Математические основы =1=

Квантовой механики (осень 2020).

Лекция № 2

Литература по курсу:

1. Brian C. Hall, "Quantum theory for mathematicians", Graduate Texts in Mathematics, vol. 267, Springer 2013.
Хорошее изложение, подробно и обстоятельно излагается спектральная теория самосопряженных операторов в Гильбертовом пространстве. Также есть сводка фактов по Гамильтоновой механике, по группам и алгебрам Ли и т.п.

2. Л.Д. Фаддеев, О.А. Якубовский, "Лекции по квантовой механике для студентов-математиков". Изд. Ленинградского Университета, Ленинград 1980г.

3. Л.А. Тахтаджян, "Квантовая механика для математиков". Перевод американского издания из серии Graduate Studies in Mathematics, vol. 95; Издательство "Регулярная и хаотическая динамика", Москва-Ижевск, 2011г.

Большая книга, во 2-й части — функциональный интеграл, суперсимметричные модели и т.п.

4. <u>П.А.М. Дирак</u>, "Принципы квантовой механики". Книга одного из создателей квантовой теории, содержит глубокий физический (смысловой) анализ квантовой механики.

5. <u>Р. Фейнман</u>, "Квантовая механика", Фейнмановские лекции по физике, т.т. 8-9. Очень просто и живо написанная книга, рассчитанная, скорее, на студентов-младшекурсников. Содержит описание различных экспериментов и обсуждение связи аппарата К.М и измерений физических наблюдаемых.

Итак, большое число экспериментов над микрочастицами и световыми волнами показывали, что в области микромира классическая механика перестаёт адекватно описывать физические явления. Причём не просто выдаёт <u>ошибочные</u> формулы при количественном описании, сам <u>понятийный аппарат</u> классической механики (состояние, наблюдаемые как

функции на фазовом простран-
стве, траектории и т. п.) оказывается
неприменимым к явлениям атомного
масштаба.

Для того, чтобы понять, что из класси-
ческого подхода нужно модифицировать
(и каким образом), а что придется от-
бросить, рассмотрим кратко схему
построения классической механики фун-
даментальных моделей.

I. Лагранжев подход

С механической системой с n степенями
свободы связывается n-мерное многообра-
зие M, называемое конфигурационным
пространством. На многообразии M зада-
ются (локальные) обобщенные координаты

$q_1, \ldots, q_n$.

Эволюция системы описывается законом
движения – параметризованной гладкой
кривой $\gamma \subset M$, $\gamma = \{q_i(t), t \in [t_1, t_2]\}$.

Динамические уравнения, определяющие
закон движения $\{q_i(t)\}$ определяются
"принципом наименьшего действия" –

— необходимыми условиями экстремальности некоторого функционала $S[\gamma(t)] \in \mathbb{R}$ от параметризованных траекторий $\gamma(t) \subset M$. Функционал S называется <u>действием системы</u>.

Для явного задания S вводится функция $L(q, \dot{q}, t)$ на расширенном <u>фазовом пространстве</u> системы $\underbrace{TM}_{q,\dot{q}} \times \underbrace{\mathbb{R}}_{t}$ ($\dot{q}^i$ — координаты в слое).
Функция L называется Лагранжианом системы.
Для большинства фундаментальных моделей (системы частиц в потенциальном поле)

$$L(q, \dot{q}) = T(q, \dot{q}) - U(q),$$

где T — кинетическая, а U — потенциальная энергии системы. Тогда

$$S[\gamma(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L(q(t), \dot{q}(t))\Big|_{\dot{q} = \frac{dq(t)}{dt}} dt.$$

Требование $\delta S[q(t)] = 0$ при фиксированных $q(t_1) = q_1$ и $q(t_2) = q_2$ дает краевую дифференциальную задачу для поиска закона движения $q(t)$:

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right) - \dfrac{\partial L}{\partial q^i} = 0 \\ q(t_1) = q_1, \; q(t_2) = q_2 \end{cases} \quad 1 \le i \le n \quad (\bigstar).$$

Эта система из n дифференциальных уравнений 2го порядка по временным производным называется системой уравнений Эйлера-Лагранжа.

Важным обстоятельством, облегчающим поиск решений системы (☆), является существование интегралов движения (или, в другой терминологии, законов сохранения).

$\boxed{\text{О}}$ Интеграл движения $\mathcal{J}(q,\dot{q},t)$ это функция на (расширенном) фазовом пространстве $\underbrace{TM}_{q,\dot{q}} \times \underbrace{\mathbb{R}}_{t}$, которая сохраняет постоянное значение на траекториях, отвечающих решениям динамических уравнений (☆):

$$\mathcal{J}\left(q(t), \frac{dq(t)}{dt}, t\right)\Bigg|_{q^i(t) - \text{решение (☆)}} \equiv \mathcal{J}\left(q_1, \frac{dq}{dt}\Big|_{t_1}, t_1\right) \equiv \text{Const}$$

Другими словами,

$$\frac{d}{dt}\left(\mathcal{J}\left(q(t), \frac{dq}{dt}, t\right)\right)\Bigg|_{q^i(t) - \text{решения (☆)}} \equiv 0 \quad (\forall t \in [t_1, t_2]).$$

Наличие интегралов движения тесно связано с группами непрерывных симметрий (группами Ли) механической системы.

Эта связь составляет содержание первой теоремы Эмми Нётер.

Для её формулировки введём понятие <u>преобразования симметрии</u> (или симметрии действия) механической системы.

Рассмотрим k-параметрическую <u>группу Ли</u> преобразований траекторий и временно́го параметра:

$$\begin{cases} q_i(t) \mapsto \tilde{q}_i(\tilde{t}) = Q_i(q,t|\varepsilon), \\ t \mapsto \tilde{t} = T(q,t|\varepsilon) \end{cases} \quad (\star\star)$$

где $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$ – набор <u>независимых</u> групповых параметров, и $\varepsilon = 0$ отвечает <u>тождественному</u> преобразованию:

$$Q_i(q,t|\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=0} = q_i(t), \quad T(q,t|\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=0} = t$$

$\boxed{\text{О}}$ Группа преобразований $(\star\star)$ называется группой <u>преобразований симметрии</u>, если они сохраняют <u>функциональный вид</u> уравнений движения.

Выясним, что это значит на уровне действия и лагранжиана. Сделаем в действии $S[q(t)]$ замену $(\star\star)$:

$$S[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L\left(q, \frac{dq}{dt}, t\right) dt \longmapsto \int_{\tilde{t}_1}^{\tilde{t}_2} \tilde{L}\left(\tilde{q}, \frac{d\tilde{q}}{d\tilde{t}}, \tilde{t}\right) d\tilde{t} \equiv$$
$$\equiv \tilde{S}[\tilde{q}(\tilde{t})].$$

В курсе Лагранжевой механики доказывается, что вариация действия $\tilde{S}[\tilde{q}]$ приводит к <u>таким же уравнениям</u> Эйлера-Лагранжа, что и вариация действия $S[q]$, если (и только если)

$$\tilde{L}\left(\tilde{q}, \frac{d\tilde{q}}{d\tilde{t}}, \tilde{t}\right) = L\left(\tilde{q}, \frac{d\tilde{q}}{d\tilde{t}}, \tilde{t}\right) + \frac{d}{d\tilde{t}}\left(\Lambda(\tilde{q}, \tilde{t}|\varepsilon)\right),$$

где $\Lambda(\tilde{q}, \tilde{t}|\varepsilon)$ – некоторая дифференцируемая функция <u>координат</u> и (возможно) <u>времени</u>. Подчеркнём, что в этом случае уравнения движения, полученные из $\tilde{S}$, <u>функционально</u> такие же, как уравнения движения, полученные из действия S, отличие только в <u>обозначении</u> функций

$\tilde{q} \longleftrightarrow q$, $\tilde{t} \longleftrightarrow t$.

$\boxed{\text{V}}$ <u>(1я теорема Э. Нётер, 1918г.)</u>.

Пусть k-параметрическая группа преобразований (AA) является группой преобразований симметрии механической системы с Лагранжианом $L(q, \dot{q}, t)$.

Тогда существует k функций $I_a(q,\dot q,t)$ (по числу независимых групповых параметров ε_a $1\le a\le k$), которые сохраняются (не зависят от времени) на траекториях движения механической системы, то есть, перестают зависеть от времени при подстановке $q_i=q_i(t)$, $\dot q_i=\frac{d}{dt}(q_i(t))$, где $q_i(t)$ — решения уравнений Эйлера - Лагранжа:

$$\frac{d}{dt}\left(I_a\left(q(t),\frac{dq(t)}{dt},t\right)\right)\Big|_{q(t)\text{ — закон движения}}\equiv 0 \quad \forall\, 1\le a\le k.$$

Явный вид интегралов движения I_a дается формулой:

$$I_a(q,\dot q,t)=\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial L}{\partial \dot q_i}\xi^i_a(q,t)+\left(L-\sum_{i=1}^{N}\dot q_i\frac{\partial L}{\partial \dot q_i}\right)\tau_a(q,t)+\lambda_a(q,t).$$

Здесь
$$\xi^i_a=\frac{\partial Q_i(q,t|\varepsilon)}{\partial\varepsilon^a}\Big|_{\varepsilon=0}$$
$$\tau_a=\frac{\partial T(q,t|\varepsilon)}{\partial\varepsilon^a}\Big|_{\varepsilon=0}$$
$$\lambda_a=\frac{\partial\Lambda}{\partial\varepsilon^a}\Big|_{\varepsilon=0}$$

$\boxed{\text{Зам.}}$ При нахождении величин ξ^i_a, τ_a и λ_a производная по групповому параметру вычисляется в точке ε, отвечающей тождественному преобразованию. Как правило, это точка $\varepsilon = 0$.

$\boxed{\text{Зам.}}$ Функции $\xi^i_a(q,t)$ и $\tau_a(q,t)$ называются генераторами группы преобразований: ~~кр~~

$$\tilde{q}_i(\tilde{t}) = q_i(t) + \sum_a \varepsilon_a \xi^i_a + o(\varepsilon),$$

$$\tilde{t} = t + \sum_a \varepsilon_a \tau_a + o(\varepsilon).$$

Кроме того, поскольку мы считаем $\varepsilon = 0$ точкой, отвечающей тождественному преобразованию, естественно ~~[illegible]~~ положить $\Lambda(q,t|\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=0} = 0$, то есть:

$$\Lambda(q,t|\varepsilon) = \sum_a \varepsilon_a \lambda_a(q,t) + o(\varepsilon).$$

$\boxed{\text{Зам.}}$ Функция Λ находится из равенства (см. стр. =7=):

$$\tilde{L}\left(\tilde{q}, \frac{d\tilde{q}}{d\tilde{t}}, \tilde{t}\right) = L\left(\tilde{q}, \frac{d\tilde{q}}{d\tilde{t}}, \tilde{t}\right) + \frac{d\Lambda}{d\tilde{t}}$$

и лагранжиан $\tilde{L}$ содержит, вообще говора, якобиан замены временной переменной: $\int \tilde{L}\, d\tilde{t} = \int L\, dt.$

Для построения квантовой механики нам потребуется другой формализм классической механики — так называемый Гамильтонов формализм. Для регулярных систем (поясним ниже) эти 2 способа описания механики эквивалентны.

Итак, введём новые переменные p_i $1 \le i \le N$ системой равенств:

$$p_i = \frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial \dot{q}_i} \quad 1 \le i \le N$$

Будем считать, что матрица вторых производных $\left\| \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \right\|$ — называемая Гессианом системы — невырождена:

$$\det \left\| \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \right\| \neq 0.$$

Такие системы назовем регулярными.

$\boxed{\text{Зам.}}$ Многие полевые модели (в частности, электродинамика, ~~...~~ некоммутативные калибровочные модели) не являются регулярными.

Переход к Гамильтонову формализму и операторному квантованию в сингулярных системах (или системах со связями) был разработан П.А.М. Дираком.

Если Гессиан механической системы не вырожден, то мы можем разрешить систему равенств для p_i относительно обобщенных скоростей:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \Rightarrow \dot{q}_i = f_i(q,p).$$
$$1 \le i \le n$$

Геометрически величины p_i - это координаты в слое кокасательного расслоения над M.

Совершим преобразование Лежандра от Лагранжиана $L(q,\dot{q}) \in Fun(TM)$ к функции Гамильтона (Гамильтониану) $H(p,q) \in Fun(T^*M)$ по формуле:

$$H(p,q) = \left(\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - L(q,\dot{q})\right)\Big|_{\dot{q}_i = f_i(q,p)}$$

Вычисляя дифференциалы от обеих частей, получим

$$dH = \sum_{i=1}^{n}\left(\dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i\right) = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i\right).$$

Таким образом:

$$\frac{\partial H}{\partial q^i} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^i} \quad \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i$$

На решениях уравнений Эйлера-Лагранжа: $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^i} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}^i}\right) = \dot{p}_i$,

поэтому уравнение Эйлера-Лагранжа эквивалентны системе уравнений Гамильтона:

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases} \quad 1 \leq i \leq n.$$

Эволюция любой наблюдаемой $f(q,p)$ находится из дифференциального уравнения:

$$\frac{d}{dt}\left(f(q(t), p(t))\right) = \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial f}{\partial p_k}\dot{p}_k\right) = \left(\begin{array}{l}\text{подставляем}\\ \dot{q} \text{ и } \dot{p} \text{ из уравнений}\\ \text{Гамильтона}\end{array}\right)$$

$$= \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial H}{\partial q_k}\right) \equiv \{f, H\}.$$

В последнем равенстве введено обозначение для скобки Пуассона

$$\boxed{\text{D}}\ \{f(q,p), g(q,p)\} = \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial g}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial g}{\partial q_k}\right)$$

$\forall f$ и $g \in \mathrm{Fun}(T^*M)$. – произвольные (дифференцируемые) функции на фаз. пр-ве.

Таким образом, уравнение Гамильтона можно записать в виде:

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\}, \quad \dot{p}_i = \{p_i, H\}.$$

$\boxed{O}$ Функция $f(q,p)$ принимающая постоянные (не зависящие от t) значения на решениях уравнений движения называется интегралом движения:

$$f(q(t), p(t)) = f(q_0, p_0),$$

если $q(t)$ и $p(t)$ — решения уравнений Гамильтона с начальными данными $q(0) = q_0$, $p(0) = p_0$.

Поскольку для интеграла движения $\frac{df}{dt} = \{f, H\} = 0$, то любая функция на T^*M имеющая нулевую скобку Пуассона с Гамильтонианом — интеграл движения.

Рассмотрим основные свойства скобок Пуассона.

Из приведённого на стр. 12 определения легко проверить следующее:

(i) $\forall f$ и g: $\{f,g\} = -\{g,f\}$

(ii) $\forall f, g, h \in \mathrm{Fun}(T^*M)$ и вещественных чисел α и β: $\{\alpha f + \beta g, h\} = \alpha\{f,h\} + \beta\{g,h\}$ –

– и аналогично по второму аргументу скобки (это следует из (i)).

(iii) $\forall f, g, h$:

$$\{f,\{g,h\}\} + \{h,\{f,g\}\} + \{g\{h,f\}\} = 0$$

– тождество Якоби.

(iv) $\{f\cdot g, h\} = \{f,h\}g + f\{g,h\}$ –

– скобка Пуассона есть дифференцирование коммутативной алгебры $\mathrm{Fun}(T^*M)$ функций на фазовом пространстве.

$\boxed{\text{У}}$ Если f и g – интегралы движения, то их скобка Пуассона $h = \{f,g\}$ – – тоже интеграл движения.

Доказательство:

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\} = 0 \qquad \frac{dg}{dt} = \{g, H\} = 0$$

$$\frac{dh}{dt} = \{h, H\} = \{\{f, g\}, H\} = \left(\begin{array}{c}\text{применяем} \\ \text{тождество Якоби}\end{array}\right) =$$

$$= -\{\underbrace{\{H, g\}}_{=\dot g = 0}, f\} - \{\underbrace{\{f, H\}}_{\dot f = 0}, g\} = 0$$

$\boxed{3}$ Скобка Пуассона 2х инт. движения может давать интеграл, функционально зависимый от уже имеющихся.

$\boxed{4}$ Если в интегралах движения, полученных с помощью т. Нётер в лагранжевом формализме, перейти к координатам q и p Гамильтонова формализма

$$\left.\begin{array}{l} I_\alpha(q, \dot q, t) \\ p_i = \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot q_i} \end{array}\right\} \longrightarrow I_\alpha(q, p, t),$$

то скобки Пуассона интегралов движения выражаются через структурные константы алгебры Ли группы симметрии механической системы:

$$\{I_\alpha, I_\beta\} = C_{\alpha\beta}{}^{\gamma} I_\gamma$$

$\boxed{\text{Зам.}}$ Особенно важны независимые интегралы движения, порождающие <u>коммутативную</u> подалгебру:

$$\{I_a, I_b\} = 0$$

Если их достаточно много, то система — полностью [иль.]

В квантовой механике такие наблюдаемые тоже играют очень важную роль: они образуют <u>полный набор</u> наблюдаемых и их одновременное точное измерение приводит квантовую систему в так называемое <u>"чистое состояние"</u>.

В чистых состояниях информация о системе может быть получена в максимально возможной полноте.

Подытожим теперь схему "работы" классической механики и введем важнейшие отличия квантового случая (полученные обобщением опытных фактов).

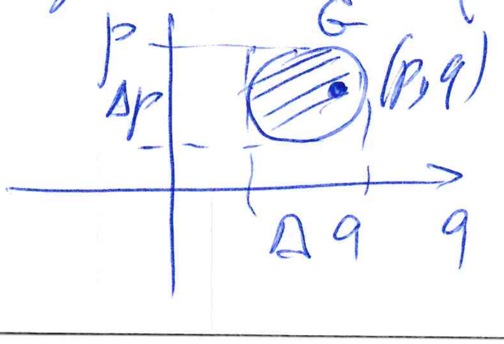
Классическая механика

1. Условия эксперимента определяют (готовят) <u>состояние системы</u>: набор данных, которые позволяют получить информацию о любых наблюдаемых (физических характеристиках), связанных с данной системой.

<u>Чистое состояние</u> — состояние, в котором значения всех наблюдаемых известны <u>точно</u>.

Поскольку наблюдаемые — функции на фазовом пространстве $f(p,q)$, то чистое состояние — <u>точка</u> фазового пространства $P(q_i^{(0)}, p_i^{(0)})$. $\forall$ наблюдаемой в состоянии P соответствует число $f(q^{(0)}; p^{(0)})$.

Однако в <u>реальности</u> система никогда не находится в чистом состоянии (любые измерения содержат <u>погрешности</u>). Поэтому состояние системы (точнее, ансамбля одинаковых систем) характеризуется <u>областью</u> G в T^*M и плотностью вероятности $\rho(p,q)$ чистого состояния $(p,q)\in G$

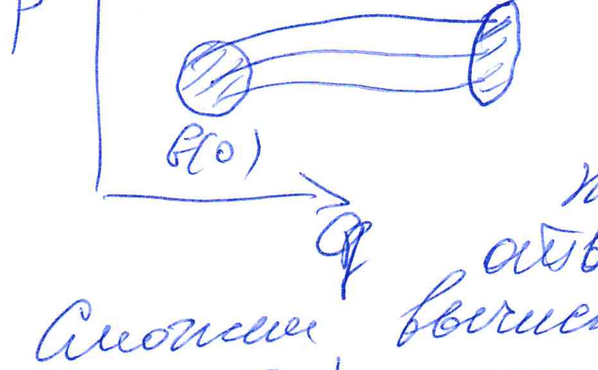


$\int\limits_G \rho(p,q)\,dp\,dq$ — вероятность того, что состояние системы описывается точкой из G.

Принципиальная особенность классического мира: неопределенности Δq и Δp можно одновременно неограниченно уменьшать, получая состояния сколь угодно близкие к чистым.

② Влияние физических приборов на состояние системы можно сделать пренебрежимо малым и считать, что любые измерения не выводят систему из состояния, приготовленного в эксперименте.

③ Динамика задаётся уравнениями Гамильтона, решения $q(t)$ и $p(t)$ задают фазовый поток, сохраняющий в любой момент времени объём области G, в которой находились начальные данные (ансамбль) систем:



Задавая начальные данные $q_i^{(0)}$ и $p_i^{(0)}$ мы в $\forall$ момент t получаем однозначный ответ для $q_i(t)$ и $p_i(t)$ и сможем вычислить (предсказать) точный результат любого измерения (точное значение $\forall$ наблюдаемой).

Квантовая система

1. Не любые наблюдаемые можно одновременно измерить с произвольной точностью. Например, неопределённость измерения координаты q_i и сопряжённого ей импульса p_i связаны соотношением неопределённости Гейзенберга:

$$\Delta q_i \Delta p_i \geq \hbar/2 .$$

Это принципиальное ограничение, не зависящее от настоящего и будущего прогресса в технике и методологии измерений.

2. Невозможно устранить влияние измерения на состояние системы. Измерение физической наблюдаемой вообще говоря необратимо изменяет состояние системы. ~~С~~ Состояние после измерения наблюдаемой A связано с собственными подпространствами самосопряжённого оператора $\hat{A}$, сопоставленного наблюдаемой A, и в общем случае, не является чистым.

3. Результаты всех экспериментов носят вероятностный характер. Измеряя физическую величину даже в чистом

Состояния мы можем получить только распределение вероятностей результатов. Исход каждого конкретного опыта предсказать невозможно.

4) Неклассический закон сложения вероятностей. Опыт по прохождению электронов через 2 отверстия показывает, что при наличии нескольких независ. путей реализации одного исхода складываются не вероятности, а так называемые амплитуды вероятностей: комплексные числа, квадрат модуля которых дает вероятность. Это следует из наличия интерференционной картины: сами вероятности, будучи неотрицательными величинами, не могут дать деструктивной интерференции, то есть уменьшения вероятности попасть в точку экрана при 2х открытых отверстиях по сравнению с такими вероятностями от каждого отверстия по отдельности.