Математические основы Квантовой Механики, (осень 2020).

Лекция №3

В данной лекции мы приведём систему основных постулатов квантовой механики, подробно обсудим их физическую (статистическую) интерпретацию и разберём простой пример квантовой системы.

Заметим, что система постулатов Квантовой механики вырабатывалась в течении примерно 20 лет в многочисленных дискуссиях физиков и математиков первой половины 20-го века. Предсказания квантовой механики проверены на огромном числе экспериментов, где они были подтверждены с рекордной точностью. У нас нет возможности входить в детали и подробности процесса становления Квантовой механики, поэтому нам придётся принять окончательный вариант квантово-механической схемы именно как набор постулатов и убедиться в их работоспособности и предсказательной силе.

Приведённые в предыдущих лекциях экспериментальные факты и теоретические рассуждения помогут, как мы надеемся, принять эти постулаты и освоить работу с ними.

И ещё одно замечание. Мы будем рассматривать схему операторного или канонического квантования. Это не единственный путь построения квантовой механики. Есть способ квантования, основанный на теории функционального интеграла (или интеграла по траекториям). Он важен ещё и тем, что легко обобщается на квантовую теорию поля, особенно на теорию неабелевых калибровочных полей, где операторные методы работают плохо.

Но для начинающих изучать квантовую механику операторный подход методически проще. Кроме того, его можно изложить гораздо строже с математической точки зрения, что немаловажно для слушателей-математиков. Хорошее изложение функционального подхода можно найти в книге:

Р. Фейнман, А. Хиббс, "Квантовая механика и интегралы по траекториям".

Итак, пусть есть механическая система с n степенями свободы. Перейдём к ее Гамильтонову описанию посредством канонических координат q_i и сопряжённых импульсов p_i:

$$\boxed{\begin{array}{l}\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \quad \forall 1 \le i, j \le n \\ \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}\end{array}}$$

Здесь $\{f, g\}$ – скобки Пуассона на алгебре дифференцируемых вещественных функций от q и p – наблюдаемых нашей системы:

$$\{f, g\} = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\right).$$

Фактически, в силу теоремы Вейерштрасса о приближении непрерывных функций многочленами, достаточно рассматривать полиномы от q_i и p_j, ~~как~~ канонические координаты выступают в роли образующих коммутативной алгебры наблюдаемых. Динамика системы определяется Гамильтонианом $H(p, q)$:

$$\boxed{\frac{df}{dt} = \{f, H\}}$$

для любой наблюдаемой $f(q, p)$.

Постулаты канонического квантования

I. Сопоставим алгебре наблюдаемых ~~канон~~ классической системы с каноническими координатами $\{q_i\}$ и $\{p_i\}_{1\le i\le n}$ некоммутативную алгебру над полем комплексных чисел с образующими $\hat{q}_i$ и $\hat{p}_i$, удовлетворяющими перестановочным соотношениям вида:

$$\boxed{\begin{aligned}&\hat{q}_i\hat{q}_j-\hat{q}_j\hat{q}_i=\hat{p}_i\hat{p}_j-\hat{p}_j\hat{p}_i=0\\&\hat{q}_k\hat{p}_j-\hat{p}_j\hat{q}_k=i\hbar\,\delta_{kj}\,\mathbb{1}\end{aligned}} \quad (\star)$$

Здесь $\hbar$ — постоянная Планка, $\mathbb{1}$ — единичный элемент квантовой алгебры, i — мнимая единица.

Другими словами квантовая алгебра это фактор свободной ассоциативной алгебры, порожденной элементами $\hat{q}_i$, $\hat{p}_j$ и $\mathbb{1}$, по двустороннему идеалу порожденному соотношениями $(\star)$ и соотношениями на $\mathbb{1}$:

$$\mathbb{1}\hat{q}_i=\hat{q}_i\mathbb{1}=\hat{q}_i$$

$$\mathbb{1}\hat{p}_i=\hat{p}_i\mathbb{1}=\hat{p}_i$$

$$\mathbb{1}\cdot\mathbb{1}=\mathbb{1}.$$

Соотношения (А) называются перестановочными соотношениями Гейзенберга, а линейная оболочка генераторов $\hat{q}_i$, $\hat{p}_i$ и $\mathbb{1}$ изоморфна нильпотентной алгебре Ли — алгебре Гейзенберга.

Здесь нужно сделать замечание о неоднозначности квантования. Поскольку квантовая алгебра некоммутативна то установить соответствие только между образующими $q_i \leftrightarrow \hat{q}_i$
$p_i \leftrightarrow \hat{p}_i$
совершенно недостаточно. Нужно еще сопоставить произвольной наблюдаемой $f(q,p)$ элемент из квантовой алгебры. Никакого однозначного или хотя бы предпочтительного рецепта здесь нет.

Пример: $n=1 \quad \hat{q}\hat{p}-\hat{p}\hat{q}=i\hbar\mathbb{1}$.

$$f(q,p)=q^2p \equiv pq^2 \equiv \frac{pq^2+q^2p}{2} \equiv qpq \equiv \ldots\ldots$$

$$\downarrow \qquad \downarrow \qquad \downarrow \qquad \downarrow$$

$$\underbrace{\hat{q}^2\hat{p} \qquad \hat{p}\hat{q}^2 \qquad \frac{\hat{p}\hat{q}^2+\hat{q}^2\hat{p}}{2} \qquad \hat{q}\hat{p}\hat{q}}$$

Все эти мономы и полиномы отличаются друг от друга на слагаемые $\sim \hbar$.

Какой конкретно образ данной классической наблюдаемой нужно выбирать в квантовой алгебре решает эксперимент (Соответствие предсказаний при данном выборе $\hat{f}$ и опытных данных).
Стоит отметить, что проблема упорядочения не возникает для многих важных наблюдаемых: момент импульса, импульс и координата, в большинстве моделей — гамильтониан и т.п.

II Квантовая алгебра должна быть реализована (представлена) линейными операторами в комплексном сепарабельном Гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$, причем наблюдаемым величинам классической теории (в частности q_i и p_i) должны сопоставляться <u>самосопряженные операторы</u> в $\mathcal{H}$. Это сопоставление должно давать представление канонических коммутационных соотношений Гейзенберга (*). Гильбертово пространство $\mathcal{H}$ называется <u>пространством состояний</u> квантовой системы.

III Любое <u>чистое состояние</u> системы задаётся вектором $\psi \in \mathcal{H}$ и наоборот, $\forall \psi \in \mathcal{H}$ соответствует чистое состояние. Вектора ψ, отличающиеся комплексным множителем (ненулевым) задают одно и то же состояние.

$\boxed{\text{Зам.}}$ Удобно нормировать вектор состояние на единицу $\psi \to \frac{\psi}{\|\psi\|}$. При этом сохраняется остаточный произвол в виде фазового множителя ψ и $e^{i\alpha}\psi$ – ~~эквивалентн~~ задают эквивалентные состояния.

Поскольку Гильбертово пространство $\mathcal{H}$ линейно, выполняется <u>принцип суперпозиции</u>: если $\psi_1 \in \mathcal{H}$ и $\psi_2 \in \mathcal{H}$ – 2 вектора состояния, то их любая ненулевая линейная комбинация – тоже вектор состояния.

С <u>физической точки зрения</u> любой вектор чистого состояния отвечает конкретным экспериментальным условиям, в которые помещается квантовая система.

(IV) Любые эксперименты по измерению наблюдаемой f в состоянии $\psi \in \mathcal{H}$ определяют случайную величину, которая принимает значения в спектре самосопряжённого оператора $\hat{f}$, сопоставленного наблюдаемой f. То есть, результат каждого конкретного эксперимента — число $\lambda \in$ спектру $\hat{f}$. Характеристическая функция этой случайной величины даётся выражением:

$$\underbrace{\mathbb{E}_{\psi}}_{\text{Матожидание}}(e^{i\xi \underbrace{f}_{\text{случайная величина}}}) \overset{def}{=} \frac{(\psi, e^{i\xi\hat{f}}\psi)}{(\psi,\psi)} \equiv F_{\psi}(\xi)$$

Эквивалентно, моменты случайной величины, характеризующей результаты измерений выражаются так:

$$\mathbb{E}_{\psi}(f^m) = \left.\frac{d^m F_{\psi}(\xi)}{d(i\xi)^m}\right|_{\xi=0} = \frac{(\psi, \hat{f}^m\psi)}{(\psi,\psi)}.$$

(V) Эволюция состояния системы во времени определяется унитарным оператором $\hat{U}(t,t_0)$:
$$\psi(t) = \hat{U}(t,t_0)\psi(t_0),$$
где $\psi(t_0)$ — состояние в момент t_0. Для замкнутой механической системы (Гамильтониан не зависит от времени $\Leftrightarrow$ энергия системы сохраняется)

оператор эволюции имеет вид:

$$\hat{U}(t,t_0)=\exp\left(-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)$$

Дифференцируя равенство $\psi(t)=U(t,t_0)\psi(t_0)$ по времени, приходим к уравнению эволюции вектора состояния — <u>уравнению Шредингера</u>:

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial\psi(t)}{\partial t}=\hat{H}\psi(t) \\ \psi(t_0)=\psi_0. \end{cases}$$

Рассмотрим эти постулаты более ~~детально~~ подробно и приведём простой пример.

Прежде всего, начнём с конечномерного аналога гильбертова пространства $\mathcal{H}$: комплексного пространства V_N: $\dim_{\mathbb{C}} V_N=N$ с эрмитовым скалярным произведением.

$\boxed{О}$ $(\ ,\ ): V\times V\to\mathbb{C}$:

(i) $\forall\ \varphi$ и $\psi\in V_N$ $(\varphi,\psi)\in\mathbb{C}$ и

$(\varphi,\psi)=\overline{(\psi,\varphi)}$ — комплексное сопряжение.

(ii) Форма (φ,ψ) — линейна по второму аргументу:

$$(\varphi,\alpha_1\psi_1+\alpha_2\psi_2)=\alpha_1(\varphi,\psi_1)+\alpha_2(\varphi,\psi_2)$$

α_1 и $\alpha_2\in\mathbb{C}$.

В силу (i) форма (φ,ψ) — <u>антилинейна</u>

по первому аргументу

(iii) $\forall\ \varphi \in V_n$ вещественное число

$$(\varphi,\varphi) \geq 0 \quad \text{и} \quad (\varphi,\varphi) = 0 \iff \varphi = 0 -$$

— нулевой вектор в V_n.

[V] Для $\forall\ \varphi$ и $\psi \in V_n$ выполнено неравенство Коши - Буняковского

$$|(\varphi,\psi)| \leq \sqrt{(\varphi,\varphi)(\psi,\psi)}.$$

Это неравенство позволяет доказать, что число $\sqrt{(\varphi,\varphi)} \equiv \|\varphi\|$ есть норма на V_n. Неравенство Коши-Буняковского требуется для доказательства неравенства треугольника для нормы: $\|\varphi + \psi\| \leq \|\varphi\| + \|\psi\|$.

Любой набор базисных векторов можно ортонормировать процедурой Шмидта и мы дальше будем работать только с ортонормированными базисами:

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij}.$$

Если $\varphi = \sum\limits_{i=1}^{n} \varphi_i e_i$ и $\psi = \sum\limits_{i=1}^{n} \psi_i e_i$ — разложение векторов φ и ψ по ортонормированному базису, то

$$\boxed{(\varphi,\psi) = \sum_{i=1}^{n} \overline{\varphi}_i \psi_i}\ .$$

Пусть $\hat{A}: V_N \to V_N$ – линейный оператор. В базисе $\{e_i\}_{1\le i\le N}$ он задаётся прямоугольной матрицей $\|A_{ij}\|_1^N$:

$$\hat{A} e_i = \sum_{k=1}^{N} e_k A_{ki}$$

$\boxed{O}$ Оператор $\hat{A}^+$ называется сопряжённым к $\hat{A}$, если для $\forall\, \varphi$ и $\psi \in V_N$:

$$(\varphi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^+\varphi, \psi)$$

$\boxed{O}$ Если $\hat{A}^+ = \hat{A}$, то $\hat{A}$ называется самосопряжённым.

$\boxed{O}$ Оператор $\hat{A}$ называется эрмитовым (симметрическим) если для $\forall\, \varphi$ и $\psi \in V_N$

$$(A\varphi, \psi) = (\varphi, A\psi).$$

В <u>конечномерном случае</u> понятие эрмитова и самосопряжённого операторов совпадают. В случае Гильбертова пространства – нет.

<u>Свойства самосопряжённого оператора</u>

$\boxed{У}$ 1. Собственные значения самосопряжённого оператора – <u>вещественные</u> числа.

2. Самосопряжённый оператор обладает <u>базисом</u> собственных векторов в V_N, т.е. $\exists\, \{\psi_i^{(A)}\}_{1\le i\le N}$: $\hat{A}\psi_i^{(A)} = \alpha_i \psi_i^{(A)}$

$$(\psi_i^{(A)}, \psi_j^{(A)}) = \delta_{ij} \quad \text{и}$$

$\forall \psi \in V_N: \ \psi = \sum_{i=1}^{N} c_i \psi_i^{(A)} \quad c_i \in \mathbb{C}.$

Вообще говоря, ~~различные~~ собственные значения α_i могут быть вырожденными, т.е. соответствующие собственные подпространства — не одномерны.

Оператор $\hat{A}$ можно представить в виде:

$$\hat{A} = \sum_{k=1}^{s} \alpha_k \hat{P}_k^{(A)}, \quad s \leq N,$$ где все α_s — различны и $\dim\left(\mathrm{Im}\, \hat{P}_k^{(A)}\right) =$ кратность α_k.

$$\hat{P}_k^{(A)\dagger} = \hat{P}_k^{(A)}, \quad \hat{P}_k^{(A)} P_r^{(A)} = \delta_{kr} P_k^{(A)}$$

$$\sum_{k=1}^{s} P_k^{(A)} = \mathbb{1}_{V_N}$$ — разложение единицы относительно оператора A.

$P_k^{(A)}$ — ортогональные проекторы на собственные подпространства.

$\boxed{\text{IV}}$ Если 2 самосопряжённых оператора $\hat{A} = \hat{A}^{\dagger}$ и $\hat{B} = \hat{B}^{\dagger}$ — коммутируют: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, то $\exists$ базис общих собственных векторов операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$: $\Psi(\alpha_i, \beta_k)$: $\hat{A}\Psi(\alpha,\beta) = \alpha\Psi(\alpha,\beta)$
$\hat{B}\Psi(\alpha,\beta) = \beta\Psi(\alpha,\beta)$

При этом $\mathbb{1} = \sum_{ij} P_{ij}^{(A,B)}$ и

$$\mathrm{Im}\, P_{ij}^{(A,B)} \subseteq \mathrm{Im}\, P_i^{(A)}$$
$$\subseteq \mathrm{Im}\, P_j^{(B)}.$$

10 Полный набор самосопряжённых коммутирующих операторов $\hat{A}_1, \hat{A}_2 \dots \hat{A}_M$:

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_k] = 0$$

и $\forall$ самосопряжённый оператор $\hat{B}$, коммутирующий со всеми $\hat{A}_k$: $[\hat{B}, \hat{A}_k] = 0$ есть <u>функция</u> от операторов набора.

Легко показать, что базис общих собств. векторов $\psi(\alpha_1, \dots, \alpha_M)$ <u>однозначно</u> задаётся указанием собственных значений $\alpha_1, \dots, \alpha_M$, то есть, соответствующие собств. подпространства — <u>одномерны</u>:

$$\forall W \subset V_N: \hat{A}_k W \equiv \alpha_k \hat{\mathbb{1}} W \Rightarrow \dim_{\mathbb{C}} W = 1$$
$$k = 1, 2 \dots, M$$

— и —

Пусть вектор $\psi \in V_N$ задаёт чистое состояние квантовой системы, $\hat{A}$ — самосопряжённый оператор, отвечающий некоторой наблюдаемой.

Разложим ψ по базису собств. векторов $\hat{A}$: $\psi = \sum\limits_{i=1}^{N} c_i \psi_i^{(A)}$

Поскольку $\|\psi\| = 1$, то $\sum\limits_{i=1}^{N} |c_i|^2 = 1$.

Согласно постулату IV, среднее значение результатов измерений наблюдаемой A в состоянии ψ есть

$$\mathbb{E}_\psi(A) = (\psi, \hat{A}\psi).$$

$$\hat{A}\psi = \hat{A}\sum_{i=1}^{N} c_i \psi_i^{(A)} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i c_i \psi_i^{(A)} \Rightarrow$$

$$(\psi, \hat{A}\psi) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i |c_i|^2.$$

Отсюда видно, что случайная величина A действительно принимает значение из спектра $\hat{A}$ $A \in \{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$, а $|c_i|^2$ — вероятность получить в состоянии ψ значение α_i при измерении A.

$\boxed{D}$ Сама величина $c_i = (\psi_i^{(A)}, \psi)$ называется амплитудой вероятности ~~измерения~~ получить в результате измерение A значение α_i в состоянии ψ.

$\boxed{D}$ Дисперсией случайной величины A (характеризует разброс значений A вокруг среднего) называется матожидание

$$\mathbb{E}_\psi (A - \langle A\rangle_\psi)^2 = \langle A^2\rangle_\psi - \langle A\rangle_\psi^2$$

$\langle A\rangle_\psi \equiv \mathbb{E}_\psi(A)$ — среднее значение в состоянии ψ

Корень из дисперсии будем называть неопределенностью A в состоянии ψ: $\Delta_\psi A$

Согласно постулату IV:

$$\Delta_\psi^2 A = (\psi, \hat{A}^2 \psi) - (\psi, \hat{A}\psi)^2 \text{ для } \|\psi\| = 1.$$

Если $\psi = \psi_i^{(A)}$ – одно из собственных состояний $\hat{A}$, то $A\psi_i^{(A)} = \alpha_i \psi_i^{A}$ и

$$(\psi_i^{(A)}, \hat{A}\psi_i^{(A)}) = \alpha_i$$

$$\Delta_\psi A = 0, \text{ т.к. } \hat{A}^2 \psi_i^{(A)} = \alpha_i^2 \psi_i^{(A)} \text{ и } \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (\psi_i^{(A)}, \hat{A}^2 \psi_i^{(A)}) = \alpha_i^2 = (\psi_i^{(A)}, \hat{A}\psi_i^{(A)})^2$$

Итак, чистое состояние ψ называется собственным для наблюдаемой A если результаты эксперимента по измерению A в этом состоянии дают однозначный результат: $\mathbb{E}(A^k) = \alpha_i^k \ \forall k$.

Уточнение постулата IV

(редукция вектора состояния).

Если производится измерение наблюдаемой A, оператор которой $\hat{A}$ имеет <u>невырожденное</u> собственное значение α_i, то если измерение даёт значение α_i, состояние системы сразу после этого измерения меняется от Ψ к $\Psi_i^{(A)}$. Это называется редукцией вектора состояния.

$$\Psi = c_1 \Psi_1^{(A)} + c_2 \Psi_2^{(A)} + \ldots + \underline{c_i \Psi_i^{(A)}} + \ldots + c_N \Psi_N^{(A)}$$

$\downarrow$

Измерение A дало результат α_i

$\downarrow$

$$\boxed{\Psi \longmapsto \Psi_i^{(A)}}$$

Зам. Что означает сразу после измерения? Дело в том, что в процессе эволюции состояние может измениться, если $\hat{A}$ не коммутирует с $\hat{H}$. Поэтому, измерив значение α_i такой наблюдаемой, мы можем не получить нулевую дисперсию через какой-то промежуток времени, т.к. вследствие эволюции состояние в момент t не будет собственным вектором $\hat{A}$ $\Psi_i^{(A)}$, каким оно было сразу после измерения.

V Эволюция квантовых системы.

То, что мы сформулировали в V постулате, называется картиной эволюции Шредингера.

Пусть $t_0 = 0$ и в начальный момент система находилась в состоянии Ψ_0. Тогда в момент t имеем состояние:

$$\Psi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\Psi_0$$

Рассмотрим оператор $\hat{A}$ некоторой наблюдаемой и найдём среднее значение измерений A в момент t:

$$\langle A \rangle_t = \left(\Psi(t), \hat{A}\Psi(t)\right) = \left(\hat{U}(t)\Psi_0, \hat{A}\hat{U}(t)\Psi_0\right) =$$

$$= \left(\Psi_0, \hat{U}^+(t)\hat{A}\hat{U}(t)\Psi_0\right) = \underline{\left(\Psi_0, \hat{A}(t)\Psi_0\right)}$$

$\hat{A}(t) = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$ — это оператор физической величины в картине эволюции Гейзенберга.

$$i\hbar\frac{\partial\hat{A}}{\partial t} = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left(-\hat{H}\hat{A} + \hat{A}\hat{H}\right)e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} =$$

$$= \left(e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\right)\hat{H} - H\left(e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\right) =$$

$$= \hat{A}(t)\hat{H} - \hat{H}\hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}].$$

$$\hat{A}(0) = \hat{A}$$

Итак, в картине эволюции Шредингера операторы, отвечающие физическим наблюдаемым, не зависят от времени, а вектора состояний — эволюционируют.

В картине эволюции Гейзенберга неподвижны вектора состояний, а операторы эволюционируют во времени:

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} = [\hat{A}(t), \hat{H}] \\ \hat{A}(0) = \hat{A}. \end{cases}$$

Обе картины унитарно эквивалентны и физически неразличимы, т.к. имеют одинаковые средние значения в момент t для $\forall$ величин, а эти средние — единственное, что измеряется на опыте.

$$\langle A \rangle_t \equiv \underbrace{(\Psi(t), \hat{A}\Psi(t))}_{\text{Шредингер}} \equiv \underbrace{(\Psi_0, \hat{A}(t)\Psi_0)}_{\text{Гейзенберг}}$$

Особенно удобны для описания эволюции векторов собственные состояния Гамильтониана.

Если $\Psi_0 = \sum_{i=1}^{N} c_k \Psi_k^{(H)}$: $\hat{H}\Psi_k^{(H)} = E_k \Psi_k^{(H)}$

то $\Psi(t) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)\Psi_0 =$

$$= \sum_{k=1}^{N} c_k e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \Psi_k^{(H)}.$$

То есть, эволюция приводит к появлению фазовых множителей $e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}}$ у коэффициентов разложения c_k.

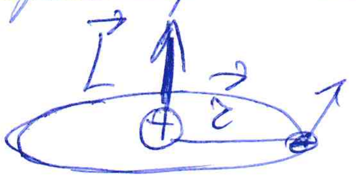
В силу статистической интерпретации $c_k \exp\left(-i\frac{E_k t}{\hbar}\right)$ — амплитуда вероятности найти значение энергии E_k в момент t у системы, которая в $t=0$ была в состоянии Ψ_0. Это означает, что все вероятности $\left|c_k e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}}\right|^2 = |c_k|^2$ не изменяются с течением времени. Это отражение постоянства Гамильтониана и квантовое выражение закона сохранения энергии. В картине Гейзенберга $i\hbar\frac{\partial \hat{H}(t)}{\partial t} = [\hat{H}(t), H] = 0$

$$\Rightarrow \hat{H}(t) = \hat{H}$$

и $\langle H^k \rangle_t = (\Psi(t), \hat{H}^k \Psi(t)) = (\Psi_0, \hat{H}^k(t)\Psi_0) =$

$$= (\Psi_0, \hat{H}^k \Psi_0) \quad \forall t, \forall k.$$

<u>Пример: магнитный момент</u>



$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] \Rightarrow \vec{\mu} = \mu \vec{L}$ — магнитный момент.

В магнитном поле $\vec{B}$: $H = \mu(\vec{B}\vec{L})$.

Какая квантовая система отвечает этой классической модели? "Спиновая цепочка" из одного атома.

$$L_i = [\vec{r} \times \vec{p}]_i = \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} x_j p_k$$

$$\begin{aligned} L_1 &= x_2 p_3 - x_3 p_2 \\ L_2 &= x_3 p_1 - x_1 p_3 \\ L_3 &= x_1 p_2 - x_2 p_1 \end{aligned} \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} \hat{L}_1 &= \hat{x}_2 \hat{p}_3 - \hat{x}_3 \hat{p}_2 \\ \hat{L}_2 &= \hat{x}_3 \hat{p}_1 - \hat{x}_1 \hat{p}_3 \\ \hat{L}_3 &= \hat{x}_1 \hat{p}_2 - \hat{x}_2 \hat{p}_1 \end{aligned}$$

— здесь <u>не возникает</u> проблемы упорядочения! Из канонических перестановочных соотношений Гейзенберга $[\hat{X}_i \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ легко найти алгебру операторов углового момента:

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = i\hbar \hat{L}_3, \quad [\hat{L}_2, \hat{L}_3] = i\hbar \hat{L}_1,$$
$$[\hat{L}_3 \hat{L}_1] = i\hbar \hat{L}_2.$$

Будем считать $\hat{L}_i$ — единственными наблюдаемыми для частицы с собственным угловым моментом (спином), которая закреплена в узле кристаллической решетки.

Возьмём в качестве ГП пространство $\mathbb{C}^2$ и $\hat{H} = \mu \vec{B} \cdot \hat{\vec{S}}$.

Представим операторы $\hat{S}_1$ $\hat{S}_2$ и $\hat{S}_3$ эрмитовыми матрицами 2×2:

$$\hat{S}_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Видно, что выбран базис собственных векторов $\hat{S}_3$: $\psi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\psi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\hat{S}_3 \psi_\uparrow = \frac{\hbar}{2}\psi_\uparrow, \quad \hat{S}_3 \psi_\downarrow = -\frac{\hbar}{2}\psi_\downarrow.$$

Замечание Матрицы $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ и $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ называются матрицами Паули.

$\boxed{\text{У}}$ $\sigma_k \sigma_j = \mathbb{1}\delta_{kj} + i\varepsilon_{kjr}\sigma_r \Rightarrow$

единичная матрица

$\Rightarrow [\sigma_k, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{kjr}\sigma_r.$

Выберем в нашей модели магнитное поле $\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$ — вдоль оси Oz.

Тогда $\hat{H} = \mu B_3 \hat{S}_3 = \hbar \frac{\mu B}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$,

где мы обозначили $\omega = \frac{\mu B}{2}$.

Энергия системы может принимать только 2 значения: $\hbar\omega$ и $-\hbar\omega$.

Найдём собств. значение и собств. вектора оператора $\hat{S}_1$:

$$\hat{S}_1 \varphi_\pm = \pm \frac{\hbar}{2} \varphi_\pm, \text{ где } \varphi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

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

$\frac{1}{\sqrt{2}}$ — нормировка $\|\varphi_\pm\| = 1$, фазовые множители зафиксировали равными 1.

Пусть в $t=0$ система находилась в состоянии φ_+. Это означает, что угловой момент $\vec{S}$ был направлен вдоль оси OX (строго это докажем позже, когда будем систематически изучать теорию углового момента).

Рассмотрим эволюцию этого состояния во времени:

$$\begin{cases} \varphi(t) = \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} \\ \varphi(0) = \varphi_+ \end{cases}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \Rightarrow \begin{cases} i\dot{\alpha} = \omega\alpha, & \alpha(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ i\dot{\beta} = -\omega\beta & \beta(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

а) Каким будет среднее значение результатов измерения проекции S_1 в момент t?

$$\langle S_1 \rangle_t = (\psi(t), \hat{S}_1 \psi(t)) =$$

$$= \frac{\hbar}{4} (e^{i\omega t}, e^{-i\omega t}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{\hbar}{2} \cos(2\omega t) = \underline{\frac{\hbar}{2} \cos(\mu B t)}$$

б) Какова вероятность измерить в момент t значение $S_1 = -\hbar/2$?

Амплитуда этой вероятности (постулат IV):

$$(\psi_-, \psi(t)) = \frac{1}{2}(1, -1) \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix} = -i \sin\omega t,$$

а сама вероятность: $|-i \sin\omega t|^2 = \underline{\sin^2 \omega t}$. — вероятность осциллирует от 0 до 1.

в) Какова вероятность найти $S_3 = \hbar/2$?

Амплитуда: $(\psi_\uparrow, \psi(t)) = (1, 0) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix} =$

$$= \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2}} \Rightarrow$$

вероятность $\left|\frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$ – не зависит от времени.

Уточнение постулата II.

Если система состоит из 2х подсистем, то её пространство состояний есть тензорное произведение $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ пространств состояний подсистем.

Операторы наблюдаемых первой и второй подсистем в пространстве $\mathcal{H}$ задаются величинами: $\hat{A}_{(1)} \otimes \hat{\mathbb{1}}_{(2)}$ и $\hat{\mathbb{1}}_{(1)} \otimes \hat{A}_{(2)}$ соответственно.