КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Лекция №1: Введение и простейшие примеры

А.Г. Семенов

I. ВВЕДЕНИЕ

Целью данного курса лекций является изучение раздела науки под название “квантовая механика”, который, в свою очередь, является основополагающей частью того, что в настоящее время называется “квантовая теория”. Сейчас существует множество экспериментальных указаний и подтверждений того, факта, что данная теория очень точно описывает окружающую нас действительность вплоть до масштабов порядка фемтометра (10^{-15} м) и меньше. Кроме этого, в настоящее время существует понимание и того, как квантовое описание физических систем на малых масштабах соотносится с классическим поведением окружающих нас макроскопических объектов, к которому мы все привыкли. Несмотря на это, “квантовую механику” нельзя считать полностью законченным разделом физики и до сих пор появляется множество работ посвященных её основаниям. К тому же, в процессе её развития очень явно проявился тот факт, что понимание того, как система устроена вовсе не означает понимание того, как она себя ведет. Причем, в этом вопросе иногда не могут помочь даже самые ультрасовременные компьютеры (в отличие, например, от классической физики, когда соответствующие уравнения могут быть решены численно с желаемой точностью). Как у любой содержательной физической науки, у “квантовой механики” есть две составляющие. Первая - это её теоретический аппарат, который позволяет строить описание различных систем. Вторая же часть устанавливает связь между абстрактными понятиями, которыми оперирует формализм с реальным физическим миром. В первой лекции мы немного окунемся в мир квантовой механики и попробуем привыкнуть к её формализму не уточняя то, почему именно так следует описывать соответствующие системы.

Абсолютно любая физическая теория первым делом отвечает на ряд принципиальным вопросов, Первым из них является вопрос о том, что описывает состояние физической системы и каково пространство состояний. В классической механике ответом будет точка в фазовом пространстве, в гидродинамике - пространственное распределение плотности и скорости движения жидкости и т.д.. Следующим вопросом, который нам следует задать является вопрос о том, как система эволюционирует с течением времени, и что задает её динамику, как, например, уравнения Стокса задают динамику вязкой Ньютоновской жидкости. После того, как на первые два вопроса получен ответ, у нас есть полная информация о том, как ведет себя замкнутая и изолированная система. Однако, это вовсе не означает что мы можем предсказывать результаты экспериментов. Для этого следует получить ответ еще на два вопроса. А именно, какие объекты соответствуют физическим наблюдаемым и как именно устроена процедура измерения, что про этом происходит с системой и что показывает измерительный прибор. И если первые два вопроса активно обсуждаются в классической физике, то важность оставшихся двух вопросов проявилась именно при создании “квантовой механики”. И для начала мы рассмотрим простейшую квантовомеханическую систему - двухуровневую систему. Иногда её называют системой со спином $\frac{1}{2}$, иногда “кубитом”, когда она является базовым элементом квантового компьютера, иногда еще как то. Существует множество физических реализаций данной системы. Итак, начнем по порядку.

II. ПРОСТРАНСТВО СОСТОЯНИЙ ДВУХУРОВНЕВОЙ СИСТЕМЫ

Пространством состояний двухуровневой системы является двухмерное комплексное Гильбертово пространство $\mathcal{H}$. Это означает, что для любых двух элементов f и g из данного пространство задано скалярное произведение, которое мы будем обозначать как $\langle f|g\rangle$ со стандартными свойствами

$$\langle f|\alpha g+\beta h\rangle=\alpha\langle f|g\rangle+\beta\langle f|h\rangle, \tag{1}$$

$$\langle g|f\rangle=\langle f|g\rangle^{*}, \tag{2}$$

$$\langle f|f\rangle\geq 0,\ \text{причем } \langle f|f\rangle=0 \text{ только при } f \text{ нулевом.} \tag{3}$$

При этом мы везде в дальнейшем будем использовать бра-кет обозначения предложенные П. Дираком. В этих обозначениях элемент Гильбертова пространства обозначается кет-вектором $|f\rangle$. Как это часто бывает, для данного пространства может быть построено сопряженное пространство $\mathcal{H}^{*}$ всех ограниченных линейных функционалов. Элементами данного пространства являются бра-вектора $\langle g|$. Согласно теореме Риса данные пространства изоморфны и потому можно определить операцию эрмитова сопряжения $|f\rangle^\dagger = \langle f|$. В данном пространстве можно ввести полный ортонормированный базис, который в силу двухмерности будет состоять из двух элементов $|1\rangle,\ |2\rangle$, причем $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$. Таким образом любой вектор в $\mathcal{H}$ может быть представлен в виде

$$|f\rangle = f_1|1\rangle + f_2|2\rangle. \tag{4}$$

Эквивалентной записью является матричная запись

$$|f\rangle = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \qquad \langle f| = \begin{pmatrix} f_1^* & f_2^* \end{pmatrix} \qquad \langle f|g\rangle = f_1^* g_1 + f_2^* g_2. \tag{5}$$

Состояния физической системы задаются лучами в Гильбертовом пространстве. Иными словами вектора $|f\rangle$ и $\lambda|f\rangle$ описывают одно и то же состояние физической системы. Поэтому в дальнейшем будем рассматривать только вектора с нормой равной $\langle f|f\rangle = 1$. Отметим, что данное условие не фиксирует состояние однозначно, остается возможность для умножения на фазовый множитель $e^{i\phi}$.

Уже в этом простом примере мы можем наблюдать все характерные черты квантовомеханических систем. Например, принцип суперпозиции. Если система может находиться в состояниях $|f\rangle$ и $|g\rangle$, то она может находиться и в бесконечном множестве их линейных суперпозиций $\alpha|f\rangle + \beta|g\rangle$. Это, в частности, является отличительной особенностью квантового бита или "кубита". Если классический бит может принимать лишь два значения - 0 и 1, то кубит моет быть в любой суперпозиции $c_1|0\rangle + c_2|1\rangle$, где $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$. Следующим этапом перейдем к описанию квантовой эволюции состояний.

III. КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ ЭВОЛЮЦИЯ СОСТОЯНИЙ

При рассмотрении классической механики, обычно, в качестве исходного принципа, определяющего динамику системы является принцип наименьшего действия, из которого выводятся уравнения движения. В квантовой механике ситуация немного иная. Даже понимание того, как устроено пространство состояний не дает нам никакой информации об эволюции системы. В этом месте необходимо совершить логический скачок, который неизбежен в любой физической теории. Давайте задумаемся, о том, какое именно динамическое поведение системы мы бы ожидали. Поскольку пространство состояний линейно, то, конечно же, данное свойство хотелось бы сохранить, и потому мы ожидаем линейной эволюции. Кроме того, давайте потребуем, чтобы любой ортонормированный базис оставался бы таковым при эволюции системы, или, иными словами, потребуем унитарной эволюции, сохраняющей скалярное произведение. Кроме того потребуем Марковость, или, иными словами, чтобы любая последующая эволюция зависела только от текущего состояния, но не от предистории. Пусть за малое время Δt исходное состояние перешло в некое новое состояние, которое связано с исходным при помощи инфинитезимального преобразования

$$|f\rangle \to (\hat{1} - i\hat{H}(t)\Delta t)|f\rangle. \tag{6}$$

Это преобразование задано оператором $\hat{H}(t)$, которое является для нас новым понятием. Это первый пример линейного оператора, который действует в Гильбертовом пространстве и которые мы будем обозначать крышечкой $\hat{.}$. Оператор действует в $\mathcal{H}$ и переводит вектор из $\mathcal{H}$ в вектор из того же пространства. По аналогии с бра-кет векторами мы можем ввести понятие эрмитова сопряжения для операторов, действующих в $\mathcal{H}$ как $\langle f|\hat{A}g\rangle = \langle \hat{A}^\dagger f|g\rangle$ со свойствами $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$, $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$, $(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger$. В будущем мы будем использовать запись $\langle f|\hat{A}g\rangle \equiv \langle f|\hat{A}|g\rangle$, согласованность которой несложно проверить. В рассматриваемом нами случае двухмерного Гильбертова пространства операторы могут быть представлены матрицами 2×2.

Итак, вернемся к эволюции. Из унитарности следует тот факт, что оператор $\hat{H}$ задающий эволюцию является эрмитовым $\hat{H}^\dagger(t) = \hat{H}(t)$. Устремляя $\Delta t \to 0$ получим уравнение

$$i\frac{\partial|f(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t)|f(t)\rangle. \tag{7}$$

Данное уравнение называется уравнением Шредингера, а оператор $\hat{H}$ называется Гамильтонианом. В зависимости от физических свойств системы он может зависеть от времени, а может и нет. Именно последний случай мы и рассмотрим на этой лекции. В силу эрмитовости существует ортонормированный базис из собственных состояний Гамильтониана $\hat{H}|e_k\rangle = E_k|e_k\rangle$, причем состояний в нашем случае ровно два. Кроме того, несложно заметить, что собственные числа E_k (которые называются энергиями соответствующих собственных состояний) действительны. Это означает, что если в момент времени $t = 0$ система была в состоянии

$$|f(0)\rangle = f_1|e_1\rangle + f_2|e_2\rangle, \tag{8}$$

то в любой последующий момент времени состояние будет иметь вид

$$|f(t)\rangle = f_1 e^{-iE_1 t}|e_1\rangle + f_2 e^{-iE_2 t}|e_2\rangle. \tag{9}$$

Этим выражением задача об эволюции системы в рассматриваемом случае полностью решена. Несмотря на это о системе мы практически ничего не знаем, поскольку до сих пор мы не определились с тем, какие объекты являются наблюдаемыми и как происходит измерение.

IV. НАБЛЮДАЕМЫЕ И ИЗМЕРЕНИЯ

Вопрос о том, что такое измерение в квантовой механике и как оно происходит является наиболее дискуссионным в настоящее время. В данной лекции мы рассмотрим наиболее простой и общепринятый взгляд на данную проблему. Наблюдаемым в квантовой механике соответствуют эрмитовы операторы $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, и одним из примеров является Гамильтониан. С каждым из таких операторов связан ортонормированный базис из собственных состояний $\hat{A}|a_k\rangle = \alpha_k|a_k\rangle$. Измерение в квантовой механике имеет вероятностный характер и предсказание может быть быть сделано лишь о вероятностях того или иного исхода. При этом, если состояние до измерения представить в виде

$$|f\rangle_{before} = c_1|a_1\rangle + c_2|a_1\rangle, \tag{10}$$

то вероятность получить в результате измерения α_1 равна $|c_1|^2$, а α_2 равна $|c_2|^2 = 1 - |c_1|^2$. Никаких иных значений кроме α_k в результате измерения получить нельзя. Однако, в процессе измерения состояние системы изменяется, причем если мы получили при измерении α_1, то после него система окажется в состоянии $|f\rangle_{after} = |a_1\rangle$, так что повторное измерение выдаст в вероятностью 1 то же самое значение. Иными словами после измерения система всегда будет находиться в одном из собственных состояний измеряемой наблюдаемой, а сам процесс измерения влияет на состояние системы. Описанная конструкция относится к одному единственному измерению. Однако мы можем приготовить много одинаковых систем и провести множество измерений. В результате мы будем получать то или иное значение. Усредняя по множеству экспериментов мы получим для среднего измеренного значения следующую величину

$$\langle \hat{A} \rangle = |c_1|^2 \alpha_1 + |c_2|^2 \alpha_2 = \langle f|\hat{A}|f\rangle. \tag{11}$$

Отметим, что очень часто сам по себе эксперимент строится таким образом, что за один этап происходит сразу множество актов измерения. Например, в ускорителе летит целый пучок состоящий из множества частиц и каждый эксперимент характеризуется огромным числом элементарных актов столкновения. На этом мы заканчиваем описание простейшей квантовомеханической системы и рассмотрим физический пример.

V. ОСЦИЛЛЯЦИИ НЕЙТРИНО

В 2015 году Нобелевская премия по физике была выдана Артуру Макдональду и Такааки Кадзита за экспериментальное наблюдение осцилляций нейтрино. Частицу нейтрино впервые ввел в физику Вольфганг Паули для того, чтобы удовлетворить закону сохранения энергии в бета-распаде (нейтрон распадается на электрон, протон, и антинейтрино). Позже выяснилось, что существуют три типа нейтрино - электронное, мюонное и тау-нейтрино. Масса покоя данных частиц очень мала, и, потому, долгое время считалось, что она равна нулю. Оказывается, что массы данных частиц не только отличны от нуля, но и различны, что означает тот факт, что энергии различных состояний также различны. Рассмотрим простейшую модель данной системы. Рассмотрим случай, когда есть всего два сорта нейтрино с массами $m_{1,2}$. которые соответствуют собственным состояниям $|\nu_{1,2}\rangle$. Поскольку масса есть энергия в системе покоя, то каждое из этих состояний эволюционирует со временем как $e^{-iE_k t}|\nu_k\rangle$, где $E_k = m_k c^2$ в системе покоя. Если нейтрино движется с импульсом p то релятивистская теория говорит о том, что $E_k = \sqrt{p^2c^2 + m_k^2 c^4}$. В результате ядерных реакций рождается электронное или мюонное нейтрино, каждое из которых представляет собой суперпозицию двух сортов нейтрино

$$|\nu_e\rangle = \cos\theta|\nu_1\rangle + \sin\theta|\nu_2\rangle \tag{12}$$

$$|\nu_\mu\rangle = -\sin\theta|\nu_1\rangle + \cos\theta|\nu_2\rangle \tag{13}$$

Именно эти состояния мы и можем измерять в эксперименте. Пусть в момент рождения $t = 0$ нейтрино было мюонным $|\nu(0)\rangle = |\nu_\mu\rangle$. Тогда в момент времени t состояние будет иметь вид

$$|\nu(t)\rangle = -\sin\theta e^{-iE_1 t}|\nu_1\rangle + \cos\theta e^{-iE_2 t}|\nu_2\rangle \tag{14}$$

Давайте вычислим вероятность, с которой мы будем в результате измерения получать мюонное нейтрино

$$P_\mu = |\langle\nu_\mu|\nu(t)\rangle|^2 = 1 - \sin^2 2\theta \sin^2\left(\frac{(E_1 - E_2)t}{2}\right) \tag{15}$$

Таким образом, за счет различия в энергиях, которое следует из различия в массах, вероятность обнаружить тот или иной сорт нейтрино осциллирует со временем и одно нейтрино превращается в другое. Это означает, что если на солнце рождается нейтрино одного сорта, то на земле нами будет наблюдено нейтрино иного сорта. В настоящее время нейтринные осцилляции наблюдались для солнечных, атмосферных и реакторных нейтрино.