Елементи математичного апарату квантової механіки *

1 вересня 2003 р.

1 Елементи математичного апарату квантової механіки

Фізичні величини (*спостережувані*) можна описувати різними математичними об'єктами. У підході Шредингера фізичні величини описуються операторами гільбертового простору, а стани квантової системи – векторами цього простору.

Нагадаємо, що *скалярний добуток* задається властивостями:

$$\begin{array}{ll} 1) & \langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*, \\ 2) & \langle\phi|\lambda\psi\rangle = \lambda\langle\phi|\psi\rangle, \\ 3) & \langle\phi|\psi_1+\psi_2\rangle = \langle\phi|\psi_1\rangle + \langle\phi|\psi_2\rangle, \\ 4) & \langle\psi|\psi\rangle \ge 0, \text{ причому рівність досягається лише при } \psi = 0. \end{array}$$

Гільбертів простір $\mathcal{H}$– це повний (всяка фундаментальна послідовність збігається) нескінченновимірний евклідів простір (лінійний простір зі скалярним добутком).

Гільбертів простір самоспряжений, тому лінійні функціонали ототожнюються зі скалярним добутком, а спряжені оператори визначаються рівністю:

$$\forall\phi,\psi\in\mathcal{H}\ \ \langle\hat{H}^+\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{H}\psi\rangle.$$

Оператор $\hat{H}$ називається *самоспряженим*, якщо $\hat{H}^+ = \hat{H}$.

Оператор $\hat{H}$ в гільбертовому просторі називається *компактним*, якщо він всяку слабо збіжну послідовність (збіжність за скалярним добутком) переводить у сильно збіжну (збіжність за нормою).

Розглядатимемо лише сепарабельні (існує зліченна всюди щільна множина) гільбертові простори. Сепарабельність потрібна по тій причині, що всі сепарабельні гільбертові простори ізоморфні між собою. Фізично це означає, що всі представлення квантової механіки еквівалентні і дають одні й ті ж значення середніх. Основні властивості сепарабельних гільбертових просторів наступні:

1. Існує ортогональна проекція будь-якого елемента $\psi\in\mathcal{H}$ на будь-який замкнутий підпростір $\mathcal{M}$, причому розклад $\psi = \psi_{\mathcal{M}} + \psi_{\mathcal{M}^\perp}$ єдиний. Тому існує поняття прямої суми і різниці замкнутих підпросторів.

2. Існує повний ортонормований базис $\{\phi_n\}$, тобто $\forall\psi\in\mathcal{H}\ \psi = \sum_n c_n\phi_n$, де $c_n \equiv \langle\phi_n|\psi\rangle$, і $\sum_n |c_n|^2 = \langle\psi|\psi\rangle$.

3. Всякий компактний самоспряжений оператор має повну ортонормовану систему власних функцій. Просто самоспряжений оператор має просто ортонормовану систему власних функцій, причому спектр дійсний.

Отже, будь-який квантовий стан системи ототожнюється з нормованим елементом ψ сепарабельного гільбертового простору $\mathcal{H}$, тобто $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Лінійність простору забезпечує принцип суперпозиції станів. Там де треба відрізняти вектори і їх спряжені використовують позначення

*Andriy Zhugayevych, www.uninet.kiev.ua/~azh/QM/MathBackground.xxx

Дірака: кет-вектор $|\psi\rangle$ для елемента ψ і бра-вектор $\langle\psi|$ для спряженого. Кожна фізична величина A ототожнюється із самоспряженим оператором $\hat{A}$. Позначимо його власні значення через A_n, а власні вектори через ψ_n (кет-вектори – просто $|n\rangle$). Можливі значення вимірювання фізичної величини A співпадають зі спектром її оператора $\{A_n\}$. Самоспряженість оператора гарантує дійсність вимірюваних значень. Сам акт вимірювання спостережуваної A задається аксіоматично проектором на один з власних векторів оператора A: $P = |n\rangle\langle n|$, що означає $P\psi \equiv (\langle n|\psi\rangle)|n\rangle$, при цьому $\langle n|\psi\rangle$ дає імовірність отримати в результаті вимірювання значення A_n. Принцип відтворюваності фізичних вимірювань забезпечується тим, що при подальшому вимірюванні цієї ж фізичної величини буде отримуватися одне й те ж значення A_n. Середнє ж значення вимірювання дається, очевидно, формулою $\overline{A} = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \equiv \langle\psi|\hat{A}\psi\rangle$. Еволюція квантової системи описується унітарними операторами $\hat{U}$, які в загальному випадку можна подати у вигляді $\hat{U} = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$, де $\hat{H}$ – деякий самоспряжений оператор. Унітарність потрібна для збереження одиничного нормування станів.

Практичними реалізаціями гільбертового простору $\mathcal{H}$ служать координатні простори, де координатами є власні числа деякої фізичної величини. У випадку неперервного спектру оператора цієї фізичної величини $\mathcal{H} = L_2(X, \mu)$ зі скінченною чи нескінченною мірою, яка має зліченний базис (останнє потрібне для сепарабельності). Елементами простору L_2 є хвильові функції $\psi(x)$, спряженими будуть $\psi^*(x)$. Координатами $x \in X$ можуть виступати звичайні координати частинки (координатне представлення) або її імпульс (імпульсне представлення). Скалярний добуток в L_2 визначений як $\langle\phi|\psi\rangle = \int_X \phi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}\mu(x)$.

У випадку дискретного спектру $\mathcal{H} = l_2$ одержуємо так зване матричне представлення (якщо спектр скінченний, то $\mathcal{H}$ – скінченновимірний евклідів простір). Координати нумеруються цілими числами, які індексують власні функції. Елементами є вектори з координатами c_n, а операторами – матриці з координатами A_{mn} (скінченні чи нескінченні). Скалярний добуток визначений як $\langle\phi|\psi\rangle = \sum_n d_n^* c_n$, де c_n і d_n – координати векторів ψ і ϕ відповідно. На практиці вибирають не один оператор, а повний набір комутуючих операторів, тоді кожній власній функції відповідає лише один набір власних чисел, розмірність повного набору дорівнює кількості ступенів вільності системи.

Зв'язок між L_2 і l_2 представленнями наступний. Нехай $\hat{H}$ – оператор, на якому побудований l_2, і нехай $\phi_n(x)$ – власні функції оператора $\hat{H}$ в L_2. Тоді для стану ψ і оператора $\hat{A}$ одержимо такі формули відповідності:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x),\ c_n = \int_X \phi_n^*(x)\psi(x)\mathrm{d}\mu(x) \equiv \langle n|\psi\rangle,$$

$$\hat{A} = \sum_{mn} |m\rangle A_{mn} \langle n|,\ A_{mn} = \int_X \phi_m^*(x)(\hat{A}\phi_n)(x)\mathrm{d}\mu(x) \equiv \langle m|\hat{A}|n\rangle.$$

Квантові стани відкритих квантових систем описуються не векторами гільбертового простору, а спеціальними операторами – матрицями густини $\hat{\rho}$, які є додатньовизначеними самоспряженими операторами з одиничним слідом. Якщо $\exists\psi \in \mathcal{H}\ \hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, то такий стан називається чистим, він відповідає опису станів у замкнених системах. Всі інші стани – змішані. Середні обчислюються за формулою $\overline{A} = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})$. Якщо ψ_n – власна функція оператора $\hat{A}$, яка відповідає власному значенню A_n, то ρ_{nn} дає імовірність отримання в результаті вимірювання фізичної величини A значення A_n (після вимірювання система опиняється в чистому стані ψ_n).

Слід зауважити, що стан квантової системи не є фізичною величиною, а несе виключно інформаційну функцію. Це пояснюється тим, що стани самі по собі не вимірюються, а теорії прихованих параметрів заперечуються експериментальними даними. Крім того різні математичні моделі квантової механіки по різному використовують поняття стану, як от в представленні Гейзенберга, "інваріантною" залишається лише комбінація спостережувана плюс стан. Фізична ж інтерпретація станів, наприклад, хвильової функції породжує парадокси квантової механіки, коренем яких є неможливість опису редукції хвильової функції при вимірюванні.