не меняются, но их энергетические собственные состояния набирают случайные фазы, что ведет к потере когерентности между частицами.

Мы будем изучать релаксацию в отсутствие радиочастотного поля, считая, что оно прикладывается импульсно и, соответственно, декогеренция во время импульсов незначительна. Направим ось z вдоль постоянного поля $\vec{B}_0$, так что гамильтониан (4.76) примет вид $\hat{H} = -\hat{\mu} \cdot \vec{B}_0 = -\gamma \hat{S}_z B_0$. Тогда собственный базис оператора $\hat{S}_z$ становится также собственным базисом нашего гамильтониана и, следовательно, предпочтительным с точки зрения декогеренции базисом¹, что облегчает анализ.

В разделе 5.3 мы выяснили, что декогеренция устраняет недиагональные элементы матрицы плотности. Однако этот результат был получен для единственного декогерирующего объекта. В нашем случае матрица плотности представляет большой ансамбль частиц, и не все они декогерируют одновременно. Следовательно, декогеренция действует на матрицу плотности более сложным образом.

¹ Это верно в случае и стационарного, и вращающегося базиса, поскольку оба они состоят из собственных состояний $\hat{S}_z$.

Примем следующую модель. Будем считать, что каждая частица, взаимодействуя со средой, декогерирует очень быстро — по существу, мгновенно. Это влечет за собой потерю недиагональных элементов матрицы плотности, связанной с данной конкретной частицей. Однако вероятность того, что подобное событие произойдет для каждой частицы в пределах определенного малого интервала времени, конечна и пропорциональна длительности этого интервала. Тогда при усреднении по множеству частиц, составляющих ансамбль, недиагональные элементы матрицы плотности будут уходить постепенно.

Упражнение 5.53. Пусть вероятность того, что отдельная частица декогерирует в пределах малого интервала времени Δt , составляет $\Delta t / T_2$, где T_2 — постоянная, известная как характерное время декогеренции.

- а) Покажите, что в отсутствие эволюции гамильтониана элементы матрицы плотности убывают согласно дифференциальному уравнению

$$\left[\frac{d}{dt} \rho_{ij}(t) \right]_{\text{decoh}} = \begin{cases} 0, & i = j \\ -\rho_{ij}(t) / T_2, & i \neq j \end{cases}, \quad (5.24)$$

где индекс «decoh» указывает на то, что убывание происходит в результате действия механизма декогеренции.

- б) § Покажите, что решение приведенного выше уравнения представляет собой

$$\begin{pmatrix} \rho_{\uparrow\uparrow}(t) & \rho_{\uparrow\downarrow}(t) \\ \rho_{\downarrow\uparrow}(t) & \rho_{\downarrow\downarrow}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{\uparrow\uparrow}(0) & \rho_{\uparrow\downarrow}(0)e^{-t/T_2} \\ \rho_{\downarrow\uparrow}(0)e^{-t/T_2} & \rho_{\downarrow\downarrow}(0) \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

Такое поведение — постоянность диагональных элементов матрицы плотности и экспоненциальное убывание недиагональных — характерно для декогеренции не только спиновых ансамблей, но и широкого спектра физических ситуаций.

5.5.2. Термализация

Второй механизм — это *спин-решеточная релаксация*, связанная с тепловым движением ядер. Данный механизм ответствен за приве-

дение спинового состояния в тепловое равновесие со средой — т. е. в состоянии с матрицей плотности

$$\hat{\rho}_0 = \begin{pmatrix} \rho_{\uparrow\uparrow,0} & 0 \\ 0 & \rho_{\downarrow\downarrow,0} \end{pmatrix}, \quad (5.26)$$

где населенности верхнего и нижнего энергетических уровней связаны между собой согласно распределению Больцмана

$$\frac{\rho_{\downarrow\downarrow,0}}{\rho_{\uparrow\uparrow,0}} = \frac{\exp(-E_{\downarrow}/kT)^{(4,73)}}{\exp(-E_{\uparrow}/kT)} = \exp\left(-\frac{\gamma\hbar B_0}{kT}\right),$$

при отсутствии когерентности между этими уровнями.

Упражнение 5.54. Поле в медицинском МРТ-сканере, где используются спины протонов, составляет 1,5 Тесла. Вычислите среднюю разницу между долями протонов в состояниях «спин-вверх» и «спин-вниз» при комнатной температуре в условиях теплового равновесия.

Упражнение 5.55. Найдите величину и направление блоховского вектора $\vec{R}_0$, соответствующего (5.26).

Ответ (в декартовых координатах):

$$\vec{R}_0 = \left(0, 0, \text{th} \frac{\gamma\hbar B_0}{2kT}\right)^{\gamma\hbar B_0/2kT \ll 1} \approx \left(0, 0, \frac{\gamma\hbar B_0}{2kT}\right). \quad (5.27)$$

По той же логике, что и выше, мы считаем, что диагональные элементы экспоненциально убывают и сходятся к своим тепловым значениям, т. е.

$$\rho_{\uparrow\uparrow}(t) - \rho_{\uparrow\uparrow,0} = [\rho_{\uparrow\uparrow}(0) - \rho_{\uparrow\uparrow,0}]e^{-t/T_1}; \quad (5.28a)$$

$$\rho_{\downarrow\downarrow}(t) - \rho_{\downarrow\downarrow,0} = [\rho_{\downarrow\downarrow}(0) - \rho_{\downarrow\downarrow,0}]e^{-t/T_1}, \quad (5.28b)$$

где T_1 — характерное время термализации.

Упражнение 5.56^s. Покажите, что спад (5.28) соответствует следующим дифференциальным уравнениям:

$$\left[\frac{d}{dt}\rho_{\uparrow\uparrow}(t)\right]_{\text{therm}} = -[\rho_{\uparrow\uparrow}(t) - \rho_{\uparrow\uparrow,0}]/T_1; \quad (5.29a)$$

$$\left[\frac{d}{dt}\rho_{\downarrow\downarrow}(t)\right]_{\text{therm}} = -[\rho_{\downarrow\downarrow}(t) - \rho_{\downarrow\downarrow,0}]/T_1. \quad (5.29b)$$

Введем соглашение. Конечно, термализация действует не только на диагональные элементы матрицы плотности, но и на недиагональные ее элементы, вызывая их экспоненциальный спад. Однако мы будем рассматривать этот спад как часть процесса декогеренции, так что уравнение (5.24) включает в себя вклад термализации в спад недиагональных элементов. Поэтому мы будем писать дифференциальное уравнение для термализации матрицы плотности в виде

$$\left[\frac{d}{dt} \rho_{ij}(t) \right]_{\text{therm}} = \begin{cases} -[\rho_{ii}(t) - \rho_{ii,0}] / T_1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (5.30)$$

не забывая о том, что термализация недиагональных элементов учитывается в уравнении для декогеренции.

Очевидным следствием этого соглашения является то, что T_2 не может быть больше T_1 : недиагональные элементы убывают под действием как декогеренции, так и термализации, а диагональные — только термализации. Фактически спины, как правило, декогерируют намного быстрее, чем термализуются, так что $T_2 \ll T_1$. Ткани человеческого мозга, например, имеют $T_1 \sim 1$ с и $T_2 \sim 0,1$ с.

В других физических условиях, однако, T_2 может достигать значения $2T_1$. Это возможно, если механизм термализации отличается от механизма декогеренции, т.е. если он не может быть смоделирован как постепенное примешивание состояния теплового равновесия к спиновому ансамблю. Такие ситуации часто встречаются, к примеру, в двухуровневых системах, соответствующих оптическим переходам в атомах и молекулах. В упр. 5.60 мы покажем, что условие $T_2 \leq 2T_1$ должно выполняться всегда, в противном случае эволюция приведет к нефизичному оператору плотности.

5.5.3. Релаксация и вектор Блоха

Общая эволюция матрицы плотности есть результат совокупного действия и гамильтониана, и релаксации. Она задается выражением

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \left[\frac{d\hat{\rho}}{dt} \right]_{\text{relax}}, \quad (5.31)$$

где первый член соответствует уравнению Шрёдингера (5.7), а второй и третий — декогеренции и термализации (5.24) и (5.30) соответственно. А теперь применим этот результат к эволюции вектора Блоха.

Упражнение 5.57. Покажите, что поведение компонентов вектора Блоха, соответствующих уравнению (5.31), есть

$$\frac{d\vec{R}}{dt} = \gamma \vec{R} \times \vec{B} + \left[\frac{d\vec{R}}{dt} \right]_{\text{relax}}, \quad (5.32)$$

где

$$\left[\frac{dR}{dt} \right]_{\text{relax}} = \left(-\frac{R_x}{T_2}, -\frac{R_y}{T_2}, -\frac{R_z - R_{0z}}{T_1} \right) \quad (5.33)$$

а $\vec{R}_0$ — вектор Блоха (5.27) состояния теплового равновесия.

Управление 5.58. Покажите, что следующее решение удовлетворяет уравнению (5.32) для гамильтониана в приближении вращающейся волны (4.85) в отсутствие радиочастотного поля со спином, отстроенным на Δ от частоты вращающейся волны.

$$\begin{aligned} R_x(t) &= [R_x(0) \cos \Delta t - R_y(0) \sin \Delta t] e^{-t/T_2}; \\ R_y(t) &= [R_y(0) \cos \Delta t + R_x(0) \sin \Delta t] e^{-t/T_2}; \\ R_z(t) &= R_0 + [R_z(0) - R_0] e^{-t/T_1}. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Упражнение 5.59^s. Постройте траекторию конца вектора Блоха в условиях упр. 5.58 для:

- a) $\Delta \neq 0$, $T_1 = 0$, $T_2 = 0$;
- b) $\Delta = 0$, $T_2 = T_1/10$;
- c) $\Delta = 0$, $T_2 = 2T_1$;
- d) $\Delta = 5T_1^{-1}$, $T_2 = 2T_1$.

Считаем, что температура $T = 0$. Начальное состояние соответствует спину, указывающему вдоль оси x .

Ответ: см. рис. 5.1.

Мы видим, что декогеренция заставляет горизонтальные (x и y) компоненты блоховского вектора экспоненциально убывать, тогда как вертикальный (z) его компонент стремится к значению, которое соответствует тепловому равновесию. По этой причине исторически сложилось, что термализацию диагональных элементов матрицы плотности иногда называют *продольной* (longitudinal) релаксацией, тогда как потеря недиагональных элементов из-за декогеренции называется *поперечной* релаксацией. Мы видим, что эта терминология

не совсем уместна; здесь больше подошли бы термины «вертикальная» и «горизонтальная» соответственно.

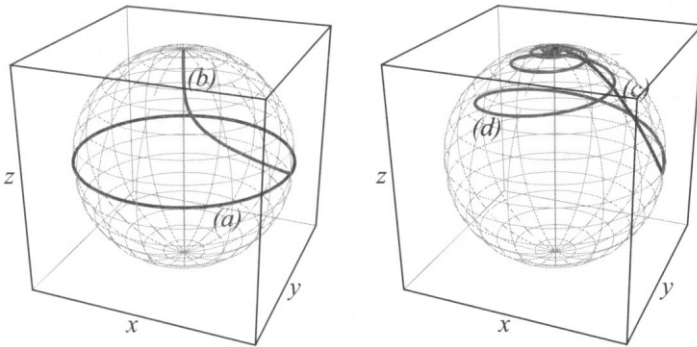


Рис. 5.1. Траектории конца вектора Блоха из упр. 5.59

Упражнение 5.60*. Покажите, что T_2 не может быть больше $2T_1$.

Подсказка: примите, что температура — абсолютный нуль. Примените эволюцию (5.32) на бесконечно малом временном промежутке во вращающемся базисе к вектору Блоха с полярными координатами $(\theta, 0)$, такими что $\theta \ll 1$.

Теперь, когда мы понимаем, как обращаться с релаксацией, мы готовы вернуться к вопросу, который рассматривался в конце главы 4: измерению времени релаксации. Как там говорилось, это измерение важно для приложений, связанных с магнитно-резонансным сканированием, потому что позволяет различать между собой ткани человеческого тела. Однако однородная релаксация часто теряется на фоне неоднородного уширения, которое происходит намного быстрее.

Поэтому для измерения времени поперечной релаксации используют спиновое эхо. В подразд. 4.7.4 мы провели предварительные расчеты, чтобы понять, какие физические принципы стоят за обращением неоднородного дефазирования, которое, собственно, и порождает эхо. Наша следующая задача — учесть эффекты однородной релаксации.

Упражнение 5.61. Для неоднородно уширенного спинового ансамбля с неоднородной шириной Δ_0 , много большей, чем обратные времена релаксации T_1^{-1} , T_2^{-1} , покажите, что средний магнитный момент элемента ансамбля (упр. 4.76) при нулевой температуре задается выражением

$$\langle \ddot{\mu} \rangle = \frac{\hbar \gamma}{2} \left(0, -e^{-\frac{[\Delta_0(t-2t_0)]^2}{4}} \cdot e^{-t/T_2}, 1 - 2e^{-(t-t_0)/T_1} + e^{-t/T_1} \right). \quad (5.35)$$

В стационарном базисе этот магнитный момент будет прецессировать вокруг оси z . Поэтому величина эхо-сигнала полностью определяется его горизонтальным компонентом, который снижается с характеристическим временем T_2 .

Выполняя это упражнение, вы, возможно, заметили одну тонкость. Чтобы рассчитать спиновый эхо-сигнал, нам пришлось усреднить вектор Блоха по ансамблю, включающему в себя все отстройки. Но состояние, связанное с каждой конкретной отстройкой, само по себе не является чистым (из-за однородной релаксации), а это означает, что оно тоже представляет некоторый ансамбль, как уже говорилось ранее в этой главе.

Мы обращались с этими ансамблями совершенно по-разному. При декогеренции и термализации мы непрерывно усредняли по ансамблю в ходе всей эволюции (см. упр. 5.53), учитывая таким образом в реальном времени влияние этих явлений на спиновое состояние. Но при работе с неоднородно уширенным ансамблем усреднение проводилось только один раз, в конце вычислений. Почему такая разница?

Причина в том, что эти два типа ансамблей порождает разная физика. Однородная релаксация возникает из-за запутывающего взаимодействия между системой и средой. Поскольку среда нам не подконтрольна, мы можем отбрасывать ее (т.е. вычислять частичный след по ней) без потери какой бы то ни было ценной информации; так что состояние системы становится необратимо смешанным. Неоднородное уширение, напротив, вызывается не запутыванием, а небольшой разницей физических условий (и гамильтонианов), в которых эволюционирует каждый спин. Более того, эти условия не меняются со временем. Поэтому эволюция каждого отдельного члена ансамбля полностью предсказуема и обратима. Мы должны отслеживать эту эволюцию без преждевременного усреднения, чтобы иметь возможность предсказать синхронизацию спинов и эхо.

Теперь обратимся ко времени продольной релаксации. Его можно измерить, например, при помощи *метода перехода через ноль*. Забавно, что в этом методе обращение неоднородного дефазирования не требуется. Идея заключается в том, чтобы сначала перевернуть блоховский вектор термализованного ансамбля при помощи π -импульса. После этого ансамбль будет постепенно термализоваться заново. Блоховский

вектор релаксирует из направления вниз к направлению вверх, так что в какой-то момент времени его длина будет равна в точности нулю.

Чтобы измерить длину вектора Блоха после того, как он прорелаксирует в течение некоторого времени t_0 , мы применяем $\pi/2$ -импульс. Тогда блоховский вектор станет горизонтальным и начнет прецессировать вокруг вектора постоянного поля, порождая убывающий сигнал свободной индукции, пропорциональный длине блоховского вектора. Но, если второй импульс применяется в тот момент, когда конец вектора Блоха проходит через начало координат, этот сигнал пропадет.

Упражнение 5.62. Покажите, что при измерении перехода через нуль сигнал свободной индукции пропадет для $t_0 = T_1 \ln 2$.

5.6. Обобщенные измерения*

Аппарат операторов плотности обобщает постулат квантовой механики о гильбертовом пространстве, учитывая возможность того, что мы можем не иметь полной информации о квантовом состоянии. Постулат об измерениях можно расширить аналогичным образом, чтобы учесть реалистичные квантовые измерительные устройства.

5.6.1. Реалистичный детектор

Рассмотрим, например, устройство для измерения поляризации, показанное на рис. 1.2 а. В идеальном случае оно измеряет поляризацию фотона в каноническом базисе. Предположим, однако, что светоделитель не идеален: он может пропустить некоторую часть вертикальной поляризации и отразить часть горизонтальной. Чтобы учесть эту особенность, мы вводим понятие *выходных состояний* измерительного устройства — макроскопические (классические) показания, которые устройство может выдавать. В случае измерения поляризации, если считать детекторы идеальными, выходных состояний должно быть два:

- щелкает детектор в пропускающем канале;
- щелкает детектор в отражающем канале.

Далее мы моделируем наше устройство как идеальное проективное измерение в некотором базисе $\{|v_i\rangle\}$, за которым следует «скремблер» (рис. 5.2). Скремблер представляет собой классическое устройство,

функционирующее так: для каждого выхода $|v_i\rangle$ квантового измерения оно случайным образом, с вероятностью μ_{ji} , выбирает j -е выходное состояние. Затем это состояние отображается детектором.

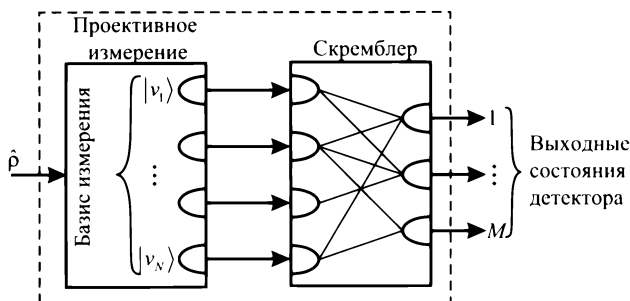


Рис. 5.2. Модель реалистичного детектора, описываемая POVM

Упражнение 5.63. Рассмотрим реалистичный детектор поляризации, состоящий из идеального проективного измерения поляризации в каноническом базисе и скремблера, который отображает результаты измерения на выходные состояния, помеченные H и V . Скремблер работает следующим образом:

- если на входе состояние $|H\rangle$, он показывает H с вероятностью $3/4$ и V с вероятностью $1/4$;
- если на входе состояние $|V\rangle$, он показывает V с вероятностью $2/3$ и H с вероятностью $1/3$.

Квантовая эффективность равна единице, а число темновых срабатываний пренебрежимо мало. Найдите матрицу скремблера этого детектора.

Упражнение 5.64. Покажите, что для любой матрицы скремблирования $\sum_{j=1}^M \mu_{ji} = 1$, где M — полное число выходных состояний детектора.

Число выходных состояний детектора может быть не равно размерности гильбертова пространства. В качестве примера рассмотрим недискриминирующий детектор фотонов (отступление 1.2). У этого детектора два выходных состояния: «щелчок» и «нет щелчка». Со своей стороны, размерность гильбертова пространства, связанного с этими квантовыми измерениями, бесконечна: оно охватывает число фотонных состояний от нуля до бесконечности¹.

¹ Как говорилось в разд. 3.8, квантовое описание моды электромагнитного поля эквивалентно описанию гармонического осциллятора.

Упражнение 5.65. Недискриминирующий детектор характеризуется следующими свойствами:

- темновые события отсутствуют;
- каждый входящий фотон порождает лавину с вероятностью η (квантовая эффективность детектора). Если имеет место хотя бы одна лавина, электронная схема детектора выдает щелчок.

Постройте модель этого детектора в виде проективного измерения в базисе числа фотонов, за которым следует скремблер, и рассчитайте матрицу этого скремблера.

5.6.2. Положительная операторнозначная мера (POVM)

Базис идеального измерения $\{|v_i\rangle\}$ в сочетании с матрицей скремблера μ_{ji} полностью описывает любой детектор, модель которого изображена на рис. 5.2. Однако, как и во многих других случаях, встретившихся нам в этой книге, квантовые теоретики предпочитают более компактное описание, о котором мы сейчас и поговорим. Для детектора, моделируемого схемой на рис. 5.2, набор операторов

$$\hat{F}_j = \sum_i \mu_{ji} \Pi_i, \quad (5.36)$$

каждый из которых связан с j -м выходным состоянием детектора, где $\Pi_i = |v_i\rangle\langle v_i|$ называют *положительной операторнозначной мерой (POVM)* данного детектора. Измерение, описываемое POVM, называется обобщенным измерением.

Упражнение 5.66. Покажите, что каждый элемент POVM представляет собой неотрицательный эрмитов оператор.

Упражнение 5.67. Определите POVM детекторов, описанных в:

- а) упр. 5.63;
- б) упр. 5.65.

Ответ:

$$\hat{F}_{\text{нет щелчка}} = \sum_n (1 - \eta)^n |n\rangle\langle n|, \quad (5.37a)$$

$$\hat{F}_{\text{щелчок}} = \sum_n [1 - (1 - \eta)^n] |n\rangle\langle n|. \quad (5.37b)$$

Упражнение 5.68. Покажите, что для POVM детектора, моделируемого схемой на рис. 5.2,

$$\sum_{j=1}^M \hat{F}_j = \hat{\mathbf{1}}, \quad (5.38)$$

где M — число элементов POVM.

Упражнение 5.69. Покажите следующее:

- а) Когда квантовое состояние $\hat{\rho}$ измеряют детектором, описываемым некоторой POVM $\{\hat{F}_j\}$, вероятность j -го результата равна

$$\text{pr}_j(\hat{\rho}) = \text{Tr}(\hat{F}_j \hat{\rho}) \quad (5.39)$$

(это расширение правила Борна на обобщенные измерения).

- б) Когда при измерении принадлежащей Алисе части двусоставного квантового состояния $\hat{\rho}_{AB}$ при помощи детектора, который описывается POVM $\{\hat{F}_j\}$, получается j -й результат, (ненормированное) состояние канала Боба становится равным

$$\hat{\rho}_{B,j} = \text{Tr}_A(\hat{F}_j \hat{\rho}_{AB}). \quad (5.40)$$

Упражнение 5.70. Алиса и Боб имеют пару фотонов в смеси состояний $|\Psi_1\rangle = (|HH\rangle + |HV\rangle + 2|VV\rangle)/\sqrt{6}$ с вероятностью $3/5$ и $|\Psi_2\rangle = |HV\rangle$ с вероятностью $2/5$. Алиса измеряет свой фотон при помощи детектора, описанного в упр. 5.63, и получает:

- результат H ;
- результат V ;
- неизвестный результат.

Найдите результирующее состояние фотона Боба:

- с использованием чистого состояния и аппарата проекционных измерений (выразите ответ в виде статистического ансамбля);
- с использованием матрицы плотности и аппарата обобщенных измерений (выразите ответ в виде ненормированной матрицы плотности).

Убедитесь, что ваши ответы согласуются между собой.

Эти результаты показывают, насколько полезна POVM. Сравнивая выражения (5.39) и (5.40) с выражениями (5.13) и (5.19), мы видим,

что во многих ситуациях POVM заменяет собой набор проецирующих операторов в математическом описании детектора.

Однако есть одна важная оговорка. POVM может полностью заменить проекторы только для измерений, разрушающих измеряемую квантовую систему (как делают, например, традиционные фотонные детекторы), или в случае, когда нас не интересует состояние системы после измерения. Но если система не разрушается, ее состояние после обобщенного измерения не равно $\hat{F}_j \hat{\rho} \hat{F}_j$, в отличие от проективных измерений, где состояние после измерения (5.12) равно $\hat{P}_j \hat{\rho} \hat{P}_j$. Мы убедимся в этом в следующем упражнении.

Упражнение 5.71

- Определите оператор плотности состояния после измерения в случае j -го результата измерения, показанного на рис. 5.2. Ответ должен быть выражен через матрицы скремблера и проекционных операторов, определяющих квантовую часть детектора.
- Примените результат пункта а) к состоянию $\hat{\rho} = |+\rangle\langle+|$, измеренному детектором, который описан в упр. 5.63. Найдите состояние после измерения для каждого результата. Убедитесь, что эти состояния не равны $\hat{F}_j \hat{\rho} \hat{F}_j$.

Еще одно различие между обобщенными и проективными измерениями состоит в том, что первые неповторимы. Если мы подвергнем состояние $\hat{P}_j \hat{\rho} \hat{P}_j$, полученное в результате проективного измерения, такому же измерению еще раз, то получим $\hat{P}_j \hat{P}_j \hat{\rho} \hat{P}_j \hat{P}_j = \hat{P}_j \hat{\rho} \hat{P}_j$, так что состояние не изменится. Но в случае обобщенного измерения ситуация складывается иная.

Упражнение 5.72. Предположим, фотон в начальном состоянии $\hat{\rho} = |+\rangle\langle+|$ измерен неразрушающим способом при помощи детектора, описанного в упр. 5.63; получен результат H . Примените это же измерение еще раз к состоянию после первого измерения и найдите результирующее состояние, а также вероятность каждого результата.

Завершая обсуждение обобщенных измерений, замечу, что не каждое физическое измерение можно смоделировать как проективное измерение плюс скремблер — пример показан на рис. 5.3. Однако, что весьма примечательно, *любой* детектор — т.е. любой аппарат, который обеспечивает нас информацией о физической системе, — может быть описан при помощи POVM, т.е. набора неотрицательных операторов, свойства

которых согласуются с (5.38), (5.39) и (5.40). Как построить эту POVM, мы покажем в следующем разделе, а пока обратимся к примеру.

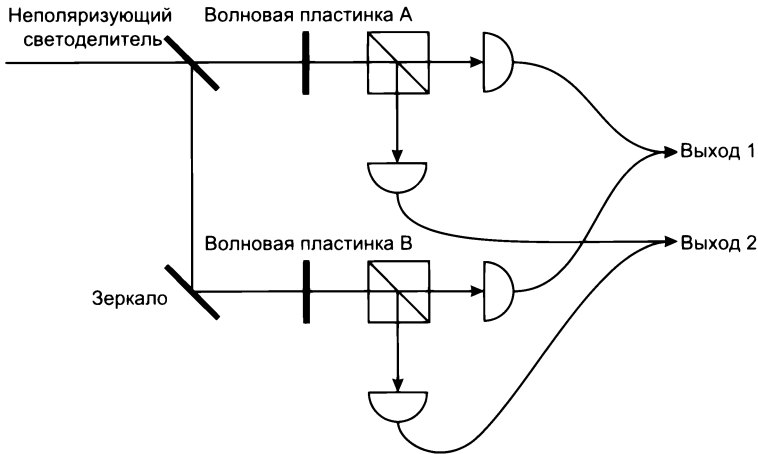


Рис. 5.3. Пример детектора, не описываемого моделью с рис. 5.2. Неполярирующий светоделитель случайным образом направляет фотон в два различных идеальных устройства измерения поляризации. Фотон, обнаруженный в пропускающем канале любого из поляризирующих светоделителей, активирует одно и то же выходное состояние детектора; фотон в отражающем канале любого PBS активирует другое выходное состояние.

Упражнение 5.73. Рассмотрим детектор на рис. 5.3, в котором роль волновой пластинки *A* играет полуволновая пластинка, расположенная под углом 0° (верхний датчик поляризации измеряет в каноническом базисе), а роль волновой пластинки *B* — полуволновая пластинка под углом $22,5^\circ$ (нижний датчик измеряет в диагональном базисе). Неполярирующий светоделитель симметричен, т. е. пропускает и отражает фотоны с равной вероятностью.

- а) Предположим, что детектор используется для измерения произвольного состояния с матрицей плотности

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{HH} & \rho_{HV} \\ \rho_{VH} & \rho_{VV} \end{pmatrix}.$$

Найдите вероятности двух выходных значений детектора, выразив их через ρ_{HH} , ρ_{HV} , ρ_{VH} , ρ_{VV} .

- б) На основании уравнения (5.39) и результата пункта а) найдите POVM этого детектора. Покажите, что сумма элементов POVM представляет собой оператор тождества.

Еще один красивый результат, известный как *теорема Наймарка*, устанавливает, что для любого множества $\{\hat{F}_j\}$ неотрицательных эрмитовых операторов, таких что $\sum \hat{F}_j = \hat{1}$, можно построить детектор, POVM которого будет равна $\{\hat{F}_j\}$. Доказательство этого утверждения выходит за рамки данного курса, но его можно найти в учебниках по квантовой теории информации¹.

Упражнение 5.74. Некоторый детектор описывается POVM $\{\hat{F}_j\}$, такой что (5.39) выполняется для всех физических состояний $\hat{\rho}$.

- * Покажите, что каждый $\hat{F}_j$ есть эрмитов оператор.
- Покажите, что каждый $\hat{F}_j$ есть неотрицательный оператор.
- Докажите, что множество $\{\hat{F}_j\}$ подчиняется (5.38).

Упражнение 5.75. Рассмотрим «детектор», который не дает никакой информации о состоянии квантовой системы — т. е. вероятности его выходных состояний не зависят от состояния исходной квантовой системы. Покажите, что все элементы POVM такого «детектора» пропорциональны оператору тождества.

5.7. Квантовая томография

5.7.1. Томография квантового состояния

Здесь мы еще раз поговорим на тему, которую уже затрагивали в разд. 1.4: о полной характеристизации квантовых состояний при помощи измерений. Но теперь мы воспользуемся инструментами, которые освоили в этой главе, — а именно аппаратом матрицы плотности, — чтобы проработать томографию обобщенного квантового состояния, не считая его заранее чистым.

Как мы знаем, полная характеристизация состояния требует не просто множественных измерений на множестве копий этого состояния, но и проведения этих измерений в различных базисах. Оценим число базисов, необходимых для полной томографии состояния в заданном гильбертовом пространстве.

¹ К примеру, см.: Холево А.С. Вероятностные и статистические аспекты квантовой теории. — М.: Наука, 1980.

Упражнение 5.76. Рассмотрим произвольное состояние $\hat{\rho}$ в гильбертовом пространстве размерности N .

- а) Покажите, что данное состояние может быть полностью описано при помощи N^2-1 независимых действительных параметров.
- б) Мы проводим проективное измерение множества копий $\hat{\rho}$ в каком-то конкретном базисе. Покажите, что информация, которую мы получаем при этом измерении, может разместиться в множестве из $N-1$ независимых действительных параметров.

Таким образом, наша цель — определить (N^2-1) чисел, но измерение в каждом базисе дает нам только $(N-1)$ чисел. Следовательно, полная томография состояния требует набора статистических данных как минимум в $(N^2-1)/(N-1) = N+1$ базисах. На практике выбор базисов диктуется в значительной мере условиями эксперимента, а это означает, что иногда требуется большее их количество. Рассмотрим два примера.

Упражнение 5.77. Выполните упр. 1.15 заново для матриц плотности. Множественные измерения поляризации фотонов, приготовленных в одном и том же состоянии $\hat{\rho}$, проводятся в каноническом, диагональном и круговом базисах, и определяются все шесть соответствующих вероятностей. Выразите все четыре элемента матрицы $\hat{\rho}$ через эти вероятности.

Упражнение 5.78*. Покажите, что полная томография состояния поляризации фотонной пары может быть выполнена посредством измерения множества копий этого состояния в каждой из девяти двусоставных комбинаций канонического, диагонального и кругового базисов¹.

Подсказка: это трудоемкий расчет, но его можно упростить, если производить вычисления в правильном порядке.

- Начните с двусоставного канонического базиса: какие элементы матрицы плотности помогает нам определить статистика измерений в этом базисе?

¹ См. описание эксперимента в: A. G. White, D.F.V. James, W.J. Munro, and P.G. Kwiat, Exploring Hilbert space: Accurate characterization of quantum information, Physical Review A 65, 012301 (2001).

- Пусть у Алисы будет канонический базис, у Боба же — диагональный, а затем круговой. Используя элементы матрицы плотности, известные нам после первого шага, определите еще четыре элемента.
- Теперь пусть базис Боба будет каноническим, а базис Алисы — диагональным и круговым. Можно найти еще четыре элемента матрицы.
- Оставшиеся элементы матрицы плотности можно оценить на основе измерений в четырех оставшихся двусоставных базисах.

В упражнении 5.77 размерность гильбертова пространства равна $N = 2$, а число используемых базисов составляет $N + 1 = 3$, что совпадает с найденным нами минимальным значением. В упр. 5.78, в свою очередь, $N = 4$, тогда как число базисов равно девяти. Это означает, что мы можем подумать об оптимизации нашего решения использованием в нем меньшего числа базисов. Однако следует позаботиться и о том, чтобы эти «оптимизированные» базисы не слишком сложно было реализовать в практической экспериментальной установке.

Из упражнения 5.78 мы можем извлечь еще один важный урок. Дело в том, что, хотя двусоставное гильбертово пространство содержит запутанные состояния, полная его томография не требует измерений в запутанных базисах. Иными словами, измерительные приборы Алисы и Боба не обязаны быть связаны между собой квантовой корреляцией. Это, конечно, большое облегчение для экспериментаторов.

5.7.2. Томография квантового процесса

Под *квантовым процессом* мы понимаем некий черный ящик, выполняющий какую-то обработку квантовых состояний (рис. 5.4). Для исходного состояния $\hat{\rho}$ выходное состояние процесса обозначается $E(\hat{\rho})$. Цель *томографии квантового процесса* (QPT, *quantum process tomography*) — получить достаточно информации о черном ящике, чтобы иметь возможность предсказывать его действие на произвольное исходное состояние. Для получения этой информации на вход черного ящика посылают множество копий определенных *пробных состояний* $\hat{\rho}_j$ и производят томографию квантовых состояний на его выходе, чтобы найти $E(\hat{\rho}_j)$ для каждого пробного состояния.

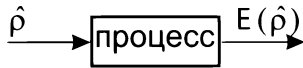


Рис. 5.4. Квантовый процесс

В начале этого курса (разд. 1.10) мы узнали, что квантовая эволюция представлена унитарными линейными операторами $\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$ (где $\hat{H}$ — гамильтониан). Однако, как мы вскоре увидим, это не всегда верно для произвольного квантового процесса. Тем не менее начнем обсуждение QPT с черного ящика, о котором *a priori* известно, что он описывается некоторым линейным оператором.

Упражнение 5.79. Предположим, что процесс описывается линейным оператором $\hat{U}$ и для каждого элемента некоторого ортонормального базиса $\{|v_i\rangle\}$ гильбертова пространства известно состояние $\hat{U}|v_i\rangle$. Найдите матрицу плотности выходного состояния процесса $E(\hat{\rho})$, если задан оператор плотности исходного состояния $\hat{\rho}$ ¹.

Согласно данному результату, чтобы полностью характеризовать процесс, описываемый линейным оператором, достаточно зондировать его состояниями из любого базиса гильбертова пространства.

Однако квантовые процессы являются унитарными операторами только в том случае, когда интересующая нас система не взаимодействует с внешним миром («средой»). Если такое взаимодействие имеет место, система и среда становятся запутанными. Тогда нам, чтобы определить конечное состояние системы, необходимо брать частичный след по среде. Эта необратимая операция делает весь процесс не-унитарным.

Рассмотрим, например, декогеренцию частицы со спином 1/2, для которой предпочтительным является канонический базис. Состояния $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ эта декогеренция не затрагивает: $E(|\uparrow\rangle\langle\uparrow|) = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$ и $E(|\downarrow\rangle\langle\downarrow|) = |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$. Однако любая линейная комбинация $|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$ становится статистической смесью: $E(|\psi\rangle\langle\psi|) = |\alpha|^2|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\beta|^2|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$. Если единственной доступной нам информацией является действие процесса на базисные состояния $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, мы не можем отличить этот процесс от единичного процесса $E(\hat{\rho}) = \hat{\rho}$.

¹ Конечно, если квантовый процесс описывается оператором, тот должен быть не просто линейным, но также унитарным (см. разд. 1.10). Однако для данного упражнения этот факт не существен.

После всего этого может показаться, что томография квантового процесса — задача практически нерешаемая. Взаимодействие систем и сред может быть каким угодно. А поскольку информация о среде недоступна, определить все свойства процесса, измеряя только систему, казалось бы, невозможно. Однако на самом деле, к счастью, это не так, и в следующем упражнении мы в этом убедимся.

Упражнение 5.80. Покажите, что любой процесс должен быть линейным по отношению к матрице плотности, т. е.

$$\mathbf{E}(\alpha\hat{\rho}_1 + \beta\hat{\rho}_2) = \alpha\mathbf{E}(\hat{\rho}_1) + \beta\mathbf{E}(\hat{\rho}_2). \quad (5.41)$$

Подсказка: воспользуйтесь вероятностной природой оператора плотности (см. упр. 5.22).

Упражнение 5.81. Покажите, что в линейном пространстве всех линейных операторов на гильбертовом пространстве размерности N (см. упр. А.42) можно построить базис, который будет состоять исключительно из операторов плотности физических квантовых состояний.

Подсказка: рассмотрите, например, множество Q , которое включает в себя:

- N операторов $\hat{\rho}_{kk} = |v_k\rangle\langle v_k|$;
- $N(N-1)/2$ операторов $\hat{\rho}_{re,kl} = |\psi_{re,kl}\rangle\langle\psi_{re,kl}|$ при $\psi_{re,kl} = (|v_k\rangle + |v_l\rangle)/\sqrt{2}$ для каждой уникальной пары индексов (k, l) ;
- $N(N-1)/2$ операторов $\hat{\rho}_{im,kl} = |\psi_{im,kl}\rangle\langle\psi_{im,kl}|$ при $\psi_{im,kl} = (|v_k\rangle + i|v_l\rangle)/\sqrt{2}$ для каждой уникальной пары индексов (k, l) ,

где $\{|v_k\rangle\}$ есть произвольный ортонормальный базис гильбертова пространства.

Упражнение 5.82. Пусть $\{\hat{\rho}_i\}$ — базис в пространстве операторов на нашем гильбертовом пространстве, где каждый элемент соответствует оператору плотности физического состояния. Предположим, что действие процесса $\mathbf{E}(\hat{\rho}_i)$ на каждое из этих состояний известно. Покажите, что действие процесса на произвольное состояние задается формулой

$$\mathbf{E}(\hat{\rho}) = \sum_i \lambda_i \mathbf{E}(\hat{\rho}_i), \quad (5.42)$$

где λ_i — коэффициенты разложения оператора плотности $\hat{\rho}$ в этот базис:

$$\hat{\rho} = \sum_i \lambda_i \hat{\rho}_i. \quad (5.43)$$

Приведенное упражнение дает нам концепцию метода томографии квантового процесса. Любой базис¹ $\{\hat{\rho}_i\}$ в пространстве операторов над гильбертовым пространством может служить множеством пробных состояний, и тогда множество выходных матриц плотности $\{\mathbf{E}(\hat{\rho}_i)\}$ содержит полную информацию о процессе. В следующих упражнениях вы увидите примеры тому на основе физики частицы со спином 1/2.

Упражнение 5.83. Покажите, что множество матриц плотности

$$Q = \{\hat{\rho}_\uparrow = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|, \hat{\rho}_\downarrow = |\downarrow\rangle\langle\downarrow|, \hat{\rho}_+ = |+\rangle\langle+|, \hat{\rho}_R = |R\rangle\langle R|\}, \quad (5.44)$$

где $|+\rangle = (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ и $|R\rangle = (|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ — собственные состояния $\hat{\sigma}_x$ и $\hat{\sigma}_y$ с собственным значением 1, образуют базис в линейном пространстве всех линейных операторов над кубитным гильбертовым пространством. Выразите произвольное состояние

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{\uparrow\uparrow} & \rho_{\uparrow\downarrow} \\ \rho_{\downarrow\uparrow} & \rho_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}$$

как смесь (5.42) элементов этого базиса.

Упражнение 5.84. Рассмотрим процесс частичной декогеренции, изученный нами в подразд. 5.5.1:

$$\mathbf{E} \begin{pmatrix} \rho_{\uparrow\uparrow} & \rho_{\uparrow\downarrow} \\ \rho_{\downarrow\uparrow} & \rho_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{\uparrow\uparrow} & \rho_{\uparrow\downarrow} e^{-t/T_2} \\ \rho_{\downarrow\uparrow} e^{-t/T_2} & \rho_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (5.45)$$

- Найдите действие $\mathbf{E}(\hat{\rho}_i)$ этого процесса на все элементы базиса (5.44).
- Предположим, что базис (5.44) используется для томографии квантового процесса. Выразив произвольное состояние

¹ На самом деле достаточно, чтобы набор $\{\hat{\rho}_i\}$ был остовным; ему не обязательно быть линейно независимым.

$$\hat{\rho} \approx \begin{pmatrix} \rho_{\uparrow\uparrow} & \rho_{\uparrow\downarrow} \\ \rho_{\downarrow\uparrow} & \rho_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}$$

как смесь элементов этого базиса, проверьте (5.42) явно.

Эксперимент с QPT дает нам набор матриц плотности $\{\mathbf{E}(\hat{\rho}_i)\}$. Хотя, как мы уже показали, это множество полностью описывает процесс, было бы хорошо получить более компактное и удобное описание — как в случае с операторами плотности и POVM. Попробуем найти способ выразить информацию о процессе в виде *тензора процесса* — «суперматрицы» $\mathbf{E}_{lk}^{nm}$, которая при приложении к матрице исходного состояния $\hat{\rho}$ должна сгенерировать матрицу выходного состояния черного ящика $\mathbf{E}(\hat{\rho})$:

$$[\mathbf{E}(\hat{\rho})]_{lk} = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \mathbf{E}_{lk}^{nm} \rho_{nm}, \quad (5.46)$$

где $\rho_{nm} = \langle v_n | \hat{\rho} | v_m \rangle$, $[\mathbf{E}(\hat{\rho})]_{lk} = \langle v_l | \mathbf{E}(\hat{\rho}) | v_k \rangle$, а $\{|v_j\rangle\}$ — ортонормальный базис в $\mathbb{V}$.

Уравнение (5.46) напоминает умножение матриц (A.20), только суммирование идет по двум индексам. И входящие, и исходящие объекты представляют собой матрицы и имеют по два индекса. А у тензора процесса $\mathbf{E}_{lk}^{nm}$, который переводит одно в другое, целых четыре индекса — это *тензор четвертого ранга*, таблица чисел $N \times N \times N \times N$, которую легко обрабатывать, хранить и передавать.

Но для каждого ли квантового процесса существует тензор процесса, и если да, то как его можно найти? Оказывается, ответ относительно прост.

Упражнение 5.85. Рассмотрим некоторый ортонормальный базис гильбертова пространства $\{|v_n\rangle\}$. Пусть $\{\hat{\rho}_i\}$ (где $i = 1, \dots, N^2$) — множество пробных состояний QPT, т. е. осто́вный набор в пространстве матриц плотности. Тогда каждый оператор $|v_m\rangle\langle v_n|$ можно разложить по этому осто́ву согласно

$$|v_n\rangle\langle v_m| = \sum_{i=1}^{N^2} \lambda_{nmi} \hat{\rho}_i, \quad (5.47)$$

где λ_{nmi} — коэффициенты разложения. Покажите, что выражение (5.46) удовлетворяется, если тензор процесса задается формулой

$$\mathbf{E}_{lk}^{nm} = \sum_{i=1}^{N^2} \lambda_{nmi} \langle v_l | \mathbf{E}(\hat{\rho}_i) | v_k \rangle. \quad (5.48)$$

Упражнение 5.86. Найдите коэффициенты разложения (5.47), если $\{|v_n\rangle\}$ представляет собой канонический базис в кубитовом пространстве, а базис $\{\hat{\rho}_i\}$ задан выражением (5.44).

Упражнение 5.87. Воспользуйтесь уравнением (5.48) и результатом упр. 5.84 (а) и 5.86, чтобы найти тензор процесса частичной декогеренции (5.45). Убедитесь, что этот тензор при постановке в (5.46) дает (5.45).

Ответ:

$$\mathbf{E}_{lk}^{nm} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & e^{-t/T_2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ e^{-t/T_2} & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad (5.49)$$

где каждая пара (n, m) обозначает субматрицу 2×2 , тогда как внутри каждой субматрицы используются индексы (l, k) .

Данный результат хорошо иллюстрирует смысл тензора процесса. Субматрица в n -й строке и m -м столбце в правой части выражения (5.49) задает результат процесса $\mathbf{E}(|v_n\rangle\langle v_m|)$, соответствующий исходному «состоянию» $|v_n\rangle\langle v_m|$ ¹. Например, исходное состояние $|\uparrow\rangle\langle\uparrow| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ декогеренция не затрагивает, так что верхняя левая субматрица совпадает с этим состоянием: $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Однако если исходное «состояние» $|\uparrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, то декогерированный выход (верхняя правая субматрица) равен $\begin{pmatrix} 0 & e^{-t/T_2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ и т.д. Математику, стоящую за этим наблюдением, можно видеть в (5.46): если мы задаем $\hat{\rho} = |v_n\rangle\langle v_m|$, то $[\mathbf{E}(\hat{\rho})]_{lk} = \mathbf{E}_{lk}^{nm}$.

Как видим, теоретический аппарат QPT и тем более ее практическая реализация могут быть сложными и трудоемкими. Чтобы сформировать базис в пространстве операторов над гильбертовым про-

¹ При $n \neq m$ это всего лишь формальные математические объекты, которые не соответствуют никаким физическим состояниям. Однако они удобны для тренировки интуиции.

странством, множество пробных состояний должно содержать N^2 элементов. Для каждого из этих элементов необходимо произвести полную томографию соответствующего выходного состояния $\mathbf{E}(\hat{\rho}_i)$ и найти множество $(N^2 - 1)$ параметров, определяющих его матрицу плотности. Так что полное число параметров, которые необходимо получить при томографии квантового процесса, пропорционально четвертой степени размерности гильбертова пространства, — а значит, экспериментатору придется проводить в лаборатории не только дни, но и ночи. Хуже того, может оказаться, что требуемый пробный базис должен содержать сложные суперпозиционные состояния, которые трудно или вообще невозможно приготовить существующими методами инженерии квантовых состояний.

5.7.3. Томография квантового детектора

Томографию квантового детектора можно рассматривать как упрощенный случай QPT. Здесь вместо черного ящика с квантовым выходом мы имеем детектор — черный ящик с M возможных классических выходных состояний. Цель та же — иметь возможность предсказывать реакцию детектора на произвольное состояние, т. е. определить POVM детектора при помощи изучения его реакций на определенные пробные состояния.

Упражнение 5.88. Некоторый детектор при измерении состояний $\hat{\rho}_{1,2}$ дает результат j с вероятностями $\text{pr}_j(\hat{\rho}_{1,2})$ соответственно. Покажите, что при измерении линейной смеси $\alpha\hat{\rho}_1 + \beta\hat{\rho}_2$ вероятность результата j задается формулой

$$\text{pr}_j(\alpha\hat{\rho}_1 + \beta\hat{\rho}_2) = \alpha \text{pr}_j(\hat{\rho}_1) + \beta \text{pr}_j(\hat{\rho}_2). \quad (5.50)$$

Упражнение 5.89. Пусть $\{\hat{\rho}_i\}$ — базис (или остов), определенный в упр. 5.82. Для каждого из его элементов мы провели измерения и получили полные статистические данные по откликам детектора, т. е. $\text{pr}_j(\hat{\rho}_i)$, где j индексирует выходные состояния детектора. По этим данным определите $\text{pr}_j(\hat{\rho})$ для произвольной исходной матрицы плотности $\hat{\rho}$, разложение которой по $\{\hat{\rho}_i\}$ задается выражением (5.43).

Упражнение 5.90*. В условиях предыдущего упражнения покажите, что (5.39) удовлетворяется, если POVM детектора задается выражением

$$\hat{F}_j = \sum_{i=1}^{N^2} \sum_{m,n=1}^N \lambda_{nmi} \text{pr}_j(\rho_i) |v_m\rangle \langle v_n|, \quad (5.51)$$

где λ_{nmi} — коэффициенты разложения оператора $|v_n\rangle \langle v_m|$ по базису пробного состояния согласно (5.47).

Упражнение 5.91. Рассмотрим детектор, показанный на рис. 5.3, в условиях упр. 5.73.

- а) Найдите вероятности откликов детектора для четырех состояний из множества :

$$Q = \{\hat{\rho}_\uparrow = |H\rangle \langle H|, \hat{\rho}_\downarrow = |V\rangle \langle V|, \hat{\rho}_+ = |+\rangle \langle +|, \hat{\rho}_- = |-\rangle \langle -|\}.$$

- б) Воспользовавшись этой информацией и (5.51), найдите POVM детектора. Убедитесь, что результат совпадает с результатом упр. 5.73.

Как можно видеть из последнего упражнения, у нас теперь есть алгоритм вычисления POVM детектора не только по экспериментальным данным, полученным в результате измерения пробных состояний, но и теоретический, по физической модели детектора.

5.8. Задачи

Задача 5.1. Найдите представление оператора плотности состояний гармонического осциллятора $|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle$ и $|\alpha\rangle \langle \alpha| - |-\alpha\rangle \langle -\alpha|$

- в базисе Фока;
- в координатном базисе;
- в импульсном базисе,

где α и $-\alpha$ суть когерентные состояния. Рассмотрите поведение диагональных и недиагональных элементов в контексте упр. 5.12. Нормированием можно пренебречь.

Задача 5.2. Рассмотрим фотон в ансамбле состояний:

- $|\psi_1\rangle = (3|H\rangle - 4|V\rangle)/5$ с вероятностью $p_1 = 1/2$;
- $|\psi_2\rangle = (12|H\rangle - 5i|V\rangle)/13$ с вероятностью $p_2 = 1/4$;
- $|\psi_3\rangle = |-45^\circ\rangle$ с вероятностью $p_3 = 1/4$.

- а) Найдите оператор плотности.
- б) Этот ансамбль измеряют в круговом базисе. Найдите вероятности каждого результата, пользуясь приведенным выше словесным описанием и аппаратом матрицы плотности. Убедитесь в согласованности результатов.

Ответ должен быть в численном виде, до третьего знака после запятой.

Задача 5.3. Матрица плотности состояния фотона в каноническом базисе равна

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 1/2 & i/6 \\ -i/6 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Представьте это состояние как статистическую смесь ортогональных чистых состояний.

Задача 5.4. Алиса и Боб располагают двумя фотонами в состоянии $|\Psi\rangle = (|HV\rangle + |VH\rangle + 2|VV\rangle)/\sqrt{6}$. Алиса измеряет свое состояние в каноническом базисе.

- а) Какое состояние будет приготовлено в локации Боба в каждом случае?
- б) Какова вероятность каждого результата?
- с) Предположим, Боб не знает результата измерения Алисы. Используйте результаты пунктов а) и б), чтобы записать статистический ансамбль, описывающий состояние фотона Боба. Найдите соответствующую матрицу плотности в каноническом базисе.
- д) Найдите приведенную матрицу плотности фотона Боба, пользуясь формульным аппаратом матриц плотности. Убедитесь, что результат совпадает с результатом пункта с).
- е) Повторите пункты а) — с) для случая, когда Алиса производит свое измерение в диагональном базисе. Убедитесь, что приведенная матрица плотности фотона Боба получается та же.

Задача 5.5. Алиса и Боб располагают двумя общими фотонами в состоянии поляризации, матрица которого в каноническом базисе $\{|HH\rangle, |HV\rangle, |VH\rangle, |VV\rangle\}$ есть

$$\hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{18} \begin{pmatrix} 3 & 1 & -2 & i \\ 1 & 1 & 2i & -3 \\ -2 & -2i & 4 & 0 \\ -i & -3 & 0 & 10 \end{pmatrix}$$

- а) Напишите матрицу плотности $\hat{\rho}_b$ фотона Боба, если у него нет связи с Алисой.
- б) Алиса измеряет поляризацию своего фотона в каноническом базисе. Какова вероятность каждого результата и какое состояние будет приготовлено в локации Боба в каждом случае?
- с) Алиса измеряет свой фотон при помощи детектора, описанного в упр. 5.63. Какова вероятность каждого результата и какое состояние будет приготовлено в локации Боба в каждом случае?

Задача 5.6. Ансамбль частиц со спином $1/2$, находящихся первоначально в состоянии $|\uparrow\rangle$, претерпевает декогеренцию из-за столкновений с буферным газом. Каждое столкновение приводит к полной декогеренции участвовавшей в нем частицы. Предпочтительный с точки зрения декогеренции базис есть $\{|\pm\rangle\} = \{(|\uparrow\rangle \pm |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}\}$. Вероятность столкновения для одной частицы в единицу времени равна p . Напишите матрицу плотности как функцию времени:

- а) в предпочтительном для декогеренции базисе;
- б) в каноническом базисе.

Задача 5.7. Переделайте упр. 5.25 для смеси состояний, которая соответствует спину, направленному вдоль осей x и y с вероятностями $1/3$ и $2/3$ соответственно. Магнитное поле B направлено вдоль оси z .

Задача 5.8. Два электрона, спины которых первоначально находятся в состоянии $|\Psi(0)\rangle = |\rightarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$ (где $|\rightarrow\rangle$ есть собственное состояние $\hat{S}_x$ с собственным значением $\frac{\hbar}{2}$), связанном с фиктивными наблюдателями Алисой и Бобом, взаимодействуют с гамильтонианом $\hat{H} = C\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$.

- а) Найдите эволюцию $|\Psi(t)\rangle$ спинового состояния электронов в каноническом базисе.
- б) Алиса измеряет проекцию спина своего электрона на ось z в момент времени t . Найдите вероятности возможных результатов и состояние, в котором это измерение приготовит электрон Боба в каждом случае. На основании этой информации опреде-

- лите ансамбль, описывающий состояние электрона Боба, если тот не знает результата измерения Алисы. Из этого описания получите матрицу плотности электрона Боба в каноническом базисе.
- Повторите пункт б) для случая, когда Алиса измеряет проекцию спина своего электрона на ось x .
 - Найдите оператор плотности $\hat{\rho}_B(t)$ электрона Боба как функцию времени, используя частичный след. Убедитесь, что ваш результат идентичен тому, который был получен в пунктах б) и с).
 - Вычислите траекторию вектора Блоха для спина электрона Боба и постройте ее графически.
 - Найдите чистоту состояния для спина электрона Боба в зависимости от времени. Проверьте, что она связана с длиной блоховского вектора в соответствии с (5.23).

Задача 5.9. Для двумодового сжатого состояния (3.186а) вычислите матрицу плотности части Боба.

Подсказка: чтобы вычислить частичный след в условиях непрерывной переменной, замените суммирование в формуле (5.18) на интегрирование.

Задача 5.10. Найдите тензор процесса однородной релаксации, имеющей как продольный (T_1), так и поперечный (T_2) компоненты.

Задача 5.11. Проанализируйте следующую методику измерения времени продольной релаксации:

- $\frac{\pi}{2}$ -импульс возбуждения применяется к термализованному спиново-му ансамблю, чтобы направить вектор Блоха вдоль оси y .
- С течением времени блоховские векторы различных спинов распределяются по экватору из-за неоднородного дефазирования. В то же время они будут испытывать продольную и поперечную релаксацию. Продольная релаксация приведет к возникновению z -компонента у среднего блоховского вектора.
- Через время $t_0 \gg T_2^*$ применяется еще один $\frac{\pi}{2}$ -импульс. Появившийся у блоховского вектора z -компонент теперь направлен вдоль оси y и может вызвать спад свободной индукции.

Вычислите средний магнитный момент спина после второго импульса возбуждения как функцию времени t , промежутка между

импульсами возбуждения t_0 , а также продольной и поперечной постоянных времени данного образца.

Задача 5.12. Вычислите POVM недискриминирующего детектора, описанного в упр. 5.65, с учетом темнового счета. Темновая лавина возникает с вероятностью p_{dark} независимо от прочих лавин, которые могут иметь место в детекторе в то же время.

Задача 5.13. Рассмотрите поляризационный детектор, описанный в упр. 5.63, учитывая квантовую эффективность $\eta = 0,8$. В случае, когда ни в одном из фотонных детекторов в ответ на входящий фотон не возникает лавины, детектор показывает «0».

- Вычислите POVM.
- Найдите вероятность каждого результата для исходного состояния $\alpha|H\rangle + \beta|V\rangle$.

Задача 5.14. Рассмотрите двумодовое оптическое состояние:

$$|\psi\rangle = \sum_{k,m=0}^{\infty} \psi_{km} |k\rangle_A \otimes |m\rangle_B,$$

где индексы A и B обозначают моды, а состояние записано в базисе Фока (например, состояние $|1\rangle_A \otimes |0\rangle_B$ соответствует одному фотону в моде A и вакууму в моде B).

- Мода B отбрасывается. Чему равен оператор плотности состояния в моде A ?
- Мода B подвергается измерению при помощи недискриминирующего однофотонного детектора с квантовой эффективностью η , описанной в упр. 5.65. Чему равен оператор плотности состояния в моде A в случае щелчка?
- Повторите пункт б) для случая, когда начальное состояние не является чистым, но описывается матрицей плотности:

$$\hat{\rho} = \sum_{k,l,m,n=0}^{\infty} \rho_{klmn} |k\rangle\langle l|_A \otimes |m\rangle\langle n|_B.$$

Задача 5.15. В устройство измерения поляризации, состоящее из поляризующего светоделителя и двух идеальных фотонных детекторов, влез гномик, который с вероятностью $1/2$ вставляет перед PBS полуволновую пластинку с оптической осью, ориентированной под углом $\pi/4$. Найдите POVM этого детектора.

Задача 5.16. Над квантовым процессом E на поляризационном кубите был проведен эксперимент по томографии квантового процесса. Он выявил следующие преобразования пробных состояний:

$$|H\rangle \rightarrow 1/4 |H\rangle\langle H| + 3/4 |V\rangle\langle V|;$$

$$|V\rangle \rightarrow 3/4 |H\rangle\langle H| + 1/4 |V\rangle\langle V|;$$

$$|+\rangle \rightarrow |+\rangle\langle +|;$$

$$|R\rangle \rightarrow 1/2 |H\rangle\langle H| + 1/2 |V\rangle\langle V| + i/4 |H\rangle\langle V| - i/4 |V\rangle\langle H|.$$

а) Найдите тензор процесса E_{lk}^{nm} , такой что

$$[E(\hat{\rho})]_{lk} = \sum_{nm} E_{lk}^{nm} \rho_{nm}.$$

б) Как этот процесс преобразует состояния $|-\rangle$, $|L\rangle$, $p|H\rangle\langle H| + (1-p)|-\rangle\langle -|$?

в) Этот процесс может быть описан как декогеренция в некотором предпочтительном базисе. Что это за базис?

ОСНОВЫ ЛИНЕЙНОЙ АЛГЕБРЫ

А.1. Линейные пространства

Линейные пространства состоят из элементов, называемых *векторами*. Векторы — это абстрактные математические объекты, но, как подсказывает название, их можно представлять себе в виде геометрических векторов. Как и обычные числа, их складывают друг с другом и вычитают один из другого с образованием новых векторов; их также можно умножать на числа. Однако векторы нельзя перемножать или делить друг на друга, как это делают с числами.

Одной из характерных черт линейной алгебры, используемой в квантовой механике, является применение так называемой *нотации Дирака* для векторов. При обозначении вектора, вместо того чтобы записать, к примеру, $\vec{a}$, мы пишем $|a\rangle$. Почему такая нотация оказывается удобной, станет ясно чуть позже.

Определение А.1. *Линейным (векторным) пространством* $\mathbb{V}$ над полем¹ $\mathbb{F}$ называется множество, в котором определены следующие операции:

1. Сложение: для любых двух векторов $|a\rangle, |b\rangle \in \mathbb{V}$ существует единственный вектор в $\mathbb{V}$, который называется их суммой и обозначается $|a\rangle + |b\rangle$.
2. Умножение на число («скаляр»): для любого вектора $|a\rangle \in \mathbb{V}$ и любого числа $\lambda \in \mathbb{F}$ существует единственный вектор в $\mathbb{V}$, который называется их произведением и обозначается $\lambda |a\rangle \equiv |a\rangle \lambda$.

Эти операции подчиняются следующим *аксиомам*:

1. Коммутативность сложения: $|a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |a\rangle$.
2. Ассоциативность сложения: $(|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle = |a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle)$.

¹ Поле — это понятие из алгебры, обозначающее полное множество некоторых чисел. Примерами полей могут служить множества рациональных ($\mathbb{Q}$), действительных ($\mathbb{R}$) и комплексных ($\mathbb{C}$) чисел. Квантовая механика обычно имеет дело с векторными пространствами над полем комплексных чисел.

3. Существование нуля: существует элемент $\mathbb{V}$, называемый $|\text{zero}\rangle$, такой, что для любого вектора $|a\rangle$ выполняется $|a\rangle + |\text{zero}\rangle = |a\rangle$ ¹.
4. Существование противоположного элемента: для любого вектора $|a\rangle$ существует другой вектор, обозначаемый $-|a\rangle$, такой что $|a\rangle + (-|a\rangle) = |\text{zero}\rangle$.
5. Дистрибутивность векторных сумм: $\lambda(|a\rangle + |b\rangle) = \lambda|a\rangle + \lambda|b\rangle$.
6. Дистрибутивность скалярных сумм: $(\lambda + \mu)|a\rangle = \lambda|a\rangle + \mu|a\rangle$.
7. Ассоциативность скалярного умножения: $\lambda(\mu|a\rangle) = (\lambda\mu)|a\rangle$.
8. Унитарность скалярного умножения: для любого вектора $|a\rangle$ и числа $1 \in \mathbb{F}$ выполняется $1 \cdot |a\rangle = |a\rangle$.

Определение А.2. *Вычитание* векторов в линейном пространстве определяется следующим образом:

$$|a\rangle - |b\rangle \equiv |a\rangle + (-|b\rangle).$$

Упражнение А.1. Какие из следующих пространств являются линейными (над полем комплексных чисел, если не оговорено иначе):

- а) $\mathbb{R}$ над $\mathbb{R}$? $\mathbb{R}$ над $\mathbb{C}$? $\mathbb{C}$ над $\mathbb{R}$? $\mathbb{C}$ над $\mathbb{C}$?
- б) Полиномиальных функций степени $\leq n$? $> n$?
- в) Всех функций, таких что $f(1) = 0$? $f(1) = 1$?
- г) Всех периодических функций с периодом T ?
- е) N -мерных геометрических векторов над $\mathbb{R}$?

Упражнение А.2. Докажите следующее:

- а) в линейном пространстве существует только один ноль;
- б) если $|a\rangle + |x\rangle = |a\rangle$ для некоторого $|a\rangle \in \mathbb{V}$, то $|x\rangle = |\text{zero}\rangle$;
- в) для любого вектора $|a\rangle$ и числа $0 \in \mathbb{F}$ верно равенство $0|a\rangle = |\text{zero}\rangle$;
- г) $-|a\rangle = (-1)|a\rangle$;
- д) $-|\text{zero}\rangle = |\text{zero}\rangle$;
- е) для любого $|a\rangle$ вектор $-|a\rangle$ единственный;
- ж) $-(-|a\rangle) = |a\rangle$;
- з) $|a\rangle = |b\rangle$ тогда и только тогда, когда $|a\rangle - |b\rangle = 0$.

Подсказка: большинство этих утверждений можно доказать путем прибавления одного и того же числа к обеим частям уравнения.

¹ Обратите внимание: в качестве альтернативной нотации для $|\text{zero}\rangle$ мы иногда используем просто 0, но никогда не $|0\rangle$.

А.2. Базис и размерность

Определение А.3. Говорят, что множество векторов $|v_i\rangle$ является *линейно независимым*, если ни одна нетривиальная¹ *линейная комбинация* $\lambda_1|v_1\rangle + \dots + \lambda_N|v_N\rangle$ не равняется $|zero\rangle$.

Упражнение А.3. Покажите, что множество векторов $\{|v_i\rangle\}$ не является линейно независимым тогда и только тогда, когда один из векторов $|v_i\rangle$ может быть представлен в виде линейной комбинации других.

Упражнение А.4. Для линейных пространств геометрических векторов покажите следующее.

- а) В пространстве векторов на плоскости (обозначаемой $\mathbb{R}^2$) любые два вектора линейно независимы в том и только том случае, если они не параллельны. Любое множество из трех векторов линейно зависимо.
- б) В пространстве векторов в трехмерном пространстве (обозначаемом $\mathbb{R}^3$) любые три вектора, не лежащие в одной плоскости (не компланарные), образуют линейно независимое множество.

Подсказка: вспомните, что геометрический вектор можно определить его компонентами x , y и z .

Определение А.4. Подмножество $\{|v_i\rangle\}$ векторного пространства $\mathbb{V}$ является для $\mathbb{V}$ *остовом* (или *основным набором* — spanning set), если любой вектор в $\mathbb{V}$ можно выразить как линейную комбинацию векторов $|v_i\rangle$. Множество всех линейных комбинаций элементов некоторого множества $\{|v_i\rangle\}$ называется *натянутым* на $\{|v_i\rangle\}$.

Упражнение А.5. Для линейного пространства геометрических векторов на плоскости покажите, что любое множество, состоящее по меньшей мере из двух векторов, из которых по крайней мере два не параллельны друг другу, образует остов.

Определение А.5. *Базисом* $\mathbb{V}$ называется любой линейно независимый остов. *Разложением* вектора по базису называется его выражение в виде линейной комбинации элементов базиса.

¹ То есть такая, в которой по крайней мере один из коэффициентов не равен нулю.

Базис — это наименьшее подмножество линейного пространства, такое, что все остальные векторы можно выразить в виде линейной комбинации элементов базиса.

Термин «базис» может создать ложное впечатление, что в линейном пространстве есть только один базис — подобно тому, как у здания может быть только один фундамент. На самом же деле, как мы увидим далее, в любом нетривиальном линейном пространстве имеется бесконечно много базисов.

Определение А.6. Число элементов в базисе называется *размерностью* $\mathbb{V}$. Для нее принято обозначение $\dim \mathbb{V}$.

Упражнение А.6*. Докажите, что в пространстве конечной размерности все базисы имеют одинаковое число элементов.

Упражнение А.7. Используя результат упр. А.6, покажите, что в пространстве конечной размерности:

- любое линейно независимое множество из $N = \dim \mathbb{V}$ векторов образует базис;
- любой остоный набор из $N = \dim \mathbb{V}$ векторов образует базис.

Упражнение А.8. Покажите, что для любого элемента $\mathbb{V}$ существует только одно разложение по векторам заданного базиса.

Определение А.7. Для разложения вектора $|a\rangle$ по базису $\{|v_i\rangle\}$, т.е. для

$$|a\rangle = \sum_i a_i |v_i\rangle, \quad (\text{А.1})$$

можно использовать обозначение

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}. \quad (\text{А.2})$$

Это называется записать вектор в *матричной форме* — в отличие от формы Дирака (А.1). Скаляры a_i называются *коэффициентами* или *амплитудами разложения*¹.

¹ Мы используем символ $\simeq$ вместо $=$, когда выражаем векторы и операторы в матричной форме, как в (А.2). Делается это для того, чтобы подчеркнуть разницу: левая часть (вектор) представляет собой абстрактный объект и не зависит от базиса, тогда как правая часть — это набор чисел, зависящий от выбора базиса $\{|v_i\rangle\}$. Однако в литературе, как правило, для простоты используется знак равенства.

Упражнение А.9. Пусть $|a\rangle$ — один из элементов $|v_k\rangle$ базиса $\{|v_i\rangle\}$. Найдите матричную форму разложения $|a\rangle$ по этому базису.

Упражнение А.10. Рассмотрите линейное пространство двумерных геометрических векторов. Такие векторы обычно определяются двумя числами (x, y) , которые представляют собой их x - и y -компоненты. Соответствует ли эта запись разложению по какому-нибудь базису? Если да, то по какому?

Упражнение А.11. Покажите, что:

- в линейном пространстве геометрических векторов на плоскости любые два непараллельных вектора образуют базис;
- в линейном пространстве геометрических векторов в трехмерном пространстве любые три некопланарных вектора образуют базис.

Упражнение А.12. Рассмотрим линейное пространство двумерных геометрических векторов. Векторы $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \vec{d}$ ориентированы по отношению к оси x под углами $0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ и имеют длины 2, 1, 3, 1 соответственно. Образуют ли базис пары $\{\vec{a}, \vec{c}\}, \{\vec{b}, \vec{d}\}, \{\vec{a}, \vec{d}\}$? Найдите разложения вектора $\vec{b}$ по каждому из этих базисов. Выразите эти разложения в матричной форме.

Определение А.8. Подмножество линейного пространства $\mathbb{V}$, тоже представляющее собой линейное пространство, называется *подпространством пространства* $\mathbb{V}$.

Упражнение А.13. В произвольном базисе $\{|v_i\rangle\}$ в линейном пространстве $\mathbb{V}$ берется подмножество элементов. Покажите, что множество векторов, натянутое на это подмножество, является подпространством пространства $\mathbb{V}$.

Например, в пространстве трехмерных геометрических векторов любое множество векторов, лежащих в одной плоскости, или любое множество векторов, коллинеарных одной прямой, образуют подпространство.

А.3. Скалярное произведение

Хотя векторы нельзя перемножать между собой как числа, можно определить операцию умножения, которая отобразит любую пару

векторов на число. Эта операция обобщает скалярное произведение, известное нам из геометрии.

Определение А.9. Для любых двух векторов $|a\rangle, |b\rangle \in \mathbb{V}$ определим *скалярное произведение* (inner/scalar product, также используется термин overlap) — число $\langle a | b \rangle \in \mathbb{C}$, такое что:

- 1) для любых трех векторов $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle$ имеет место равенство $\langle a | (|b\rangle + |c\rangle) = \langle a | b \rangle + \langle a | c \rangle$;
- 2) для любых двух векторов $|a\rangle, |b\rangle$ и числа λ имеет место равенство $\langle a | (\lambda |b\rangle) = \lambda \langle a | b \rangle$;
- 3) для любых двух векторов $|a\rangle, |b\rangle$ верно равенство $\langle a | b \rangle = \langle b | a \rangle^*$;
- 4) для любого $|a\rangle$, $\langle a | a \rangle$ есть неотрицательное действительное число, причем $\langle a | a \rangle = 0$ в том и только том случае, если $|a\rangle = 0$.

Упражнение А.14. В геометрии скалярное произведение двух векторов $\vec{a} = (x_a, y_a)$ и $\vec{b} = (x_b, y_b)$ (где все компоненты действительны) определяется как $\vec{a} \cdot \vec{b} = x_a x_b + y_a y_b$. Покажите, что это определение обладает всеми перечисленными выше свойствами.

Упражнение А.15. Пусть вектор $|x\rangle$ записан в виде линейной комбинации некоторых векторов $|a_i\rangle$: $|x\rangle = \sum_i \lambda_i |a_i\rangle$. Для любого другого вектора $|b\rangle$ покажите, что $\langle b | x \rangle = \sum_i \lambda_i \langle b | a_i \rangle$ и $\langle x | b \rangle = \sum_i \lambda_i^* \langle a_i | b \rangle$.

Упражнение А.16. Для любого вектора $|a\rangle$ покажите, что $\langle \text{zero} | a \rangle = \langle a | \text{zero} \rangle = 0$.

Определение А.10. Говорят, что $|a\rangle$ и $|b\rangle$ *ортogonalны*, если $\langle a | b \rangle = 0$.

Упражнение А.17. Докажите, что множество ненулевых взаимно ортogonalных векторов линейно независимо.

Определение А.11. $\| |a\rangle \| = \sqrt{\langle a | a \rangle}$ называют *нормой (длиной)* вектора. Векторы с нормой 1 называют *нормированными*. Для заданного вектора $|a\rangle$ величина $\mathcal{N} = 1 / \| |a\rangle \|$ (т.е. такая, что вектор $\mathcal{N} |a\rangle$ нормированный) называется *нормирующим множителем*.

Упражнение А.18. Покажите, что при умножении вектора на *фазовый множитель* $e^{i\varphi}$, где φ — действительное число, его норма не меняется.

Определение А.12. Линейное пространство, в котором определено скалярное произведение, называется *гильбертовым пространством* (Hilbert space).

А.4. Ортонормальный базис

Определение А.13. *Ортонормальным (ортонормированным) базисом* $\{|v_i\rangle\}$ называется базис, элементы которого взаимно ортогональны и имеют норму, равную 1, т. е.

$$\langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij}, \quad (\text{A.3})$$

где δ_{ij} — символ Кронекера.

Упражнение А.19. Покажите, что любое ортонормальное множество из N векторов (где $N = \dim \mathbb{V}$) образует базис.

Упражнение А.20. Покажите, что если $\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}$

суть разложения векторов $|a\rangle$ и $|b\rangle$ по ортонормальному базису, то их скалярное произведение можно записать в виде

$$\langle a | b \rangle = a_1^* b_1 + \dots + a_N^* b_N. \quad (\text{A.4})$$

Уравнение (А.4) может быть выражено в матричной форме при помощи правила «строка-на-столбец»:

$$\langle a | b \rangle = \begin{pmatrix} a_1^* & \dots & a_N^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Одной из областей применения приведенных выше правил вычисления скалярного произведения является обычная пространственная геометрия. Как мы узнали в упр. А.10, координаты геометрических векторов соответствуют их разложению по ортонормальному базису $\{\hat{i}, \hat{j}\}$, поэтому неудивительно, что их скалярные произведения задаются уравнением (А.4).

Предположим, мы вычисляем скалярное произведение одной и той же пары векторов по (A.5) в двух разных базисах. Тогда в правой стороне уравнения у нас будут стоять разные числа, и может показаться, что скалярное произведение тоже станет зависеть от выбранного базиса. Однако на самом деле это не так: согласно определению A.9, скалярное произведение определяется для пары векторов и не зависит от базиса.

Упражнение A.21. Покажите, что коэффициенты разложения $\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$

вектора $|a\rangle$ по ортонормальному базису можно найти следующим образом:

$$a_i = \langle v_i | a \rangle. \quad (\text{A.6})$$

Иными словами [см. (A.1)],

$$|a\rangle = \sum_i \langle v_i | a \rangle |v_i\rangle. \quad (\text{A.7})$$

Упражнение A.22. Рассмотрим два вектора в двумерном гильбертовом пространстве: $|\psi\rangle = 4|v_1\rangle + 5|v_2\rangle$ и $|\phi\rangle = -2|v_1\rangle + 3i|v_2\rangle$, где $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$ — ортонормальный базис.

а) Покажите, что множество

$$\{|w_1\rangle = (|v_1\rangle + i|v_2\rangle)/\sqrt{2}, |w_2\rangle = (|v_1\rangle - i|v_2\rangle)/\sqrt{2}\}$$

также является ортонормальным базисом.

б) Найдите матрицы векторов $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ в обоих базисах.

с) Вычислите скалярное произведение этих векторов в обоих базисах, используя (A.5). Покажите, что они совпадают.

Упражнение A.23. Покажите, что если $|a\rangle$ есть нормированный вектор, а $\{a_i = \langle v_i | a \rangle\}$ — его разложение в ортонормальном базисе $\{|v_i\rangle\}$, то

$$\sum_i |a_i|^2 = 1. \quad (\text{A.8})$$

Упражнение А.24. Предположим, что $\{|w_i\rangle\}$ есть некоторый базис в $\mathbb{V}$. Покажите, что он может быть использован для нахождения ортонормального базиса $\{|v_i\rangle\}$ путем применения следующего уравнения последовательно к каждому из элементов базиса:

$$|v_{k+1}\rangle = \mathcal{N} \left[|v_{k+1}\rangle - \sum_{i=1}^k \langle v_i | w_{k+1} \rangle |v_i\rangle \right], \quad (\text{A.9})$$

где $\mathcal{N}$ — коэффициент нормирования. Это называется *процедурой Грама — Шмидта*.

Упражнение А.25*. Для нормированного вектора $|\psi\rangle$ в N -мерном гильбертовом пространстве и любого натурального числа $m \leq N$ покажите, что возможно найти базис $\{|v_i\rangle\}$, такой что $|\psi\rangle = 1/\sqrt{m} \sum_{i=1}^m |v_i\rangle$.

Упражнение А.26*. Докажите *неравенство Коши — Буняковского* (Cauchy — Schwarz inequality) для любых двух векторов $|a\rangle$ и $|b\rangle$:

$$|\langle a | b \rangle| \leq \| |a\rangle \| \times \| |b\rangle \|. \quad (\text{A.10})$$

Покажите, что это неравенство становится равенством в том и только том случае, когда векторы $|a\rangle$ и $|b\rangle$ коллинеарны (т. е. $|a\rangle = \lambda |b\rangle$).

Подсказка: примите во внимание, что $\| |a\rangle - \lambda |b\rangle \|^2 \geq 0$ для любого комплексного числа λ .

Упражнение А.27. Докажите *неравенство треугольника* для любых двух векторов $|a\rangle$ и $|b\rangle$:

$$\| (|a\rangle + |b\rangle) \| \leq \| |a\rangle \| + \| |b\rangle \|. \quad (\text{A.11})$$

А.5. Сопряженное пространство

Скалярное произведение $\langle a | b \rangle$ можно вычислить как матричное произведение (А.5) строки и столбца. Если столбец $\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}$ напрямую соответствует вектору $|b\rangle$, то строка $(a_1^* \dots a_N^*)$ получается из столбца,

соответствующего вектору $|a\rangle$, путем транспонирования и комплексного сопряжения. Договоримся связывать эту строку с вектором $\langle a|$, который будем называть *сопряженным* (conjugate/adjoint) с $|a\rangle$.

Определение А.14. Для гильбертова пространства $\mathbb{V}$ определяют *сопряженное пространство* $\mathbb{V}^+$, находящееся во взаимно однозначном соответствии с $\mathbb{V}$, следующим образом: для каждого вектора $|a\rangle \in \mathbb{V}$ существует один и только один *сопряженный* вектор $\langle a| \in \mathbb{V}^+$, обладающий свойством

$$\text{сопр}(\lambda |a\rangle + \mu |b\rangle) = \lambda^* \langle a| + \mu^* \langle b|. \quad (\text{A.12})$$

Упражнение А.28. Покажите, что $\mathbb{V}^+$ — линейное пространство.

Упражнение А.29. Покажите, что если $\{|v_i\rangle\}$ — базис в $\mathbb{V}$, $\{\langle v_i|\}$ — базис в $\mathbb{V}^+$ и если вектор $|a\rangle$ раскладывается по базису $\{|v_i\rangle\}$ как $|a\rangle = \sum a_i |v_i\rangle$, то разложение сопряженного с ним вектора равно

$$\langle a| = \sum a_i^* \langle v_i|. \quad (\text{A.13})$$

Начинающие квантовые физики иногда забывают про правило сопряжения в уравнении (A.13). Чтобы потренироваться в его использовании, выполним следующее простое упражнение.

Упражнение А.30. Найдите матричную форму вектора, сопряженного с $|v_1\rangle + i |v_2\rangle$, в базисе $\{\langle v_1|, \langle v_2|\}$.

«Прямые» и сопряженные векторы иногда называют *кет*- и *бра*-векторами соответственно. Эти названия, введенные П. Дираком вместе с символьными обозначениями $\langle |$ и $| \rangle$, обосновываются тем фактом, что комбинация бра- и кет-векторов вида $\langle a | b \rangle$ — «скобка» (bracket) — дает скалярное произведение этих двух векторов.

Обратите внимание: $\mathbb{V}$ и $\mathbb{V}^+$ — разные линейные пространства. Бра-вектор и кет-вектор складывать друг с другом нельзя.

А.6. Линейные операторы

А.6.1. Операции с линейными операторами

Определение А.15. *Линейный оператор $\hat{A}$ на линейном пространстве $\mathbb{V}$ — это отображение¹ линейного пространства $\mathbb{V}$ на себя, такое, что для любых векторов $|a\rangle$, $|b\rangle$ и любого скаляра λ*

$$\hat{A}(|a\rangle + |b\rangle) = \hat{A}|a\rangle + \hat{A}|b\rangle; \quad (\text{A.14a})$$

$$\hat{A}(\lambda|a\rangle) = \lambda\hat{A}|a\rangle. \quad (\text{A.14b})$$

Упражнение А.31. Определите, являются ли следующие отображения линейными операторами²:

a) $\hat{A}|a\rangle \equiv 0.$

b) $\hat{A}|a\rangle = |a\rangle.$

c) $\mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2: \hat{A} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \end{pmatrix}.$

d) $\mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2: \hat{A} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x+y \\ xy \end{pmatrix}.$

e) $\mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2: \hat{A} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x+1 \\ y+1 \end{pmatrix}.$

f) Поворот на угол φ в линейном пространстве двумерных геометрических векторов (над $\mathbb{R}$).

Определение А.16. Для любых двух операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ их сумма $\hat{A} + \hat{B}$ есть оператор, который отображает векторы в соответствии с

$$(\hat{A} + \hat{B})|a\rangle \equiv \hat{A}|a\rangle + \hat{B}|a\rangle. \quad (\text{A.15})$$

¹ Отображение — это функция, которая устанавливает для каждого элемента $|a\rangle$ в $\mathbb{V}$ уникальный «образ» $\hat{A}|a\rangle$.

² $\mathbb{C}^2$ есть линейное пространство столбцов $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$, содержащих по два комплексных числа.

Для любого оператора $\hat{A}$ и любого скаляра λ их произведение $\lambda \hat{A}$ есть оператор, который отображает векторы в соответствии с

$$(\lambda \hat{A})|a\rangle \equiv \lambda(\hat{A}|a\rangle). \quad (\text{A.16})$$

Упражнение А.32. Покажите, что множество всех линейных операторов над гильбертовым пространством размерности N само является линейным пространством, в котором сложение и умножение на скаляр задается уравнениями (A.15) и (A.16) соответственно.

- Покажите, что операторы $\hat{A} + \hat{B}$ и $\lambda \hat{A}$ являются линейными в смысле определения A.15.
- Определите, чему равен нулевой элемент и противоположный элемент $-\hat{A}$ заданного $\hat{A}$ в пространстве линейных операторов.
- ^s Покажите, что в пространстве линейных операторов выполняются все аксиомы, введенные в определении A.1.

Определение А.17. Оператор $\hat{1}$, отображающий каждый вектор пространства $\mathbb{V}$ на самого себя, называется *единичным (тождественным) оператором*.

Записывая произведение скаляра на единичный оператор, мы иногда опускаем символ $\hat{1}$ — если, конечно, контекст не допускает двусмысленности. К примеру, вместо того, чтобы записать $\hat{A} - \lambda \hat{1}$, мы можем обойтись просто записью $\hat{A} - \lambda$.

Определение А.18. Для операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ их *произведение* $\hat{A}\hat{B}$ есть оператор, отображающий каждый вектор $|a\rangle$ на $\hat{A}\hat{B}|a\rangle \equiv \hat{A}(\hat{B}|a\rangle)$. То есть, чтобы найти действие оператора $\hat{A}\hat{B}$ на вектор, мы должны применить сначала $\hat{B}$ к этому вектору, а затем $\hat{A}$ к результату.

Упражнение А.33. Покажите, что произведение двух линейных операторов тоже является линейным оператором.

Порядок, в котором перемножаются два оператора, существенен, поскольку в общем случае $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Если же для каких-то операторов $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, то говорят, что эти операторы *коммутируют*. Коммутационные, или перестановочные, соотношения между операторами играют важную роль в квантовой механике и будут подробно обсуждаться в разд. А.9.

Упражнение А.34. Покажите, что операторы поворота против часовой стрелки на угол $\pi/2$ и отражения относительно горизонтальной

оси в линейном пространстве двумерных геометрических векторов не коммутируют.

Упражнение А.35. Покажите, что перемножение операторов обладает свойством ассоциативности, т. е. для любых трех операторов верно:

$$\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}. \quad (\text{A.17})$$

А.6.2. Матрицы

Может создаться впечатление, что для полного описания линейного оператора мы должны указать все его действия с каждым вектором. Однако на самом деле это не так. В действительности довольно лишь сообщить, как этот оператор отображает элементы некоторого базиса $\{|v_1\rangle, \dots, |v_N\rangle\}$ в $\mathbb{V}$, т. е. достаточно знать множество $\{\hat{A}|v_1\rangle, \dots, \hat{A}|v_N\rangle\}$. Тогда для любого другого вектора $|a\rangle$, который раскладывается в виде

$$|a\rangle = a_1|v_1\rangle + \dots + a_N|v_N\rangle,$$

мы имеем, вследствие линейности,

$$\hat{A}|a\rangle = a_1\hat{A}|v_1\rangle + \dots + a_N\hat{A}|v_N\rangle. \quad (\text{A.18})$$

Как много численных параметров нужно для того, чтобы полностью охарактеризовать линейный оператор? Каждый образ $\hat{A}|v_j\rangle$ любого из элементов базиса можно разложить по тому же базису:

$$\hat{A}|v_j\rangle = \sum_i A_{ij}|v_i\rangle. \quad (\text{A.19})$$

Для каждого j множество из N параметров $A_{1j}, \dots, A_{Nj}$ целиком описывает $\hat{A}|v_j\rangle$. Соответственно, множество из N^2 параметров A_{ij} , где i и j изменяются от 1 до N , содержит полную информацию о линейном операторе.

Определение А.19. Матрицей оператора в базисе $\{|v_i\rangle\}$ называется квадратная таблица $N \times N$, элементы которой задаются уравнением (А.19). Первый индекс в A_{ij} есть номер строки, второй — номер столбца.

Предположим, к примеру, что вам требуется доказать равенство двух операторов $\hat{A} = \hat{B}$. Вы можете сделать это, показав идентичность матриц указанных операторов A_{ij} и B_{ij} в любом базисе. Поскольку матрица содержит полную информацию об операторе, этого достаточно. Конечно, базис следует выбирать продуманно, так чтобы матрицы A_{ij} и B_{ij} было как можно проще вычислить.

Упражнение А.36. Найдите матрицу оператора $\hat{\mathbf{I}}$. Покажите, что она не зависит от выбора базиса.

Упражнение А.37. Найдите матричное представление вектора $\hat{A}|v_j\rangle$ в базисе $\{|v_i\rangle\}$, где $|v_j\rangle$ — элемент этого базиса, j задано, а матрица $\hat{A}$ известна.

Упражнение А.38. Покажите, что если

$$|a\rangle \approx \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$

в некотором базисе, то вектор $\hat{A}|a\rangle$ задается матричным произведением

$$\hat{A}|a\rangle \approx \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{N1} & \dots & A_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_j A_{1j} a_j \\ \vdots \\ \sum_j A_{Nj} a_j \end{pmatrix}. \quad (\text{A.20})$$

Упражнение А.39. Матрицы A_{ij} и B_{ij} операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ заданы. Найдите матрицы операторов:

- a) $\hat{A} + \hat{B}$;
- b) $\lambda \hat{A}$;
- c) $\hat{A}\hat{B}$.

Последние два упражнения показывают, что операции с операторами и векторами легко представляются на языке матриц и столбцов. Однако есть одна важная оговорка: матрицы векторов и операторов зависят от выбранного базиса — в отличие от «физических» операторов и векторов, которые определяются независимо от какого бы то ни было конкретного базиса.

Эту разницу обязательно нужно учитывать, когда принимается решение о том, в какой нотации проводить вычисления — в матричной или дираковой. Если для краткости вы выбираете матричную нотацию, то вам следует всегда помнить, с каким базисом вы работаете, и записывать все матрицы именно в этом базисе.

Упражнение А.40. Покажите, что элементы матрицы оператора $\hat{A}$ в ортонормальном базисе $\{|v_i\rangle\}$ задаются выражением:

$$A_{ij} = \langle v_i | \hat{A} | v_j \rangle \equiv \langle v_i | \hat{A} | v_j \rangle. \quad (\text{A.21})$$

Упражнение А.41. Найдите матрицы операторов $\hat{R}_\phi$ и $\hat{R}_\theta$, соответствующих повороту двумерного геометрического пространства на углы ϕ и θ соответственно [упр. А.31 (f)]. Воспользовавшись результатом упр. А.39, найдите матрицу оператора $\hat{R}_\phi \hat{R}_\theta$ и убедитесь в том, что она соответствует повороту на угол $(\phi + \theta)$.

Упражнение А.42. Приведите пример базиса и определите размерность линейного пространства линейных операторов над гильбертовым пространством размерности N (см. упр. А.32).

А.6.3. Внешние произведения

Определение А.20. Под *внешним произведением* (outer product) $|a\rangle\langle b|$ понимается оператор, действующий следующим образом:

$$(|a\rangle\langle b|) |c\rangle \equiv |a\rangle (\langle b | c \rangle) = (\langle b | c \rangle) |a\rangle. \quad (\text{A.22})$$

(Во втором равенстве учитывается тот факт, что $\langle b | c \rangle$ представляет собой число и коммутирует с чем угодно.)

Упражнение А.43. Покажите, что $|a\rangle\langle b|$ в смысле приведенного выше определения есть линейный оператор.

Упражнение А.44. Покажите, что $(\langle a | b \rangle) (\langle c | d \rangle) = \langle a | (|b\rangle\langle c|) |d\rangle$.

Упражнение А.45. Покажите, что матрица оператора $|a\rangle\langle b|$ задается так:

$$|a\rangle\langle b| \simeq \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1^* & \dots & b_N^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & \dots & a_1 b_N^* \\ \vdots & & \vdots \\ a_N b_1^* & \dots & a_N b_N^* \end{pmatrix}. \quad (\text{A.23})$$

Этот результат дает интуитивное понимание внешнего произведения. Как говорилось в предыдущем разделе, кет-вектор соответствует столбцу, а бра-вектор — строке. Согласно правилам перемножения матриц, произведение столбца на строку представляет собой квадратную матрицу, а соответствующее внешнее произведение — это просто оператор, задаваемый этой матрицей.

Упражнение А.46. Пусть A_{ij} — матрица оператора $\hat{A}$ в ортонормальном базисе $\{|v_i\rangle\}$. Покажите, что

$$\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} |v_i\rangle \langle v_j|. \quad (\text{A.24})$$

Упражнение А.47. Пусть $\hat{A}$ — оператор, а $\{|v_i\rangle\}$ — ортонормальный базис в гильбертовом пространстве. Известно, что $\hat{A}|v_1\rangle = |w_1\rangle, \dots, \hat{A}|v_N\rangle = |w_N\rangle$, где $|w_1\rangle, \dots, |w_N\rangle$ — некоторые векторы (необязательно ортонормальные). Покажите, что

$$\hat{A} = \sum_i |w_i\rangle \langle v_i|. \quad (\text{A.25})$$

Эти упражнения раскрывают значимость внешнего произведения. Во-первых, (A.24) дает способ перевода матрицы оператора в диракову нотацию. Данный результат дополнителен к уравнению (A.21), которое используется для достижения обратной цели — перевода оператора из дираковой нотации в матричную. Во-вторых, уравнение (A.25) позволяет построить выражение для оператора на основе наших знаний о том, как этот оператор отображает элементы произвольного ортонормального базиса. Мы обнаружим, что оно очень полезно на практике, когда попытаемся связать оператор с физическим процессом.

Ниже приводятся два упражнения для практики в использовании данных результатов; за ними последует еще одно весьма важное приложение внешнего произведения.

Упражнение А.48. Матрица оператора $\hat{A}$ в базисе $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$ равна

$$\begin{pmatrix} 1 & -3i \\ 3i & 4 \end{pmatrix}.$$

Выразите этот оператор в дираковой нотации.

Упражнение А.49. Пусть $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$ — ортонормальный базис в двумерном гильбертовом пространстве. Предположим, оператор $\hat{A}$ ото-

бражает $|u_1\rangle = (|v_1\rangle + |v_2\rangle)/\sqrt{2}$ на $|w_1\rangle = \sqrt{2}|v_1\rangle$, а $|u_2\rangle = (|v_1\rangle - |v_2\rangle)/\sqrt{2}$ на $|w_2\rangle = \sqrt{2}(|v_1\rangle + 3i|v_2\rangle)$. Найдите матрицу $\hat{A}$ в базисе $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$.

Подсказка: обратите внимание на то, что $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$ — ортонормальный базис.

Упражнение А.50. Покажите, что для любого ортонормального базиса $\{|v_i\rangle\}$

$$\sum_i |v_i\rangle\langle v_i| = \hat{1}. \quad (\text{A.26})$$

Этот результат (resolution of the identity) полезен для следующего применения. Предположим, что мы знаем матрицу $\hat{A}$ в некотором ортонормальном базисе $\{|v_i\rangle\}$ и хотим найти его матрицу в другом ортонормальном базисе — $\{|w_i\rangle\}$. Это можно сделать следующим образом:

$$\begin{aligned} \left(\hat{A}_{ij} \right)_{w\text{-базис}} &= \langle w_i | \hat{A} | w_j \rangle \\ &= \langle w_i | \hat{1} \hat{A} \hat{1} | w_j \rangle \\ &= \left\langle w_i \left| \left(\sum_k |v_k\rangle\langle v_k| \right) \hat{A} \left(\sum_m |v_m\rangle\langle v_m| \right) \right| w_j \right\rangle \\ &= \sum_k \sum_m \langle w_i | v_k \rangle \langle v_k | \hat{A} | v_m \rangle \langle v_m | w_j \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Центральный объект в последней строке — элемент матрицы $\hat{A}$ в «старом» базисе $\{|v_i\rangle\}$. Поскольку нам известны скалярные произведения всех пар элементов в старом и новом базисах, мы можем использовать приведенное выражение, чтобы найти каждый элемент матрицы $\hat{A}$ в новом базисе. Мы будем использовать данный прием на протяжении всего курса.

Вычисление можно упростить, если интерпретировать последнюю строку (A.27) как произведение трех матриц. Пример этого — в следующем упражнении.

Упражнение А.51. Найдите матрицу оператора $\hat{A}$ из упр. А.48 в базисе $\{|w_1\rangle, |w_2\rangle\}$, таком что

$$|w_1\rangle = (|v_1\rangle + i|v_2\rangle)/\sqrt{2}, \quad (\text{A.28})$$

$$|w_2\rangle = (|v_1\rangle - i |v_2\rangle)/\sqrt{2},$$

а) используя нотацию Дирака, начав с результата упр. А.48, а затем выразив каждый бра- и кет-вектор в новом базисе;

б) используя (А.27).

Убедитесь, что результаты совпадают.

А.7. Сопряженные и самосопряженные операторы

Действие оператора $\hat{A}$ на кет-вектор $|c\rangle$ соответствует умножению квадратной матрицы $\hat{A}$ на столбец, определяющий $|c\rangle$. Результатом этой операции является новый столбец $\hat{A}|c\rangle$.

Рассмотрим по аналогии операцию, в которой на строку, соответствующую бра-вектору $\langle b|$, умножается справа квадратная матрица $\hat{A}$. В результате получится новая строка, соответствующая какому-то бра-вектору. Мы можем связать эту операцию с действием оператора $\hat{A}$ на $\langle b|$ *справа*, что мы обозначаем в нотации Дирака как $\langle b|\hat{A}$. Формальное определение данной операции выглядит так:

$$\langle b|\hat{A} \equiv \sum_{i,j} b_i^* A_{ij} \langle v_j|, \quad (\text{А.29})$$

где A_{ij} и b_i суть, соответственно, матричные элементы $\hat{A}$ и $|b\rangle$ в ортонормальном базисе $\{|v_i\rangle\}$.

Упражнение А.52. Выведите следующие свойства операции, определяемой уравнением (А.29):

а) $\hat{A}$, действующий справа, есть линейный оператор в сопряженном пространстве;

б) $\langle a|b\rangle\langle c| = \langle a|(|b\rangle\langle c|)$;

с) для векторов $|a\rangle$ и $|c\rangle$,

$$(\langle a|\hat{A})|c\rangle = \langle a|(\hat{A}|c\rangle); \quad (\text{А.30})$$

д) вектор $\langle a|\hat{A}$, определяемый (А.29), не зависит от базиса, в котором вычисляется матрица (A_{ij}) .

Теперь рассмотрим следующую задачу. Предположим, у нас имеется оператор $\hat{A}$, отображающий кет-вектор $|a\rangle$ на кет-вектор $|b\rangle$:

$\hat{A}|a\rangle = |b\rangle$. Чему равен оператор $\hat{A}^\dagger$, который, действуя справа, отображает бра-вектор $\langle a|$ на бра-вектор $\langle b|$: $\langle a|\hat{A}^\dagger = \langle b|$? Оказывается, этот оператор не совпадает с $\hat{A}$, но достаточно просто соотносится с ним.

Определение А.21. Оператор $\hat{A}^\dagger$ (“A-dagger”) называется *сопряженным* (эрмитово-сопряженным) с $\hat{A}$, если для любого вектора $|a\rangle$

$$\langle a|\hat{A}^\dagger = \text{сопр}(\hat{A}|a\rangle). \quad (\text{A.31})$$

Если $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, то оператор называют *эрмитовым* (Hermitian), или *самосопряженным*.

В отличие от бра- и кет-векторов, операторы и их сопряженные живут в одном и том же гильбертовом пространстве. Точнее, они живут как в бра-, так и в кет-пространстве — действуя на бра-векторы справа, а на кет-векторы слева. Обратите, однако, внимание: оператор не может действовать на бра-вектор слева или на кет-вектор справа.

Упражнение А.53. Покажите, что матрица $\hat{A}^\dagger$ связана с матрицей $\hat{A}$ через транспонирование и комплексное сопряжение.

Упражнение А.54. Покажите, что для любого оператора $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$.

Упражнение А.55. Покажите, что операторы Паули (1.7) эрмитовы.

Упражнение А.56. Используя контрпример, покажите: если два оператора эрмитовы, это не гарантирует, что их произведение тоже будет эрмитовым.

Упражнение А.57. Покажите, что

$$(|c\rangle\langle b|)^\dagger = |b\rangle\langle c|. \quad (\text{A.32})$$

Данное упражнение может навести на мысль, что оператор, сопряженный с данным, является обратным ему: если «прямой» оператор отображает $|b\rangle$ на $|c\rangle$, то сопряженный к нему делает обратное. Это не всегда так: как нам известно из определения внешнего произведения (А.20), оператор $|b\rangle\langle c|$, действуя слева, отображает всё (не только $|c\rangle$) на $|b\rangle$, тогда как $|c\rangle\langle b|$ отображает всё на $|c\rangle$. Однако

существует важный класс операторов (так называемые унитарные операторы), для которого «обратный» действительно означает то же, что и «сопряженный». Мы поговорим об этих операторах подробно в разд. А.10.

Упражнение А.58. Покажите, что:

$$a) (\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger; \quad (\text{A.33})$$

$$b) (\lambda \hat{A})^\dagger = \lambda^* \hat{A}^\dagger; \quad (\text{A.34})$$

$$c) (\hat{A} \hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (\text{A.35})$$

Можно сказать, что у каждого объекта в линейной алгебре есть сопряженный с ним объект. Для числа это комплексно сопряженное с ним число; для кет-вектора это бра-вектор (и наоборот); для оператора — сопряженный с ним оператор. Матрицы объекта и его сопряженного связаны посредством транспонирования и комплексного сопряжения.

Предположим, нам задано сложное выражение, состоящее из векторов и операторов, и от нас требуется найти сопряженное с ним выражение. Резюмируя (А.12), (А.32) и (А.35), мы получим следующий алгоритм:

- a) поменять порядок всех произведений на обратный;
- b) заменить все числа на комплексно сопряженные;
- c) заменить все кет на бра, и наоборот;
- d) заменить все операторы их сопряженными.

Пример:

$$\text{сопр}(\lambda \hat{A} \hat{B} |a\rangle \langle b| \hat{C}) = \lambda^* \hat{C}^\dagger |b\rangle \langle a| \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (\text{A.36})$$

Это правило можно использовать для получения следующего соотношения.

Упражнение А.59. Покажите, что

$$\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \varphi \rangle^*. \quad (\text{A.37})$$

А.8. Спектральное разложение

Теперь давайте докажем важную теорему для эрмитовых операторов. Я буду считать, что вы знакомы с понятиями *детерминанта*, *собственного значения* (eigenvalue) и *собственного вектора* (eigenvector) матрицы, а также с методами их нахождения. Если это не так, рекомендую заглянуть в любой вводный текст по линейной алгебре.

Упражнение А.60*. Докажите *спектральную теорему*: для любого эрмитова оператора $\hat{V}$ существует ортонормальный базис $\{|v_i\rangle\}$ (мы будем называть его *собственным базисом*), такой что

$$\hat{V} = \sum_i v_i |v_i\rangle\langle v_i|, \quad (\text{A.38})$$

где все v_i действительны.

Представление оператора в виде (A.38) называется *спектральным разложением* или *диагонализацией* (приведением к диагональному виду).

Упражнение А.61. Запишите матрицу оператора (A.38) в его собственном базисе.

Упражнение А.62. Покажите, что элементы собственного базиса оператора $\hat{V}$ (в смысле упр. А. 60) представляют собой собственные векторы $\hat{V}$, а соответствующие величины v_i — его собственные значения, т. е. для любого i

$$\hat{V}|v_i\rangle = v_i|v_i\rangle.$$

Упражнение А.63*§. Покажите, что спектральное разложение (необязательно с действительными собственными значениями) существует для любого оператора $\hat{V}$, такого что $\hat{V}\hat{V}^\dagger = \hat{V}^\dagger\hat{V}$ (такие операторы называют *нормальными*).

Упражнение А.64. Найдите собственные значения и собственный базис оператора, связанного с поворотом плоскости двумерных геометрических векторов на угол ϕ (см. упр. А.41), но над полем *комплексных чисел*.

Упражнение А.65^s. В трехмерном гильбертовом пространстве три оператора имеют следующие матрицы в ортонормальном базисе $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle\}$:

$$\text{a) } \hat{L}_x \simeq \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\text{b) } \hat{L}_y \simeq \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix};$$

$$\text{c) } \hat{L}_z \simeq \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Покажите, что эти операторы эрмитовы. Найдите их собственные значения и собственные векторы.

Таким образом, мы обнаружили, что каждый эрмитов оператор имеет спектральное разложение. Но единственно ли спектральное разложение конкретного оператора? Ответ положительный при условии, что этот оператор не имеет *вырожденных собственных значений* (degenerate eigenvalues), т. е. собственных значений, связанных с двумя или более собственными векторами.

Упражнение А.66. Эрмитов оператор $\hat{V}$ приводится к диагональному виду в ортонормальном базисе $\{|v_i\rangle\}$. Предположим, что существует вектор $|\psi\rangle$, который является собственным вектором $\hat{V}$ с собственным значением v , но не пропорционален никакому $|v_i\rangle$. Покажите, что это возможно, только если v является вырожденным собственным значением $\hat{V}$, а $|\psi\rangle$ представляет собой линейную комбинацию элементов $\{|v_i\rangle\}$, соответствующих этому собственному значению.

Упражнение А.67. Покажите, что для эрмитова оператора $\hat{V}$, собственные значения которого не вырождены:

- собственный базис единственен с точностью до фазовых множителей;
- любое множество, содержащее все линейно независимые нормированные собственные векторы оператора $\hat{V}$, идентично собственному базису $\hat{V}$ с точностью до фазовых множителей.

Последний результат имеет первостепенное значение, и мы будем широко им пользоваться на протяжении всего курса. Он обобщается также на гильбертовы пространства бесконечной размерности и даже на пространства, связанные с непрерывными наблюдаемыми. А теперь рассмотрим случай операторов с вырожденными собственными значениями.

Упражнение А.68. Найдите собственные значения оператора тождества и покажите, что они вырожденные. Приведите два различных примера собственного базиса этого оператора в двумерном гильбертовом пространстве.

Упражнение А.69. Покажите, что собственные векторы эрмитова оператора $\hat{V}$, связанные с разными собственными значениями, ортогональны. Предположение о невырожденности собственных значений не применять.

Упражнение А.70. Предположим, собственное значение v оператора $\hat{V}$ вырождено. Покажите, что множество соответствующих ему собственных векторов образует линейное подпространство (см. определение А.8).

Упражнение А.71*

- Покажите, что если $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle$ для всех $|\psi\rangle$, то $\hat{A} = \hat{B}$.
- Покажите, что если $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ — действительное число для всех $|\psi\rangle$, то $\hat{A}$ эрмитов.

Определение А.22. Говорят, что эрмитов оператор $\hat{A}$ *положителен* (неотрицателен), если $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle > 0$ ($\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \geq 0$) для любого ненулевого вектора $|\psi\rangle$.

Упражнение А.72. Покажите, что эрмитов оператор $\hat{A}$ положителен (неотрицателен), если и только если все его собственные значения положительны (неотрицательны).

Упражнение А.73. Покажите, что сумма $\hat{A} + \hat{B}$ двух положительных (неотрицательных) операторов положительна (неотрицательна).

А.9. Коммутаторы

Как уже говорилось, не все операторы коммутируют. Степень некоммутативности количественно выражается оператором, известным как коммутатор.

Определение А.23. Для любых двух операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутатор и антикоммутатор определяются соответственно следующими выражениями:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}; \quad (\text{A.39a})$$

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \quad (\text{A.39b})$$

Упражнение А.74. Покажите, что:

$$\text{a) } \hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}([\hat{A}, \hat{B}] + \{\hat{A}, \hat{B}\}); \quad (\text{A.40})$$

$$\text{b) } [\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]; \quad (\text{A.41})$$

$$\text{c) } [\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger]; \quad (\text{A.42})$$

$$\text{d) } [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]; \quad (\text{A.43a})$$

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]; \quad (\text{A.43b})$$

$$\text{e) } [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]; \quad (\text{A.44a})$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]; \quad (\text{A.44b})$$

$$\begin{aligned} \text{f) } [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}] &= \hat{C}\hat{A}[\hat{B}, \hat{D}] + \hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]\hat{D} + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}\hat{D} = \\ &= \hat{A}\hat{C}[\hat{B}, \hat{D}] + \hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]\hat{D} + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{D}\hat{B}. \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

При расчете коммутаторов для сложных выражений рекомендуется пользоваться соотношениями, выведенными в этом упражнении, а не определением (А.39, а) коммутатора. В книге имеется множество примеров того, насколько проще при этом становятся вычисления.

Упражнение А.75. Выразите коммутаторы:

а) $[\hat{A}\hat{B}\hat{C}, \hat{D}];$

б) $[\hat{A}^2 + \hat{B}^2, \hat{A} + i\hat{B}]$

через попарные коммутаторы операторов $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \hat{D}$.

Упражнение А.76. Для двух операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ предположим, что $[\hat{A}, \hat{B}] = c\hat{1}$, где c — комплексное число. Покажите, что

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = nc\hat{B}^{n-1}. \quad (\text{A.46})$$

Упражнение А.77. Покажите, что если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ эрмитовы, то эрмитовы также

а) $i[\hat{A}, \hat{B}];$

б) $\{\hat{A}, \hat{B}\}.$

Упражнение А.78. Найдите коммутационные соотношения операторов Паули (1.7).

Ответ:

$$[\hat{\sigma}_m, \hat{\sigma}_j] = 2i\epsilon_{mjk}\sigma_k, \quad (\text{A.47})$$

где ϵ есть символ Леви-Чивиты, задаваемый выражением

$$\epsilon_{mjk} \equiv \begin{cases} +1 & \text{при } mjk = xyz \text{ } yzx \text{ или } zxy \\ -1 & \text{при } mjk = xzy \text{ } yxz \text{ или } zyx \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (\text{A.48})$$

А.10. Унитарные операторы

Определение А.24. Линейные операторы, отображающие все векторы с нормой 1 на векторы с нормой 1, называют *унитарными* (unitary).

Упражнение А.79. Покажите, что унитарные операторы сохраняют норму любого вектора, т. е. если $|a'\rangle = \hat{U}|a\rangle$, то $\langle a|a\rangle = \langle a'|a'\rangle$.

Упражнение А.80. Покажите, что оператор $\hat{U}$ является унитарным в том и только том случае, когда он сохраняет скалярное произведение любых двух векторов, т.е. если $|a'\rangle = \hat{U}|a\rangle$ и $|b'\rangle = \hat{U}|b\rangle$, то $\langle a|b\rangle = \langle a'|b'\rangle$.

Упражнение А.81. Покажите, что:

- унитарный оператор отображает любой ортонормальный базис $\{|w_i\rangle\}$ на ортонормальный базис;
- верно обратное утверждение: для любых двух ортонормальных базисов $\{|v_i\rangle\}$, $\{|w_i\rangle\}$ оператор $\hat{U} = \sum_i |v_i\rangle\langle w_i|$ унитарен (иными словами, любой оператор, который отображает один ортонормальный базис на другой ортонормальный базис, является унитарным).

Упражнение А.82. Покажите, что оператор $\hat{U}$ унитарен в том и только том случае, если $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{1}$ (т.е. для него сопряженный оператор равен обратному).

Упражнение А.83. Покажите следующее.

- Любой унитарный оператор может быть приведен к диагональному виду, а все его собственные значения имеют абсолютную величину 1, т.е. их можно записать в виде $e^{i\theta}$, где $\theta \in \mathbb{R}$. См. комментарий к сноске на стр. 355

Подсказка: воспользуйтесь упр. А.63.

- Любой диагоналируемый оператор (т.е. такой оператор, матрица которого становится диагональной в некотором базисе) с собственными значениями, равными по абсолютной величине 1, является унитарным.

Упражнение А.84. Покажите, что следующие операторы унитарны:

- операторы Паули (1.7);
- поворот на угол ϕ в линейном пространстве двумерных геометрических векторов над $\mathbb{R}$.

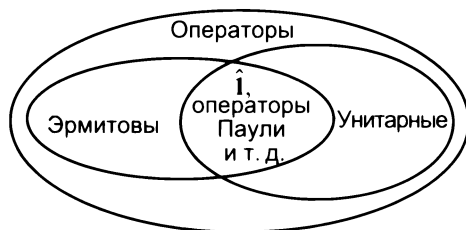


Рис. А.1. Соотношения между типами операторов

Семейства эрмитовых и унитарных операторов частично перекрываются, но не идентичны (рис. А.1). Оператор, который является одновременно эрмитовым и унитарным, должен быть обратен самому себе, как показано в упр. А.82. Такие операторы встречаются относительно редко.

А.11. Функции операторов

Концепция функции оператора имеет множество приложений в линейной алгебре и дифференциальных уравнениях. Она удобна также в квантовой механике, поскольку позволяет легко рассчитывать операторы эволюции.

Определение А.25. Рассмотрим комплексную функцию $f(x)$, определенную на $\mathbb{C}$. *Функцией* $f(\hat{A})$ диагонализированного оператора $\hat{A}$ называется следующий оператор:

$$f(\hat{A}) = \sum_i f(a_i) |a_i\rangle \langle a_i|, \quad (\text{А.49})$$

где $\{|a_i\rangle\}$ есть ортонормальный базис, в котором $\hat{A}$ принимает диагональный вид:

$$\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle \langle a_i|. \quad (\text{А.50})$$

Упражнение А.85. Покажите, что если вектор $|a\rangle$ есть собственный вектор эрмитова оператора $\hat{A}$ с собственным значением a , то $f(\hat{A})|a\rangle = f(a)|a\rangle$.

Упражнение А.86. Предположим, оператор $\hat{A}$ эрмитов и функция $f(x)$, примененная к любому действительному аргументу x , принимает действительное значение. Покажите, что $f(\hat{A})$ — тоже эрмитов оператор.

Упражнение А.87. Предположим, оператор $\hat{A}$ эрмитов, и функция $f(x)$, примененная к любому действительному аргументу x , принимает действительное неотрицательное значение. Покажите, что $f(\hat{A})$ — неотрицательный оператор (см. определение А.22).

Упражнение А.88. Найдите матрицы $\sqrt{\hat{A}}$ и $\ln \hat{A}$ в ортонормальном базисе, в котором

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

Упражнение А.89. Найдите матрицу $e^{i\theta\hat{A}}$, где $\hat{A} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$.

Подсказка: одно из собственных значений $\hat{A}$ равно 0, а это означает, что соответствующий собственный вектор не появляется в спектральном разложении (А.50) оператора $\hat{A}$. Однако экспонента соответствующего собственного значения не равна нулю, и соответствующие собственные векторы все же фигурируют в операторной функции (А.49).

Упражнение А.90. Покажите, что для любого оператора $\hat{A}$ и функции f выполняется $[\hat{A}, f(\hat{A})] = 0$.

Упражнение А.91. Предположим, $f(x)$ имеет разложение в ряд Тейлора $f(x) = f_0 + f_1x + f_2x^2 + \dots$. Покажите, что $f(\hat{A}) = f_0\hat{1} + f_1\hat{A} + f_2\hat{A}^2 + \dots$

Упражнение А.92. Покажите, что если оператор $\hat{A}$ эрмитов, то оператор $e^{i\hat{A}}$ унитарен и $e^{i\hat{A}} = (e^{-i\hat{A}})^{\dagger}$.

Упражнение А.93*. Пусть $\vec{s} = (s_x, s_y, s_z)$ есть единичный вектор (т.е. вектор длины 1). Покажите, что

$$e^{i\theta\vec{s}\cdot\hat{\sigma}} = \cos\theta\hat{1} + i\sin\theta\vec{s}\cdot\hat{\sigma}, \quad (\text{А.51})$$

где $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$, $\vec{s}\cdot\hat{\sigma} = s_x\hat{\sigma}_x + s_y\hat{\sigma}_y + s_z\hat{\sigma}_z$.

Подсказка: находить решения для собственных векторов оператора $\vec{s}\cdot\hat{\sigma}$ в явном виде нет необходимости.

Упражнение А.94[§]. Найдите матрицы операторов $e^{i\theta\hat{\sigma}_x}$, $e^{i\theta\hat{\sigma}_y}$, $e^{i\theta\hat{\sigma}_z}$ в каноническом базисе.

Ответ:

$$e^{i\theta\hat{\sigma}_x} = \begin{pmatrix} \cos\theta & i\sin\theta \\ i\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix};$$

$$e^{i\theta\hat{\sigma}_y} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix};$$

$$e^{i\theta\hat{\sigma}_z} = \begin{pmatrix} e^{i\theta} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{pmatrix}.$$

Определение А.26. Предположим, вектор $|\psi(t)\rangle$ зависит от некоторого параметра t . Производная $|\psi(t)\rangle$ относительно t определяется как вектор

$$\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\psi(t + \Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\Delta t}. \quad (\text{A.52})$$

Аналогичным образом производная оператора $\hat{Y}(t)$ относительно t есть оператор

$$\frac{d\hat{Y}}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\hat{Y}(t + \Delta t) - \hat{Y}(t)}{\Delta t}. \quad (\text{A.53})$$

Упражнение А.95. Предположим, матричный вид вектора $|\psi(t)\rangle$ в некотором базисе таков:

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \vdots \\ \psi_N(t) \end{pmatrix}.$$

Покажите, что

$$\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \begin{pmatrix} d\psi_1(t)/dt \\ \vdots \\ d\psi_N(t)/dt \end{pmatrix}.$$

Запишите выражение для матричного вида производной оператора.

Упражнение А.96. Предположим, оператор $\hat{A}$ диагонализировать в ортонормальном базисе и не зависит от t , где t — действительный параметр. Покажите, что $\frac{d}{dt} e^{i\hat{A}t} = i\hat{A}e^{i\hat{A}t} = ie^{i\hat{A}t} \hat{A}$.

Упражнение А.97*. Для двух операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ предположим, что

$$[\hat{A}, \hat{B}] = c\hat{1},$$

где c — комплексное число. Докажите формулу Бейкера — Хаусдорфа — Кэмпбелла¹

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-c/2} = e^{\hat{B}}e^{\hat{A}}e^{c/2} \quad (\text{A.54})$$

с использованием следующих шагов:

а) Покажите, что

$$[\hat{A}, e^{\hat{B}}] = ce^{\hat{B}}. \quad (\text{A.55})$$

Подсказка: используйте разложение в ряд Тейлора для экспоненты и (А.46).

б) Для произвольного числа λ и оператора $\hat{G}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}$ покажите, что

$$\frac{d\hat{G}(\lambda)}{d\lambda} = \hat{G}(\lambda)(\hat{A} + \hat{B} + \lambda c). \quad (\text{A.56})$$

с) Решите дифференциальное уравнение (А.56) и покажите, что

$$\hat{G}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A} + \lambda\hat{B} + \lambda^2 c/2}. \quad (\text{A.57})$$

д) Докажите формулу Бейкера — Хаусдорфа — Кэмпбелла, используя (А.57).

¹ Это упрощенный вид формулы Бейкера — Хаусдорфа — Кэмпбелла. Полный вид этой формулы более сложен и выполняется в том числе для случая, когда $[\hat{A}, \hat{B}]$ не коммутирует с $\hat{A}$ или $\hat{B}$.

ВЕРОЯТНОСТИ И РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Б.1. Математическое ожидание и дисперсия

Определение Б.1. Предположим, что эксперимент (необязательно квантовый) по измерению величины Q может дать любой из N возможных результатов $\{Q_i\}$ ($1 \leq i \leq N$) с соответствующими вероятностями pr_i . Тогда Q называют *случайной величиной*, а множество величин $\{\text{pr}_i\}$ для всех значений i называют *распределением вероятности*. *Математическое ожидание (матожидание, или среднее значение) Q* равно

$$\langle Q \rangle = \sum_{i=1}^N \text{pr}_i Q_i . \tag{Б.1}$$

Упражнение Б.1. Найдите матожидание числа очков, которые выпадут на верхней грани игральной кости.

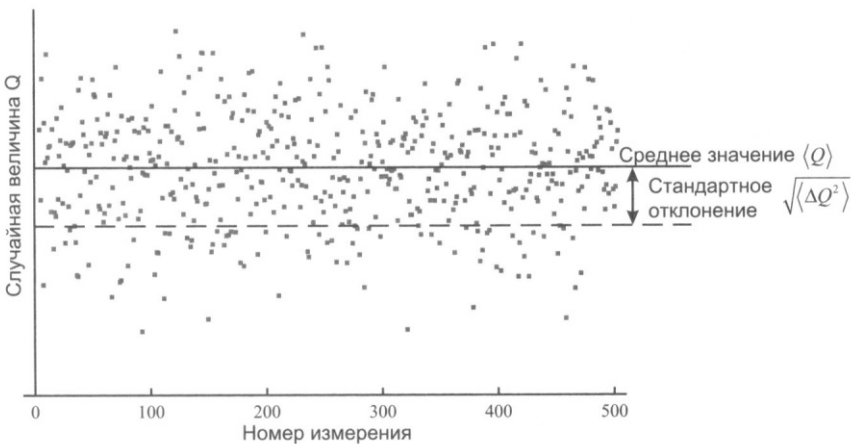


Рис. Б.1. Среднее значение и среднеквадратичное стандартное отклонение случайной величины

Определение Б.2. Среднеквадратическая дисперсия случайной величины Q равна

$$\langle \Delta Q^2 \rangle = \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \sum_i \text{pr}_i (Q - \langle Q \rangle)^2. \quad (\text{Б.2})$$

Среднеквадратичное стандартное отклонение, или неопределенность, величины Q равно $\sqrt{\langle \Delta Q^2 \rangle}$.

Если математическое ожидание $\langle Q \rangle = \sum_{i=1}^N \text{pr}_i Q_i$ показывает средний результат измерения, то статистическая неопределенность демонстрирует, на сколько в среднем результат конкретного измерения будет отличаться от математического ожидания (рис. Б.1).

Упражнение Б.2. Покажите, что для любой случайной величины Q

$$\langle \Delta Q^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2. \quad (\text{Б.3})$$

Упражнение Б.3. Вычислите среднеквадратичное отклонение числа очков, которые выпадут на верхней грани игральной кости. Покажите в явном виде, что уравнения (Б.2) и (Б.3) дают один и тот же результат.

Упражнение Б.4. Две случайные переменные Q и R независимы, т. е. реализация одной из них не влияет на распределение вероятности другой (к примеру, кость и монета, бросаемые вместе). Покажите, что $\langle QR \rangle = \langle Q \rangle \langle R \rangle$. Верно ли это утверждение, если Q и R не являются независимыми?

Подсказка: независимость означает, что вероятность одновременного наступления событий Q_i и R_j равна $\text{pr}_i^Q \text{pr}_j^R$ для каждой пары (i, j) , где pr_i^Q есть вероятность i -го значения переменной Q , а pr_j^R — вероятность j -го значения R .

Упражнение Б.5. Предположим, что случайная переменная Q измеряется (к примеру, кидается кость) N раз. Рассмотрим случайную переменную $\tilde{Q}$, которая представляет собой сумму N результатов. Покажите, что математическое ожидание и дисперсия $\tilde{Q}$ равны $\langle \tilde{Q} \rangle = N \langle Q \rangle$ и $\langle \Delta \tilde{Q}^2 \rangle = N \langle \Delta Q^2 \rangle$ соответственно.

Б.2. Условные вероятности

Условная вероятность $\text{pr}_{A|B}$ есть вероятность некоторого события A при условии, что другое событие B точно произошло. Примеры:

- вероятность того, что число, выпавшее на кости, нечетное, если известно, что оно больше трех;
- вероятность того, что тест на ВИЧ у Алисы окажется положительным, при условии, что на самом деле она не инфицирована;
- вероятность того, что Боб играет в баскетбол, если известно, что он мужчина ростом 185 см;
- вероятность того, что завтра будет дождь, если известно, что сегодня дождь шел.

Вычислим условную вероятность в третьем примере. Событие A : «Боб играет в баскетбол». Событие B : «Боб — мужчина ростом 185 см». Условная вероятность в этом случае равна числу $N(A \& B)$ мужчин ростом 185 см, играющих в баскетбол, деленному на число $N(B)$ мужчин такого роста (рис. Б.2 а).

$$\text{pr}_{A/B} = \frac{N(A \& B)}{N(B)}. \quad (\text{Б.4})$$

Разделим числитель и знаменатель приведенной дроби на N — полное количество людей. Тогда в числителе мы будем иметь $N(A \& B)/N = \text{pr}_{A \& B}$ — вероятность того, что случайно выбранный человек окажется мужчиной ростом 185 см, играющим в баскетбол, а в знаменателе $N(B)/N = \text{pr}_B$ — вероятность того, что случайный человек окажется мужчиной ростом 185 см. Отсюда

$$\text{pr}_{A/B} = \frac{\text{pr}_{A \& B}}{\text{pr}_B}. \quad (\text{Б.5})$$

Это общая формула вычисления условных вероятностей.

Упражнение Б.6. Предположим, что события $B_1, \dots, B_n$ несовместимы и коллективно исчерпывающи, т.е. одно из них должно произойти, но никакие два не могут произойти одновременно (рис. Б.2 б). Покажите, что для любого другого события A

$$\text{pr}_A = \sum_{i=1}^n \text{pr}_{A/B_i} \text{pr}_{B_i}. \quad (\text{Б.6})$$

Этот результат известен как *теорема полной вероятности*.

Упражнение Б.7. Вероятность того, что конкретный ВИЧ-тест даст ложный положительный результат, равна

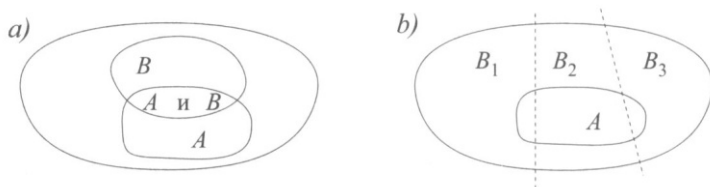


Рис. Б.2. Условные вероятности: *a* — соотношение между условной и совместной вероятностями (Б.5); *b* — теорема полной вероятности (Б.6)

$$\text{pr}_{\text{полож.}|\text{неинф.}} = 0,05.$$

Вероятность ложного отрицательного результата равна нулю. Известно также, что из всех людей, сдающих этот анализ, доля действительно инфицированных составляет $\text{pr}_{\text{инф.}} = 0,001$.

- Какова вероятность $\text{pr}_{\text{полож.}\&\text{неинф.}}$ того, что случайный человек, сдающий такой анализ, не инфицирован, но *при этом* получает ложный положительный результат?
- Какова вероятность $\text{pr}_{\text{полож.}}$ того, что случайный человек, сдающий такой анализ, получит положительный результат?
- Был выбран случайный человек — Алиса, и она прошла этот тест. Ее результат оказался положительным. Какова вероятность того, что Алиса не инфицирована?

Подсказка: чтобы сделать задачу более наглядной, представьте себе город с населением в миллион человек. Сколько среди них инфицированных? Сколько неинфицированных? Сколько всего будет получено положительных результатов?

Б.3. Биномиальное распределение и распределение Пуассона

Упражнение Б.8. Монету бросают n раз. Найдите вероятность того, что орел выпадет k раз, а решка $n - k$ раз:

- для обычной монеты, т. е. если вероятность выпадения орла или решки при одиночном броске равна $1/2$;
- для *несимметричной* монеты с вероятностями выпадения орла и решки, равными p и $1 - p$ соответственно

Ответ:

$$\text{pr}_k = \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k}. \quad (\text{Б.7})$$

Распределение вероятности, определяемое (Б.7), называется *биномиальным* распределением. Мы постоянно встречаем его в повседневной жизни, часто не осознавая этого. Вот несколько примеров.

Упражнение Б.9^s.

- В какой-то конкретный день в некоем городе родилось 20 детей. Какова вероятность того, что ровно девять из них — девочки?
- Некий студент при тестировании дает правильные ответы в среднем на $3/4$ вопросов. Какова вероятность того, что он правильно ответит на все 10 вопросов теста?
- Некий политик пользуется поддержкой 60% избирателей. Какова вероятность того, что он наберет больше 50% на участке для голосования со 100 избирателями?

Упражнение Б.10. Найдите матожидание и дисперсию биномиального распределения (Б.7).

Ответ:

$$\langle k \rangle = np; \quad \langle \Delta k^2 \rangle = np(1-p). \quad (\text{Б.8})$$

Упражнение Б.11. В некотором большом городе рождается в среднем по 10 детей в день. Какова вероятность того, что в данный конкретный день родится 12 детей?

- Если население города составляет 100 000 человек.
- Если население города составляет 1 000 000 человек.

Подсказка: возможно, существует способ обойтись без вычисления $1\,000\,000!$

Из приведенного упражнения мы видим, что в случае, когда $p \rightarrow 0$ и $n \rightarrow \infty$, но, при этом $np = \text{const}$, вероятности в биномиальном распределении становятся зависимыми скорее от $\lambda = np$, чем от p и n по отдельности. Это важное обобщение биномиального распределения известно как *распределение Пуассона*.

Упражнение Б.12. Покажите, что в пределе при $p \rightarrow 0$ и $n \rightarrow \infty$, но $\lambda = np = \text{const}$, биномиальное распределение (Б.7) принимает вид

$$pr_k = e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!}, \quad (\text{Б.9})$$

при помощи следующих шагов.

- Покажите, что $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^k} \binom{n}{k} = \frac{1}{k!}$.

- б) Покажите, что $\lim_{n \rightarrow \infty} (1-p)^{n-k} = e^{-\lambda}$.
 в) Получите уравнение (Б.9).

Упражнение Б.13. Найдите ответ для упр. Б.11 в пределе для бесконечно большого города.

Вот еще несколько примеров распределения Пуассона.

Упражнение Б.14^s

- а) Патрульный полицейский, дежуривший ночью на шоссе, подсчитал, что в среднем мимо него проезжает 60 машин в час. Какова вероятность того, что за конкретную минуту мимо этого полицейского проедет ровно одна машина?
 б) Детектор космических лучей регистрирует в среднем 500 событий в секунду. Какова вероятность того, что число зарегистрированных им событий за конкретную секунду будет равно как раз 500?
 в) Среднее число львов, которых видят охотники на однодневном сафари, равно трем. Какова вероятность того, что вы, поехав на такое сафари, не увидите ни одного льва?

Упражнение Б.15. Покажите, что и среднее значение, и дисперсия распределения Пуассона (Б.9) равны λ .

К примеру, в некоем городе в среднем рождается по 25 детей в день, так что $\lambda = 25$. Среднеквадратичное отклонение в этом случае $\sqrt{\lambda} = 5$, т. е. в обычный день мы с гораздо большей вероятностью увидим 20 или 30 новорожденных, нежели 10 или 40 (рис. Б.3).

Хотя абсолютная неопределенность $\sqrt{\lambda}$ значения n увеличивается с ростом $\langle n \rangle$, относительная неопределенность $\sqrt{\lambda}/\lambda$ снижается. В приведенном выше примере относительная неопределенность составляет $5/25 = 20\%$. Но в городке поменьше, где $\langle n \rangle = 4$, относительная неопределенность составит целых $2/4 = 50\%$.

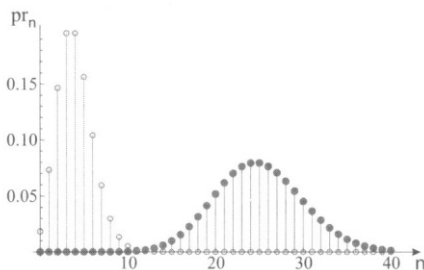


Рис. Б.3. Распределение Пуассона при $\langle n \rangle = 4$ (пустые кружочки) и $\langle n \rangle = 25$ (сплошные кружочки)

Б.4. Плотности вероятности

До сих пор мы изучали случайные переменные, которые могут принимать значения из некоторого дискретного множества, причем вероятность каждого значения конечна. Но что если мы имеем дело с *непрерывной* случайной переменной — к примеру, скоростью ветра, временем распада ядра радиоактивного атома или дальностью полета тела? В таких случаях не существует способа определить конечную величину вероятности для каждого конкретного значения Q . Вероятность того, что ядро атома распадется *точно* через 2 мс или скорость ветра составит *точно* 5 м/с, бесконечно мала.

Однако вероятность того, что Q лежит в некотором диапазоне значений — скажем, что ядро атома распадется в промежутке от 2 мс до 2,01 мс, — конечна. Поэтому мы можем *дискретизировать* непрерывную переменную: разделить диапазон значений, которые принимает Q , на равные интервалы шириной δQ . Затем становится возможным определить дискретную случайную переменную $\tilde{Q}$ с возможными значениями $\tilde{Q}_i$, соответствующими центральным точкам каждого интервала, и связанную с ней конечную вероятность $\text{pr}_{\tilde{Q}_i}$ того, что Q попадет в пределы этого интервала [рис. Б.4 а, б]. Как и для любого другого распределения вероятности, $\sum_i \text{pr}_{\tilde{Q}_i} = 1$. Разумеется, чем меньший интервал мы выберем, тем точнее опишем поведение непрерывной случайной переменной.

Можно ожидать, что значения вероятности, связанные с соседними интервалами, будут близки друг к другу, если интервалы мы выбрали достаточно маленькие. Для атомного распада, к примеру, мы можем записать $\text{pr}_{[2,00 \text{ мс}, 2,01 \text{ мс}]} \approx \text{pr}_{[2,01 \text{ мс}, 2,02 \text{ мс}]} \approx 1/2 \text{ pr}_{[2,00 \text{ мс}, 2,02 \text{ мс}]}$. Иными словами, для малых значений интервала величина $\text{pr}_{\tilde{Q}_i} / \delta Q$ не зависит от δQ . Следовательно, мы можем ввести понятие *плотности вероятности*, или *непрерывного распределения вероятности*¹:

$$\text{pr}(Q) = \lim_{\delta Q \rightarrow 0} \frac{\text{pr}_{\tilde{Q}_i(Q)}}{\delta Q}, \quad (\text{Б.10})$$

где $i(Q)$ есть номер интервала, в пределах которого локализована величина Q , а предел берется по множеству дискретизированных рас-

¹ На протяжении всей книги я использую нижние индексы для обозначения дискретных вероятностей, таких как pr_i или $\text{pr}_{\tilde{Q}_i}$, и скобки для обозначения непрерывных плотностей вероятности, к примеру $\text{pr}(Q)$.

пределений вероятности для Q . Эта плотность вероятности — основная характеристика непрерывных случайных величин.

Обратите также внимание, что поскольку дискретная вероятность $\text{pr}_{\tilde{Q}_i(Q)}$ — величина безразмерная, то размерность непрерывной плотности вероятности $\text{pr}(Q)$ всегда обратна размерности соответствующей случайной переменной Q .

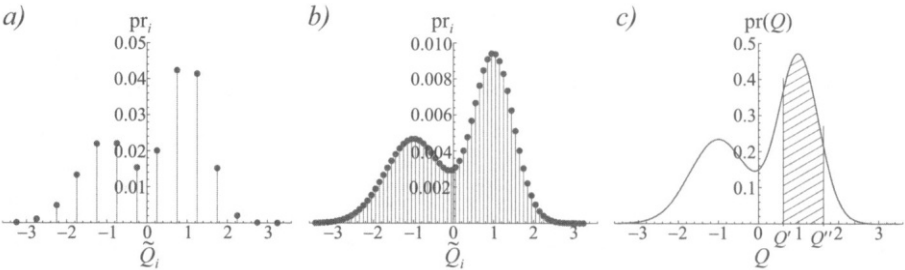


Рис. Б.4. Непрерывное распределение вероятности: a, b — дискретизация непрерывной случайной переменной с шириной интервала $\delta Q = 0,5$ и $0,1$ соответственно; c — непрерывная плотность вероятности. Вероятность наблюдения переменной в диапазоне между Q' и Q'' равна $\int_{Q'}^{Q''} \text{pr}(Q)dQ$. Обратите внимание на различия вертикальных масштабов трех графиков.

Упражнение Б.16. Для непрерывной случайной переменной с плотностью вероятности $\text{pr}(Q)$ покажите, что:

- а) вероятность наблюдения переменной в диапазоне между Q' и Q'' равна

$$\text{pr}_{[Q', Q'']} = \int_{Q'}^{Q''} \text{pr}(Q)dQ ; \tag{Б.11}$$

- б) функция плотности вероятности *нормирована*:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \text{pr}(Q)dQ = 1 ; \tag{Б.12}$$

- с) математическое ожидание Q задается формулой

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} Q \text{pr}(Q)dQ ; \tag{Б.13}$$

- д) [§] дисперсия Q задается формулой

$$\langle \Delta Q^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (Q - \langle Q \rangle)^2 \text{pr}(Q)dQ = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2 . \tag{Б.14}$$

Упражнение Б.17. Найдите плотность вероятности, матожидание и среднеквадратичное отклонение для времени распада радиоактивного ядра с периодом полураспада $\tau = 1$ мс.

Плотность вероятности в природе часто имеет *гауссово*, или *нормальное*, распределение:

$$G_b(x) = \frac{1}{b\sqrt{\pi}} e^{-x^2/b^2}, \quad (\text{Б.15})$$

где b есть его *ширина* (рис. Б.5). Как правило, гауссово распределение управляет физическими величинами, находящимися под воздействием множественных небольших случайных эффектов, которые суммируются¹. Например:

- положение частицы, участвующей в броуновском движении;
- время на часах, подверженных влиянию случайных флуктуаций температуры в комнате;
- компонент скорости газовой молекулы вдоль какой-то определенной оси.

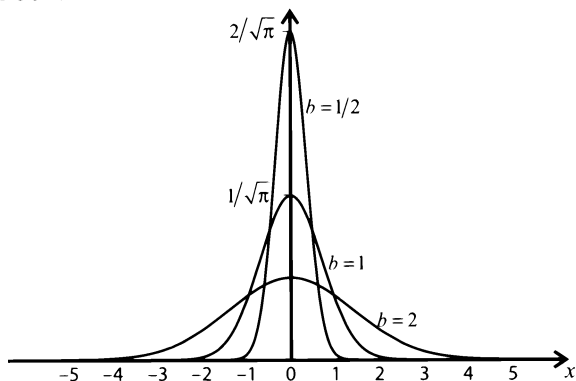


Рис. Б.5. Нормированные гауссовы функции различной ширины

Упражнение Б.18. Для гауссова распределения $G_b(x - a)$ покажите следующее:

- а) Распределение нормировано, т. е.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G_b(x) dx = 1. \quad (\text{Б.16})$$

¹ Строгая формулировка этого утверждения называется центральной предельной теоремой.

Замечу, что (Б.17) выполняется также для комплексного b , при условии что $\text{Re}(b) > 0$.

б) Среднее значение равно $\langle x \rangle = a$.

с) Дисперсия равна $\langle \Delta x^2 \rangle = b^2/2$.

Подсказка: используйте

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/b^2} dx = b\sqrt{\pi}; \quad (\text{Б.17})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/b^2} dx = \frac{b^3 \sqrt{\pi}}{2}. \quad (\text{Б.18})$$

ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ ОПТИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

В.1. Поляризация света

Рассмотрим классическую плоскую электромагнитную волну, распространяющуюся вдоль (горизонтальной) оси z с угловой частотой ω и волновым числом $k = \omega/c$, где c — скорость света. Эта электромагнитная волна является поперечной, так что вектор ее электрического поля лежит в плоскости x - y :

$$\vec{E}(z, t) = A_H \hat{i} \cos(kz - \omega t + \varphi_H) + A_V \hat{j} \cos(kz - \omega t + \varphi_V), \quad (\text{В.1})$$

или в комплексном виде

$$\vec{E}(z, t) = \text{Re} \left[\left(A_H e^{i\varphi_H} \hat{i} + A_V e^{i\varphi_V} \hat{j} \right) e^{ikz - i\omega t} \right]. \quad (\text{В.2})$$

Здесь $\hat{i}$ и $\hat{j}$ — единичные векторы вдоль осей x и y соответственно; A_H и A_V — действительные амплитуды x - и y -компонентов (которые мы будем называть *горизонтальным* и *вертикальным*), а φ_H и φ_V — их фазы.

Упражнение В.1[§]. Покажите, что уравнения (В.1) и (В.2) эквивалентны.

Интенсивность света в каждой поляризации пропорциональна

$$I_H \propto A_H^2; \quad (\text{В.3a})$$

$$I_V \propto A_V^2. \quad (\text{В.3b})$$

Полная интенсивность волны есть сумма двух ее компонентов:
 $I_{\text{полн.}} \propto A_H^2 + A_V^2.$

Исследуем поведение вектора электрического поля в некоторой конкретной точке в пространстве, скажем, $z = 0$. Если два компонента поля различаются по фазе, $\vec{E}(z, t)$ будет менять направление в зависимости от времени, как показано на рис. В.1. Чтобы лучше разобраться в этом интересном явлении, попробуйте выполнить следующее упражнение.

Упражнение В.2. Постройте график зависимости горизонтального и вертикального компонентов вектора $\vec{E}(0, t)$ от времени в интервале $0 \leq \omega t \leq 2\pi$ для следующих случаев:

- $A_H = 1 \text{ В/м}, A_V = 0, \varphi_H = \varphi_V = 0$;
- $A_H = 5 \text{ В/м}, A_V = -3 \text{ В/м}, \varphi_H = \varphi_V = 0$;
- $A_H = 5 \text{ В/м}, A_V = -3 \text{ В/м}, \varphi_H = \pi/2, \varphi_V = 0$;
- $A_H = 5 \text{ В/м}, A_V = -3 \text{ В/м}, \varphi_H = \pi/4, \varphi_V = -\pi/4$;
- $A_H = 5 \text{ В/м}, A_V = -3 \text{ В/м}, \varphi_H = 0, \varphi_V = \pi/6$.

В каждом из приведенных случаев постройте траекторию точки (E_x, E_y) для постоянной z как функцию времени.

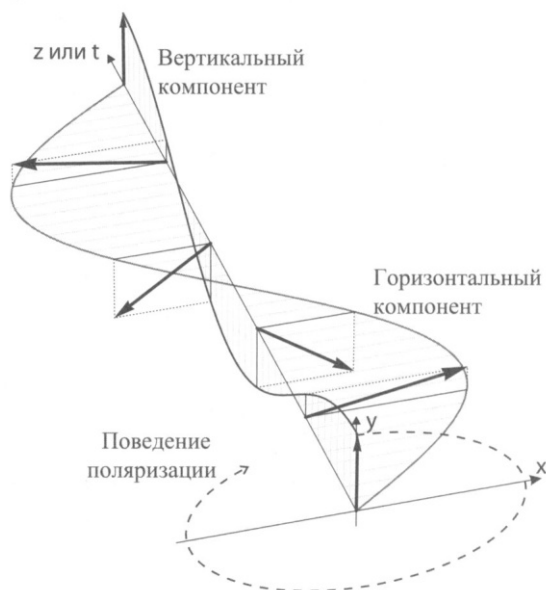


Рис. В.1. Поведение поляризации плоской волны. Если вертикальный и горизонтальный компоненты вектора электрического поля колеблются с разными фазами, направление этого вектора (показанное жирными стрелками) не остается постоянным в пространстве и времени. Траектория конца этого вектора определяет картину поляризации.

Траектория вектора поля определяет так называемое *состояние поляризации (поляризационную картину)* света. Поляризационное состояние — один из основных параметров электромагнитной волны; оно определяет, как это поле интерферирует с другими волнами или взаимодействует с веществом. Важно, что поляризационная картина сохраняется при распространении волны в пространстве и времени, за исключением некоторых материалов, о которых мы поговорим чуть позже.

Упражнение В.3. Покажите, что поляризационная картина плоской волны одинакова для всех значений z .

Переформулируем это утверждение в более общем виде: добавление произвольного сдвига в обе фазы φ_H и φ_V не меняет поляризационную картину. Можно сказать, что эта характеристика зависит не от отдельных фаз двух компонентов волны, но от их разницы $\varphi_H - \varphi_V$ (см. в качестве примера упр. В.2, с, d). Данное свойство поляризационного состояния классической волны имеет прямой аналог в квантовом мире: применение общего фазового сдвига к квантовому состоянию не изменяет его физические свойства (более подробное обсуждение этого см. в разд. 1.3).

В общем случае поляризационная картина является эллиптической; однако, как мы видели выше, существуют особые случаи, когда эллипс схлопывается в отрезок прямой или раздувается в окружность. Рассмотрим эти случаи повнимательнее.

Упражнение В.4. Покажите следующее:

- Поляризационная картина линейна в том и только том случае, когда $\varphi_H = \varphi_V + m\pi$, где m — целое число, или $A_H = 0$, или $A_V = 0$. Угол θ вектора поля по отношению к оси x задается соотношением $\tan\theta = A_V/A_H$.
- Поляризационная картина имеет круговой вид в том и только том случае, когда $\varphi_H = \varphi_V + \frac{\pi}{2} + m\pi$, где m — целое число, а $A_H = \pm A_V$.

Важные особые случаи линейной поляризации — горизонтальная поляризация ($A_V = 0$), вертикальная ($A_H = 0$) и под углом $\pm 45^\circ$ ($A_V = \pm A_H$). В круговой поляризации можно различить два случая в соответствии со спиральностью волны: правая и левая.

- Для правой круговой поляризации $A_V = A_H$ и $\varphi_V = \varphi_H + \frac{\pi}{2} + 2\pi m$ или $A_V = -A_H$ и $\varphi_V = \varphi_H - \frac{\pi}{2} + 2\pi m$, где m — целое число.

- Для левой круговой поляризации $A_V = A_H$ и $\varphi_V = \varphi_H - \frac{\pi}{2} + 2\pi m$ или $A_V = -A_H$ и $\varphi_V = \varphi_H + \frac{\pi}{2} + 2\pi m$, где m — целое число¹.

Упражнение В.5*. Покажите, что в случае, если ни одно из условий упр. В.4 не выполняется, конец вектора электрического поля движется по эллипсу.

В.2. Поляризующий светоделитель

Поляризующий светоделитель (PBS, polarizing beam splitter) (рис. В.2) — важный инструмент для анализа оптической поляризации. Он представляет собой прозрачный куб, состоящий из двух треугольных призм, склеенных между собой, и сконструированный так, чтобы пропускать горизонтально поляризованный свет, но отражать вертикально поляризованный под прямым углом. Если на такой расщепитель пучка подается классическая волна (В.2), то интенсивности пропущенной и отраженной волн будут пропорциональны A_H^2 и A_V^2 соответственно.

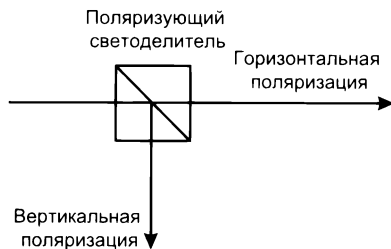


Рис. В.2. Поляризующий светоделитель

¹ Определение того, какая из круговых поляризационных схем должна называться «левой», а какая «правой», — вопрос соглашения. Здесь мы следуем соглашению, принятому в квантовой оптике. В право-циркулярной схеме конец вектора электрического поля вращается по часовой стрелке, если смотреть «сзади» относительно волны (от источника). Однако вращение происходит против часовой стрелки, если смотреть «спереди», или в плоскости x - y с традиционной ориентацией осей. В пространстве эта траектория имеет вид левого винта.

В.3. Волновые пластинки

Иногда возникает необходимость изменить состояние поляризации света, не разделяя вертикальный и горизонтальный компоненты пространственно. Обычно это делается при помощи оптического инструмента, известного как *волновая пластинка*. Действие волновой пластинки основано на *двойном лучепреломлении* — оптическом свойстве, которое демонстрируют некоторые материалы, в первую очередь — кристаллы, к примеру, кварца или кальцита. Двупреломляющие кристаллы обладают анизотропной структурой, такой что световая волна, проходящая через них, меняет свою поляризационную картину, если только она не поляризована линейно вдоль одного из двух направлений: либо вдоль, либо перпендикулярно *оптической оси* кристалла. Традиционно эти направления называют *необыкновенным* (*e*) и *обыкновенным* (*o*) соответственно.

Двупреломляющий материал имеет разные коэффициенты преломления для этих двух видов поляризации. Следовательно, после прохождения через кристалл обыкновенные и необыкновенные волны приобретают разные фазы: $\Delta\phi_o$ и $\Delta\phi_e$ соответственно. Поскольку общий фазовый сдвиг не оказывает влияния на состояние поляризации, интерес представляет лишь разность этих величин $\delta\phi = \Delta\phi_e - \Delta\phi_o$.

Упражнение В.6. Показатели преломления для волн, поляризованных параллельно и перпендикулярно оптической оси, равны соответственно n_e и n_o ; длина кристалла L ; длина волны в вакууме λ . Найти $\delta\phi$.

Волновая пластинка представляет собой двулучепреломляющий кристалл определенной длины, такой что $\delta\phi$ известно точно. Серийно выпускаются два вида волновых пластинок: $\lambda/2$ (полуволновая) пластинка с $\delta\phi = \pi$ и $\lambda/4$ (четвертьволновая) пластинка с $\delta\phi = \pi/2$ (half/quarter wave plate).

Если картина поляризации не является строго обыкновенной или необыкновенной, при распространении через двулучепреломляющий кристалл она изменится. Чтобы определить это изменение, волну раскладывают на необыкновенный и обыкновенный компоненты. Сдвиг фазы каждого компонента известен. Зная новые фазы обоих компонентов, мы можем объединить их, чтобы найти новую картину поляризации.

Упражнение В.7. Для каждого состояния поляризации из упр. В.2 постройте поляризационную характеристику, которую волна приобретет при прохождении сквозь: а) полуволновую пластинку; б) четвертьволновую пластинку с оптической осью, ориентированной вертикально.

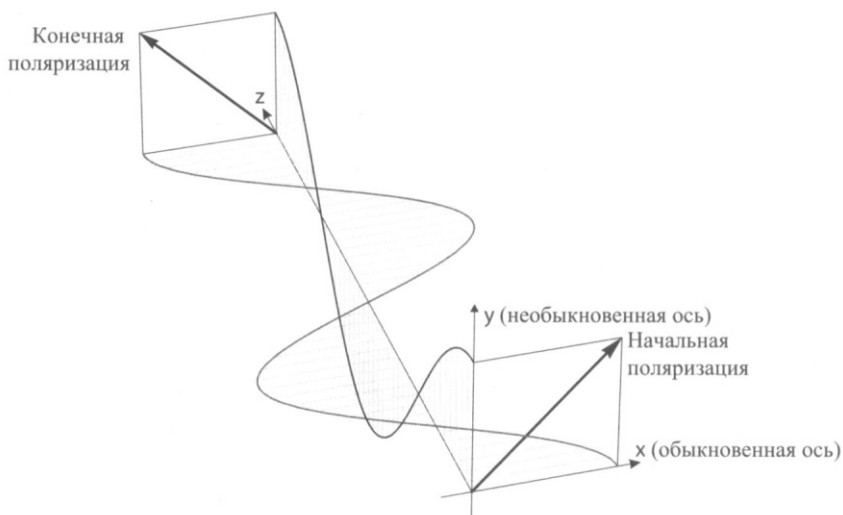


Рис. В.3. Действие полуволновой пластинки с вертикально ориентированной оптической осью. Из-за разных коэффициентов преломления материала для обыкновенной и необыкновенной поляризаций длина оптических путей обыкновенной и необыкновенной волн получается разной, в результате чего ось поляризации поворачивается.

Выполняя эти упражнения, вы, должно быть, заметили, что полуволновая пластинка «переворачивает» поляризационную картину вокруг вертикальной (или горизонтальной) оси, подобно зеркалу. Это неудивительно: сдвиг фазы вертикального компонента на π эквивалентен умножению A_v на -1 . Разумеется, такое отражающее свойство проявляется не только для вертикально ориентированной оптической оси, но для оси *любой* ориентации, что делает полуволновую пластинку универсальным инструментом поворота поляризации электромагнитного поля. Например, световая волна, линейно поляризованная под углом θ к горизонтали, после прохождения сквозь полуволновую пластинку с оптической осью, ориентированной под углом α к горизонтали, превратится в волну, линейно поляризованную под углом $2\alpha - \theta$ (рис. В.4).

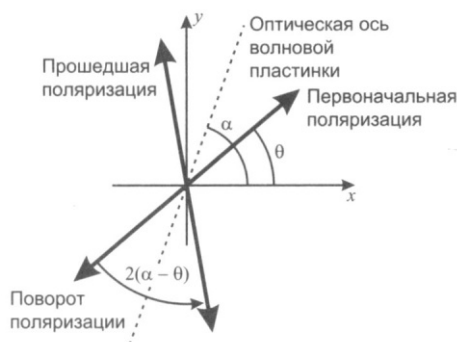


Рис. В.4. Поворот поляризации при помощи полуволновой пластинки

Упражнение В.8^с. Покажите, что полуволновая пластинка с оптической осью, ориентированной под углом $22,5^\circ$ к горизонтали, преобразует горизонтальную поляризацию в поляризацию под 45° и обратно, а вертикальную поляризацию — в поляризацию под -45° и обратно.

Полный набор возможных трансформаций поляризационной картины не ограничивается поворотами. К примеру, полуволновая пластинка не может перевести линейную поляризацию в круговую/эллиптическую, и наоборот. Для решения этой задачи нам потребуется четвертьволновая пластинка.

Упражнение В.9. Покажите, что четвертьволновая пластинка с оптической осью, ориентированной вертикально или горизонтально, переводит круговую поляризацию в линейную под углом $\pm 45^\circ$, и наоборот.

Упражнение В.10. Свет, линейно поляризованный под углом θ к горизонтали, проходит через четвертьволновую пластинку с вертикально ориентированной оптической осью. Найдите угол наклона большой полуоси к горизонтали и отношение малой и большой полуосей в выходной эллиптической поляризационной картине.

Упражнение В.11*. Предположим, у нас есть источник горизонтально поляризованного света. Покажите, что при помощи одной полуволновой и одной четвертьволновой пластинок можно получить свет с любой поляризационной характеристикой.

Подсказка: с этой задачей проще справиться, воспользовавшись геометрическими соображениями, в первую очередь результатом упр. В.5, а не формальной алгеброй.

Упражнение В.12.* Линейно поляризованный свет проходит сначала через полуволновую пластинку, потом через четвертьволновую под углом 45° к горизонтали, а затем через поляризующий светоделиитель. Покажите, что интенсивность прошедшего света не зависит от угла ориентации полуволновой пластинки.

ДЕЛЬТА-ФУНКЦИЯ ДИРАКА И ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

Г.1. Дельта-функция Дирака

Дельта-функцию можно представить себе как функцию Гаусса (Б.15) бесконечно малой ширины b (рис. Б.5):

$$G_b(x) = \frac{1}{b\sqrt{\pi}} e^{-x^2/b^2} \rightarrow \delta(x) \text{ при } b \rightarrow 0. \quad (\text{Г.1})$$

Дельта-функция используется в математике и физике для описания распределений плотности бесконечно малых (*сингулярных*) объектов. Скажем, зависящая от координаты плотность одномерной частицы массой m , расположенной в точке $x = a$, может быть записана как $m\delta(x - a)$. Подобным образом плотность вероятности непрерывной «случайной переменной», которая принимает конкретное значение $x = a$, равна $\delta(x - a)$. В квантовой механике мы используем $\delta(x)$, к примеру, для записи волновой функции частицы, координата которой точно определена.

Понятие функции в математике относится к отображению, которое ставит число x в соответствие другому числу $f(x)$. Следовательно, дельта-функцию нельзя считать функцией в традиционном смысле: она отображает все $x \neq 0$ на 0, но $x = 0$ — на бесконечность, которая не является числом. Она принадлежит к классу так называемых *обобщенных функций*. Строгую математическую теорию обобщенных функций можно найти в большинстве учебников математической физики. Здесь мы поговорим только о тех свойствах дельта-функции, которые полезны для физиков.

Упражнение Г.1. Покажите, что для любой гладкой¹ ограниченной функции $f(x)$

¹ Гладкой называется функция, имеющая производные всех конечных порядков.

$$\lim_{b \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} G_b(x) f(x) dx = f(0). \quad (\Gamma.2)$$

Из уравнений (Г.1) и (Г.2) для любой гладкой функции $f(x)$ получаем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0). \quad (\Gamma.3)$$

Это свойство чрезвычайно важно, поскольку позволяет производить с дельта-функцией осмысленные вычисления, несмотря на ее сингулярную природу. Хотя дельта-функция не имеет численного значения во всей своей области определения, у интеграла произведения дельта-функции и любой другой функции, конечной в окрестности точки $x=0$, оно есть. Мы можем записать дельта-функцию вне интеграла, но должны всегда помнить, что в процессе преобразований она в итоге станет частью интеграла и тогда даст численное значение — к примеру, предсказание экспериментального результата.

Фактически уравнение (Г.3) можно рассматривать как строгое математическое определение дельта-функции. Пользуясь этим определением, мы можем получить другие ее базовые свойства.

Упражнение Г.2. Покажите, что:

$$\text{a) } \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1; \quad (\Gamma.4)$$

б) для любой функции $f(x)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) f(x) dx = f(a); \quad (\Gamma.5)$$

с) для любого действительного числа a

$$\delta(ax) = \delta(x)/|a|. \quad (\Gamma.6)$$

Упражнение Г.3. Для ступенчатой функции Хевисайда

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x < 0 \\ 1, & \text{если } x \geq 0 \end{cases} \quad (\Gamma.7)$$

покажите, что

$$\frac{d}{dx} \theta(x) = \delta(x). \quad (\Gamma.8)$$

Подсказка: используйте уравнение (Г.3).

Упражнение Г.4. Покажите, что для любого $c < 0$ и $d > 0$

$$\int_c^d \delta(x) dx = 1. \quad (\text{Г.9})$$

Г.2. Преобразование Фурье

Определение Г.1. Результатом преобразования Фурье $\tilde{f}(k) \equiv \mathcal{F}[f](k)$ функции $f(x)$ называется функция параметра k , определенная следующим образом¹:

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} f(x) dx. \quad (\text{Г.10})$$

Это важное интегральное преобразование, используемое во всех областях физики. Рассмотрим, к примеру, оптическую волну, излучаемую множеством оптических источников разных частот. Волна, излучаемая конкретным источником частоты ω , имеет вид $f(\omega) e^{-i\omega t}$, где $f(\omega)$ — комплексная амплитуда этого источника. А суммарный сигнал от всех источников равен $\int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$, т.е. Фурье-образу функции $f(\omega)$ — частотного спектра набора источников. Плотность энергии спектра — функция $|f(\omega)|^2$ — может быть измерена экспериментально при помощи оптического элемента с дисперсией, такого как призма.

Упражнение Г.5. Покажите, что, если $\tilde{f}(k) = \mathcal{F}[f(x)]$ существует, то:

а) $\tilde{f}(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx;$ (Г.11)

б) при действительном $f(x)$ имеем $\tilde{f}(-k) = \tilde{f}^*(k);$

в) при $a \neq 0$

$$\mathcal{F}[f(ax)] = \frac{1}{|a|} \tilde{f}(k/a); \quad (\text{Г.12})$$

д) $\mathcal{F}[f(x-a)] = e^{-ika} \tilde{f}(k);$ (Г.13)

е) $\mathcal{F}[e^{i\xi x} f(x)] = \tilde{f}(k-\xi);$ (Г.14)

ф) при условии, что $f(x)$ — гладкая функция, стремящаяся к нулю при $\pm\infty$,

¹ Не существует общепринятой договоренности ни о том, где ставить минус в показателе комплексной экспоненты — в уравнении (Г.10) или (Г.21), ни о том, как распределить между ними множитель $1/2\pi$. Для этой книги я выбрал договоренность по своему собственному вкусу.

$$\mathcal{F}[df(x)/dx] = ik\tilde{f}(k). \quad (\text{Г.15})$$

Упражнение Г.6. Покажите, что Фурье-образ гауссовой функции тоже является гауссовой функцией:

$$\mathbf{F}\left[e^{-x^2/b^2}\right] = \frac{b}{\sqrt{2}} e^{-k^2 b^2/4}. \quad (\text{Г.16})$$

Уравнение (Г.12) нам показывает, что масштабирование аргумента x некоторой функции приводит к обратному масштабированию аргумента k ее Фурье-образа. В частности (упр. Г.6), сигнал с гауссовым спектром ширины b есть гауссов импульс ширины $2/b$, поэтому произведение двух ширин представляет собой константу. Это проявление *частотно-временной неопределенности*, которая действует в широком спектре волновых явлений в классической физике. Мало того — как мы видим в подразд. 3.3.2, это одна из возможных интерпретаций принципа неопределенности Гейзенберга в приложении к координате и импульсу.

А теперь рассмотрим два экстремальных случая преобразования Фурье гауссовых функций.

Упражнение Г.7. Покажите, что:

а) в пределе при $b \rightarrow 0$ выражение (Г.16) принимает вид

$$\mathcal{F}[\delta(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}; \quad (\text{Г.17})$$

б) в противоположном пределе, при $b \rightarrow \infty$, получается

$$\mathcal{F}[1] = \sqrt{2\pi} \delta(k). \quad (\text{Г.18})$$

Если спектр содержит только нулевую частоту, то сигнал не зависит от времени, что неудивительно. Если же сигнал представляет собой мгновенную «вспышку», происходящую в момент времени $t = 0$, он будет содержать все частоты; его спектр — константа. Из этого наблюдения есть одно интересное следствие.

Упражнение Г.8. Покажите, что при $a \neq 0$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iakx} dx = 2\pi\delta(k)/|a|. \quad (\text{Г.19})$$

Этот результат очень важен для многих вычислений с использованием преобразования Фурье. В его полезности мы скоро убедимся.

Упражнение Г.9. Считая a и b действительными и положительными, найдите Фурье-образы следующих функций:

a) $\delta(x+a) + \delta(x-a)$;

b) $\cos(ax+b)$;

c) $e^{-ax^2} \cos bx$;

d) $e^{-a(x+b)^2} + e^{-a(x-b)^2}$;

e) $\theta(x) e^{-ax}$, где $\theta(x)$ — функция Хевисайда;

f) прямоугольной функции $\begin{cases} 0 & \text{при } x < -a \text{ или } x > a \\ A & \text{при } -a \leq x \leq a \end{cases}$.

Преобразование Фурье обратимо: для любого зависящего от времени импульса можно вычислить его частотный спектр, для которого данный импульс является Фурье-образом. Примечательно, что преобразование Фурье очень похоже на обратное ему преобразование. Намек на этот факт можно увидеть, к примеру, в (Г.13) и (Г.14). Сдвиг аргумента $f(x)$ ведет к умножению $\tilde{f}(k)$ на комплексную фазу. Если же мы домножаем $f(x)$ на комплексную фазу, аргумент $\tilde{f}(k)$ сдвигается.

Определение Г.2. Обратным преобразованием Фурье $\mathcal{F}^{-1}[g](x)$ функции $g(k)$ называется функция аргумента x , такая что

$$\mathcal{F}^{-1}[g](x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} g(k) dk. \quad (\text{Г.21})$$

Отступление Г.1. Интерпретируем (Г.8)

Результат (Г.8), на первый взгляд, говорит нам, что интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx$ равен нулю при $k \neq 0$. Это противоречит традиционному интегральному исчислению, согласно которому интеграл конечной осциллирующей функции e^{ikx} должен расходиться при любом k . Чтобы разобраться с этим кажущимся противоречием, мы должны вспомнить, что (Г.19) верно только как обобщенная функция — т.е. как часть интеграла (Г.3). И в самом деле, если подставить (Г.19) в (Г.3), получится сходящийся интеграл.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx \right] f(k) dk = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} f(k) dk \right] dx = \sqrt{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{F}[f](-k) dk \stackrel{(\text{Г.11})}{=} 2\pi f(0). \quad (\text{Г.20})$$

Следовательно, хотя численного значения интеграла (Г.19) для любого конкретного k не существует, он имеет смысл как обобщенная функция k .

Упражнение Г.10. Покажите, что $\mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[f]](x) = f(x)$. (Г.22)

Упражнение Г.11. Покажите, что

$$\mathcal{F}^{-1}[f(x)](k) = \mathcal{F}[f(x)](-k) = \mathcal{F}[f(-x)](k). \quad (\text{Г.23})$$

Упражнение Г.12^s. Выведите аналоги правил, приведенных в упр. Г.5, для обратного преобразования Фурье.

Ответ: обозначив $\check{g}(x) = \mathcal{F}^{-1}[g(k)]$, получим:

$$\text{a) } \check{g}(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) dk; \quad (\text{Г.24})$$

$$\text{b) для действительного } g(k) \text{ имеем } \check{g}(x) = \check{g}^*(-x);$$

$$\text{c) } \mathcal{F}^{-1}[g(ak)](x) = \frac{1}{|a|} \check{g}(k/a); \quad (\text{Г.25})$$

$$\text{d) } \mathcal{F}^{-1}[g(k-a)](x) = e^{ixa} \check{g}(k); \quad (\text{Г.26})$$

$$\text{e) } \mathcal{F}^{-1}[e^{i\xi k} g(k)](x) = \check{g}(x + \xi); \quad (\text{Г.27})$$

$$\text{f) } \mathcal{F}^{-1}[dg(k)/dk] = -ix\check{g}(x). \quad (\text{Г.28})$$

ОБ АВТОРЕ

АЛЕКСАНДР ЛЬВОВСКИЙ (45) — физик-экспериментатор в области квантовых оптических технологий. Родился и вырос в Москве, учился в 91-й и 57-й школах, окончил Московский физико-технический институт и Колумбийский университет в Нью-Йорке, где получил в 1998 году степень доктора философии. После этого провел год в Калифорнийском университете в Беркли в качестве постдока, а затем пять лет в Университете Констанца в Германии: сначала в качестве стипендиата имени Александра фон Гумбольдта, а затем руководителя группы в рамках гранта имени Эмми Нётер Немецкого научного общества.

В 2004 году стал профессором факультета физики и астрономии в Университете Калгари, а с осени 2018 года является профессором в Оксфордском университете в Великобритании, параллельно с 2013 года руководит лабораторией в Российском квантовом центре.

Александр Львовский — пожизненный член Американского физического общества, почетный член (fellow) Американского оптического общества и лауреат ряда наград, в частности Международной премии по квантовым коммуникациям, гранта Alberta Ingenuity и личной грамоты от премьер-министра Канады. О его работах рассказывали многие СМИ, такие как CBC, *Daily Mail*, *MIT Technology Review*, NBC, *New Scientist*, *Wired*, ТАСС, Первый канал, телеканалы «Россия» и «Культура».

ПРЕДМЕТНО-ИМЕННОЙ УКАЗАТЕЛЬ

А

адиабатическая теорема 124
амплитуда 362
Ангстрём, Андерс Йонас 277
ансамбль 45, 103, 302, 313
Аспе, Ален 113
атомные часы 307

Б

базис 361
 канонический 36
 ортонормальный 365
Бальмер, Иоганн Якоб 277
Бейкера — Хаусдорфа — Кэмпбелла
 формула 388
Белла
 измерение 140
 неравенство 107–111
 состояния 86
Блоха
 вектор 284
 релаксация 333
 смешанного состояния 328
 сфера 283–286
«Бог не играет в кости» 42, 121
Боголюбова преобразование 233
Больцман, Людвиг 281, 332
Бом, Дэвид 105
Бора
 магнетон 289
 модель атома водорода 274
 радиус 272
Бор, Нильс 118, 162, 274
бомбы парадокс 50
Борна правило 42, 129, 315
Борн, Макс 42, 124
бозоны 207, 269
Бугера — Ламберта — Бера закон 56,
 144

В

вентиль
 C-NOT 136
 C-Phase 137
 Адамара 136

взаимодействие снимает вырождение
 186
Вигнер, Юджин 120, 212
Вигнера друг 120
внешнее произведение операторов
 373–376
водорода атом 270–283
 Бора модель 274
 радиальные волновые функции
 272
 энергетический спектр 273
волновое число 164, 399
волновой пакет 172
волновые пластинки 403–406
 операторы 60
вакуумное состояние (гармонический
 осциллятор) 204
волновая функция 155
 атома водорода 270–273
 когерентного состояния 211
 непрерывность 177
 состояний Фока 205
вращающийся базис 295
вторичное квантование 187
вырождения степень 262

Г

гармонический осциллятор 198–215
Гаусса распределение 397
 Фурье-образ 410
гауссов волновой пакет 167, 191, 195
 расплывание 173
Гейзенберг, Вернер 69, 169, 215
Гейзенберга
 представление 215–227
 принцип неопределенности 69–71
 уравнение 217
гильбертово пространство 365
 оснащенное 155
 постулат 31
 радиальное и угловое 252
гиромагнитное отношение 286
главное квантовое число 273
Глаубер, Рой 210
гомодинный детектор 209, 238

Грэма — Шмидта процедура 367
Гринбергера — Хорна — Цайлингера
нелокальность 114–118
групповая скорость 174

Д

двусоставные состояния 84
двухуровневая система 61, 294
де Бройля волна 160
трехмерная 248
де Бройль, Луи 162, 274
декогеренция 121–125, 175, 328, 330
предпочтительный базис 123
дельта-функция 407
потенциал в виде 184–185
Фурье-образ 410
детектор фотонов, см. фотонный
детектор
детерминизм 42
дефазирование, см. также
декогеренция
неоднородное 302
однородное 330–333
продольное и поперечное
Дирака
дельта-функция, см. дельта-
функция
нотация 359
Дирак, Поль 255, 293
дисперсия
квантового наблюдаемого 67
случайной величины 389
длина вектора, см. норма

З

запутанность 83–246
«Заткнись и считай» 12, 121, 134

И

измерения
для непрерывных наблюдаемых 158
квантовая природа 118–134
локальные 93–104
на операторе плотности 324–328
наблюдаемого 64
обобщенные 337–343
постулат об 38–47
проективные 42
фон Неймана 118–121
интенсивность 399

К

квант 206
квантование 179
первичное и вторичное 187
квантовые
бит 38, 134
измерения, см. измерения
клонирование 90
компьютер 134–139
криптография 51–59
нелокальность 104–118
основные кинетические уравнения
321
повторитель 144–148
процесс 345
тензор 349
сверхплотное кодирование 92
телепортация 139–144
томография
детектора 351–352
процесса 345–351
состояния 46, 343–345
число
главное 273
магнитное 262
орбитальное 262
спиновое 269

Клаузер, Джон 113
когерентность 51, 94, 103, 122, 317, 330
коллапс 42, 99, 118
коммутатор 69, 382
компонент момента импульса 254,
260
координаты и импульса 166
Комптон, Артур 35, 162
координата и импульс
масштабирование 200
преобразование между базисами 163
копенгагенская интерпретация 13, 118
корпускулярно-волновой дуализм 49,
160
Коши — Бунаковского неравенство 367
криптография
квантовая 51–59
классическая 52
кубит 38, 134

Л

Лайман, Теодор 277
Ландау, Лев Давидович 21, 314

Лармора частота 286
 Леви — Чивиты символ 254, 383

линейные

независимость 361

оператор 369–376

пространство 359

локальности принцип 105

локальные

измерение 93, 100–102

оператор (в пространстве
 тензорного произведения)
 91–93

реализм 105

скрытые переменные 106

М

магнитные

квантовое число 262

резонанс 293–307, 330–337

мазер аммиачный 185

математическое ожидание

квантового наблюдаемого 67

случайной величины 389

матричный вид

вектора 362

оператора 371–373

смена базиса 375

сопряженного оператора 377

Менделеев, Дмитрий Иванович 279

многомировая интерпретация 127

момент импульса

дифференциальная форма

в декартовых координатах 255

в сферических координатах 257

коммутационные соотношения

255, 260

матричный вид 263

определение 254

собственные значения и

собственные состояния 259–272

Н

наблюдаемое 64–71

Наймарка теорема 343

насыщение двухуровневой системы
 299

нелокальность 104–118

неравенство треугольника 367

неоднородное уширение 302

непрерывные наблюдаемые 153

несовместимые состояния 32

Нётер, Эмми 256

норма 364

несвязанное состояние 187–198

нулевые колебания 205

О

обмен запутанностью 143

оболочка электронная 281

обратимость во времени 74, 328, 336

объявленный фотон 62, 209

одnofотонная интерференция 47–51

оператор

Адамара 63, 136

внешнее произведение 373–376

диагонализация, см. оператор,

спектральное разложение

единичный 370

разложение по ортонормиро-
 ванному базису 375

линейный 369–371

локальный 91–93

матрица 371–373

смена базиса 375

повышения и понижения (момент
 импульса) 260

проекционный 63, 324

произведение 370

производная 387

сжатия 231–237

смещения 222–224, 227

сопряженный 377

спектральное разложение 65, 379

тензорное произведение 89–91

рождения и уничтожения 199–202

эволюции 74

эрмитов 377

фазового сдвига 229–231

функция оператора 385–388

числа квантов 203

тождества, см. оператор,

единичный

унитарный 74, 385

оптический стол 44

орбитальное квантовое число 262

ортогональные состояния/векторы
 364

основное состояние 281

основные кинетические уравнения 321

остов 361

- П**
 параметрическое рассеяние 48, 62, 87, 113, 209, 238
 Паули
 исключения принцип 269, 281
 операторы (матрицы) 62, 65, 91, 117, 141, 377
 Паули, Вольфганг 62, 269, 274
 Пашен, Фридрих 277
 первичное квантование 187
 перемасштабированные координата и импульс 200
 периодическая система элементов 279–283
 Планка постоянная 35
 плотности оператор/матрица 313
 диагональные и недиагональные элементы 316–320
 приведенный 325
 плотность
 вероятности, см. распределение вероятностей, непрерывное потока вероятности 191
 площадь импульса 301
 повышающие и понижающие операторы (момент импульса) 260
 подпространство 259, 363, 381
 полевое уширение 299
 поляризационные
 картина (классическое состояние) 401
 состояние фотона 34–38
 постселекция 102
 постулат
 о гильбертовом пространстве 31
 об измерениях 41
 потенциал свободного пространства 170–175
 потенциальные
 барьер 193
 ступенька 187–192
 яма 179
 в виде дельта-функции 184
 приближение вращающейся волны 295
 причинность 95, 100, 104
 принцип
 локальности 105
 минимума энергии 280
 неопределенности Гейзенберга 69–71
 для координаты и импульса 166–168
 соответствия 30, 68
 проекции оператор 63, 324
 прорехи в тестах нелокальности 112
 приведенная масса 275
 Пуассона распределение 61, 214, 393
- Р**
 радиальное уравнение 258
 для атома водорода 271
 Раби частота 296
 разложение оператора тождества 375
 размерность (линейного пространства) 362
 Рамзея спектроскопия 305
 распывание волнового пакета 173
 распределение вероятностей 389
 биномиальное 393
 непрерывное 395–398
 квантовое 158
 Пуассона 61, 214, 393
 реальность (парадокс ЭПР) 105
 Резерфорд, Эрнест 274
 резонанс 198, 294, 299
 релаксация 303, 330
 продольная и поперечная 334
 Ридберга
 атомы 278
 постоянная 276
 формула 276
 рождения оператор 199
- С**
 сверхплотное кодирование 92
 сверхсветовая связь 94, 196
 светоделитель
 неполяризующий 47
 поляризующий (PBS) 39, 402
 связанное состояние 179–187
 сжатие
 двумодовое 233
 одномодовое 231
 сила 217, 290
 скалярное произведение 363–365
 в пространстве тензорных произведений 84

частичное 95–99
 скрытые параметры 106
 случайная величина 389
 непрерывная 395
 смешанное состояние 102–104, 313–316
 смещения оператор 222–224, 227
 след 322–325
 частичный 325–328
 собственные базис, значения, векторы 65, 379
 сопряженный
 вектор 90, 367
 оператор 376
 пространство 90, 367
 соответствия принцип 30, 68
 состояние
 вакуумное (гармонический осциллятор) 204
 запутанное 85
 когерентное 210–215, 227–229
 эволюция 214
 волновая функция 211
 ненормированное 63
 несвязанное 187–198
 основное 281
 разделимое 85
 связанное 179–187
 сжатое 231
 смешанное 102–104, 313–316
 стационарное 73
 суперпозиции 33
 Фока 202–210
 чистое 315
 спад свободной индукции 302
 спектральная теорема 65, 379
 специальная теория относительности 30, 94, 162
 спиновое
 квантовое число 269
 эхо 303, 335
 среднее значение, см. математическое ожидание
 стационарное
 состояние 73
 уравнение Шрёдингера 175–179
 статистический ансамбль, см. ансамбль
 степень вырождения 262
 суперпозиция 33

Т

Таунс, Чарльз 185
 телепортация 139–144
 тензорное произведение
 оператор 89–91
 пространство 83–93
 теорема
 о запрете клонирования 90
 полной вероятности 391
 термализация 303
 томография, см. квантовая томография
 Томсон, Дж. Дж. 274
 трансцендентное уравнение 180
 туннелирование 193–198
 туфли 94, 106

У

Уайнленд, Дэвид 113
 уравнение Шрёдингера, см. Шрёдингера уравнение
 удаленное приготовление состояния 93–95
 унитарный оператор, см. оператор, унитарный
 уничтожения оператор 199
 уровни энергии 179
 условная вероятность 390–392

Ф

фаза
 квантовая 38, 51, 72, 124, 138, 192, 322, 330
 когерентная 210, 229
 оптическая 47, 60, 399–406
 фазовые
 глобальный множитель 38, 43, 212
 пространство 199
 сдвига оператор 229–231
 скорость 174
 Фабри — Перо эталон 50, 61, 198
 Фейнман, Ричард 121
 фермионы 207, 269
 Фок, Владимир Александрович 121, 204
 Фока состояния 204
 фон Неймана измерение 118–121
 фотон 35, 206
 фотонный детектор
 квантовая эффективность 41, 58, 339

ЛЬВОВСКИЙ Александр

ОТЛИЧНАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Учебное пособие

Руководитель проекта *А. Тарасова*
Корректоры *Е. Аксёнова, М. Миловидова*
Компьютерная верстка *А. Фоминов*
Дизайн обложки *Ю. Буга*

Иллюстрации на обложке Shutterstock.com

Подписано в печать 10.07.2019. Формат 60×90/16.
Бумага офсетная № 1. Печать офсетная.
Объем 26,5 печ. л. Тираж 1500 экз. Заказ № 7190.

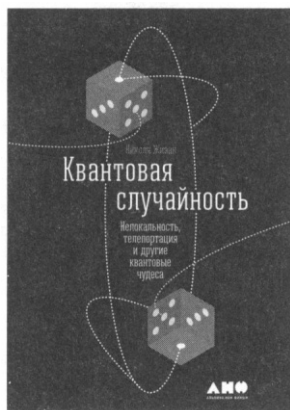
ООО «Альпина нон-фикшн»
123007, г. Москва, ул. 4-я Магистральная, д. 5,
строение 1, офис 13
Тел. +7 (495) 980-5354
www.nonfiction.ru

Отпечатано в АО «Первая образцовая типография»,
филиал «УЛЬЯНОВСКИЙ ДОМ ПЕЧАТИ»
432980, г. Ульяновск, ул. Гончарова, 14

Знак информационной продукции
(Федеральный закон № 436-ФЗ от 29.12.2010 г.)

0+

«АЛЬПИНА НОН-ФИКШН» РЕКОМЕНДУЕТ



Квантовая случайность Нелокальность, телепортация и другие квантовые чудеса

Николя Жизан, пер. с фр., 3-е изд., 2019, 202 с.

Если вы попытаетесь поговорить с физиком о квантовых законах, очень быстро настанет момент, когда он откажется говорить и начнет писать формулы. Квантовые явления настолько противоречат нашим представлениям о реальности, что их крайне сложно даже вообразить, не говоря уже о том, чтобы описать их словами.

Швейцарский физик Николя Жизан, один из тех, кто исследует этот странный мир, предпринял попытку рассказать о квантовых странностях простым языком. В результате появилась эта книга, где в увлекательной и образной форме объясняется суть основных квантовых феноменов. Оказывается, что квантовый мир позволяет отвечать и на философские вопросы, такие как «Существует ли свобода воли?».

Руслан Юнусов, генеральный директор Российского квантового центра

О чем книга

Играет ли Бог в кости? И во что играют физики? Николя Жизан, автор прорывного женеvского эксперимента по передаче квантовой запутанности фотонных пар по оптоволокну, излагает свои взгляды на фундаментальные вопросы квантовой физики через призму игры Белла — воображаемого эксперимента, в котором рассматривается теоретическая возможность сверхсветовой передачи информации с использованием запутанных частиц. Реальные эксперименты с ними доказали нелокальную природу мира — вопреки интуитивному желанию ученых, события в удаленных точках Вселенной могут непосредственно зависеть друг от друга.

Истинная природа этих явлений и вытекающие из них следствия в последнее время стали горячей темой физики. По мнению автора, вторая квантовая революция, начавшаяся в последнем десятилетии XX века, позволит построить новый, непротиворечивый и плодотворный взгляд на мир.

Кто автор

Николя Жизан — специалист в области квантовой информации, квантовой коммуникации, квантовой механики. В 1995 году провел эксперимент, в котором зашифрованный квантовый сигнал был передан на расстояние 23 км по обычному оптоволоконному кабелю, что принято считать началом эры квантовой коммуникации. Несколькими годами позже первым продемонстрировал квантовую телепортацию на большой дистанции. Научные достижения Николя Жизана отмечены множеством наград и премий.

«АЛЬПИНА НОН-ФИКШН» РЕКОМЕНДУЕТ



Квантовые вычисления со времен Демокрита

Скотт Ааронсон, пер. с англ., 2018, 494 с.

Уникальность данной книги заключается в том, что Ааронсон рассматривает квантовую механику не с точки зрения раздела физики, как мы привыкли, а как теорию вероятностей и информации. При этом в книге поднимается философский вопрос о пределах познаваемого. И на все эти сложные темы автор рассуждает с юмором, живо и увлекательно.

«Квантовые вычисления...» — книга для читателей с разным уровнем научной подготовки, то есть почти для всех, кто хоть сколько-то знаком с физикой и математикой. Однако главы, в которых автор демонстрирует необходимый для раскрытия

темы математический аппарат, могут напугать неподготовленного читателя и заставить отложить ее на дальнюю полку. Но ведь только самые пытливые и упорные умы способны постичь удивительную красоту и противоречивость законов, по которым живет квантовый мир.

Руслан Юнусов, генеральный директор Российского квантового центра

О чем книга

Написанная известным теоретиком в области квантовых вычислений Скоттом Ааронсоном, эта книга проведет вас через поразительное разнообразие тем, исследуя самые глубокие идеи математики, информатики и физики — от теории множеств, вычислительной сложности, квантовых вычислений до интерпретации квантовой механики. Кроме того, вы познакомитесь с дискуссиями относительно путешествий во времени, парадокса Ньюкома, антропного принципа и взглядов британского физика и математика Роджера Пенроуза.

Почему книга достойна прочтения

Неформальный стиль Ааронсона делает эту поразительную книгу доступной для читателей с научной подготовкой, а также для студентов и исследователей, работающих в области физики, информатики, математики и философии.

Кто автор

Скотт Ааронсон изучал информатику в Корнеллском университете, в 2004 году получил степень PhD в Калифорнийском университете в Беркли. Постдокторальный период провел в Школе математики Института перспективных исследований (Принстон) и Университете Ватерлоо (Канада, Онтарио). В 2007–2016 годах преподавал в Массачусетском технологическом институте, с середины 2016-го — профессор отделения компьютерных наук Техасского университета в Остине, директор Центра квантовой информации. Специалист в области квантовых вычислений и теории сложности вычислений.

«Отличная квантовая механика» — уникальное учебное пособие в двух частях, предлагающее глубинное обсуждение таких концепций, как гильбертово пространство, квантовое измерение, запутанность и декогеренция, наряду с традиционным материалом, охватываемым курсом квантовой механики (состояния, операторы, уравнение Шрёдингера, атом водорода). Эти концепции имеют решающее значение для понимания квантовой физики и ее связи с макроскопическим миром, но редко рассматриваются в учебниках начального уровня.

В книге применяется математически простая физическая система — поляризация фотонов — в качестве инструмента визуализации, что позволяет читателю увидеть запутанную красоту квантового мира с самых первых страниц. Формальные концепции квантовой физики проиллюстрированы примерами из современных экспериментальных исследований, таких как квантовые компьютеры, коммуникации, телепортация и нелокальность.

Александр Львовский — профессор Оксфордского университета, экспериментатор с мировым именем в области квантовой оптики и квантовой информатики — применяет сократовскую педагогику: подготовленному читателю предлагается самостоятельно разработать аппарат квантовой физики путем последовательного решения тщательно составленных задач. Подробные решения представлены во второй части книги.

ISBN 978-5-91671-952-9



9 785916 719529

Думай по-своему

АНФ

АЛЬПИНА НОН-ФИКШН

заказ книг +7 (495) 120-07-04
и на сайте www.nonfiction.ru



РКЦ

Российский
Квантовый
Центр