Основы квантовой механики

Главной трудностью в понимании квантовой механики является то, что квантовая механика есть теория вероятностная, то есть она является квантовым аналогом классической статистической механики (а не ньютоновской или гамильтоновой).
При этом вероятностная модель является неклассической — вместо распределения вероятностей используется матрица плотности, вместо вероятностей выступают амплитуды вероятности.
Дополнительную трудность вносит изложение квантовой механики на языке чистых состояний, в то время как непосредственным обобщением классической статистической механики являются состояния смешанные.

Гильбертово пространство, наблюдаемые, состояния

Квантовая механика описывается парой $(\mathcal{A}, \phi)$ =(алгебра наблюдаемых, состояние).

Гильбертово пространство $\mathcal{H}$ есть комплексное евклидово пространство со скалярным произведением $\langle\cdot,\cdot\rangle$, полное относительно нормы скалярного произведения. Пример – пространство $L^2(\mathbb{R})$ квадратично интегрируемых комплекснозначных функций на вещественной прямой.

Скалярное произведение в $L^2(\mathbb{R})$

$$\langle f, g\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)g(x)dx.$$

Наблюдаемые квантовой механики — самосопряжённые операторы в $\mathcal{H}$.

Для линейного оператора A в $\mathcal{H}$ его эрмитово сопряжённый A^*

$$\langle y, A^*x\rangle = \langle Ay, x\rangle.$$

В качестве состояния в квантовой механике можно взять вектор $\psi \in \mathcal{H}$ и определить состояние как

$$\phi(A) = \langle \psi, A\psi \rangle,$$

где $\langle \cdot, \cdot \rangle$ есть операция скалярного произведения в $\mathcal{H}$ и ψ есть вектор единичной длины $\|\psi\| = 1$. Такое состояние называется **чистым**. Здесь $\phi(A)$ называется средним наблюдаемого A по состоянию ϕ (которое определяется вектором ψ).

В более общем случае, состояние есть ϕ есть положительный нормированный функционал на алгебре наблюдаемых $\mathcal{A}$, то есть $\phi(A^*A) \geq 0$, $\forall A \in \mathcal{A}$, $\phi(e) = 1$, где e есть единица в алгебре $\mathcal{A}$. $*$ есть операция сопряжения в алгебре наблюдаемых, для алгебры операторов в гильбертовом пространстве это есть операция эрмитова сопряжения.

Состояние определяется оператором плотности ρ (матрицей плотности): положительна

$$\langle x, \rho x \rangle \geq 0, \quad \forall x \in \mathcal{H},$$

имеет след один: для ортонормированного базиса $\{e_i\}$ в $\mathcal{H}$

$$\operatorname{tr} \rho = \sum_i \langle e_i, \rho e_i \rangle = 1.$$

Тогда **смешанное** состояние определяется как

$$\phi(A) = \operatorname{tr} \rho A.$$

Чистое состояние есть частный случай смешанного, когда матрица плотности имеет ранг один — матрица плотности есть проектор на вектор ψ

$$\rho x = \langle \psi, x \rangle \psi.$$

Унитарная динамика

Динамика в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ задаётся при помощи оператора унитарной эволюции

$$U(t) = e^{-i\frac{t}{\hbar}H}, \qquad \psi(t) = U(t)\psi.$$

Унитарным оператором называется оператор U, обратный U^{-1} к которому существует и равен сопряжённому U^*.
Такая динамика, когда от времени зависят состояния, называется динамикой в представлении Шрёдингера.
Аналогично, можно считать, что от времени зависят не состояния, а операторы (наблюдаемые), то есть динамика наблюдаемых задаётся

$$A(t) = U^*(t)AU(t)$$

(это называется динамикой в представлении Гайзенберга).

Картины динамики Шрёдингера и Гайзенберга эквивалентны

$$\langle \phi, A(t)\psi \rangle = \langle \phi(t), A\psi(t) \rangle.$$

Динамика на матрицах (операторах) плотности вводится как сопряжённая к гайзенберговской динамике

$$\mathrm{tr}\, \rho(t)A = \mathrm{tr}\, \rho A(t) = \mathrm{tr}\, \rho U^*(t)AU(t) = \mathrm{tr}\, U(t)\rho U^*(t)A,$$

откуда

$$\rho(t) = U(t)\rho U^*(t).$$

Унитарная динамика является гомоморфизмом в алгебре наблюдаемых, то есть сохраняет соотношения и правила сопряжения

$$[AB](t) = A(t)B(t), \qquad [A(t)]^* = A^*(t), \qquad 1(t) = 1.$$

Уравнения Гайзенберга, фонНоймана, Шрёдингера

При дифференцировании динамики в представлении Гайзенберга получается уравнение Гайзенберга

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)].$$

Это уравнение есть квантовый аналог уравнения Гамильтона. Аналогично, для матрицы плотности получим уравнение фон Неймана (или квантовое уравнение Лиувилля)

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)].$$

При дифференцировании динамики в представлении Шрёдингера получается уравнение Шрёдингера

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}H\psi(t).$$

Дираковские обозначения

Ортонормированный базис e_n, $n = 1, 2, \dots$ в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ запишем в виде $e_n = |n\rangle$.
Пространство, канонически сопряжённое к $\mathcal{H}$ относительно скалярного произведения (то есть пространство линейных функционалов на $\mathcal{H}$, изоморфно самому $\mathcal{H}$).
Канонически сопряжённый базис в таком пространстве обозначим $e_n = \langle n|$

$$\langle e_m, Ae_n\rangle = \langle m|A|n\rangle, \qquad \langle m|n\rangle = \delta_{mn}.$$

Вектора $\langle m|$ и $|n\rangle$ называют соответственно бра и кет векторами (от слова bracket, или скобка). Также можно рассмотреть общие бра и кет вектора $\langle\psi|$, $|\phi\rangle$.Смысл таких обозначений в том, что в них легко записывать некоторые операторы, например

$$|\phi\rangle\langle\psi|$$

обозначает оператор, переводящий $|\psi\rangle$ в $|\phi\rangle\|\psi\|^2$ и обнуляющий все ортогональные к $|\psi\rangle$ вектора.

Тензорное произведение

Тензорным произведением двух линейных пространств V, W называется линейное пространство $V \otimes W$ следующего вида. Вектора в $V \otimes W$ суть линейные комбинации векторов вида $v \otimes w$, $v \in V$, $w \in W$, причём выполнены соотношения линейности

$$(v + v') \otimes w = v \otimes w + v' \otimes w, \qquad (\alpha v) \otimes w = \alpha(v \otimes w), \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

(аналогичные соотношения имеют место также по второму сомножителю в тензорном произведении).
В частности, для базисов $\{v_m\}$ в V и $\{w_n\}$ в W набор $\{v_m \otimes w_n\}$ будет базисом в $V \otimes W$.
Чтобы тензорное произведение гильбертовых пространств было гильбертовым пространством (было полным), его необходимо пополнить. Мы будем подразумевать, что такое пополнение производится.

Матрица плотности и интерференция вероятностей

Рассмотрим матрицу плотности 2×2 в двумерном гильбертовом пространстве

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}, \quad \rho_{11}, \rho_{22} \geq 0, \quad \rho_{11} + \rho_{22} = 1,$$

$$\rho_{12}^* = \rho_{21}, \quad |\rho_{12}|^2 \leq \rho_{11}\rho_{22}.$$

Геометрия множества таких матриц плотности: обозначим $\rho_{11} = z$, $z \in [0,1]$, $\rho_{12} = x + iy$, $x, y \in \mathbb{R}$. Тогда из $|\rho_{12}|^2 \leq \rho_{11}\rho_{22}$ следует

$$x^2 + y^2 + \left(z - \frac{1}{2}\right)^2 \leq \frac{1}{4},$$

то есть матрицы плотности 2×2 параметризуются трёхмерным шаром единичного диаметра.

Граница шара — чистые состояния.

Диагональные члены матрицы плотности — аналог распределения вероятностей — они неотрицательны и сумма диагональных членов равна единице.
Среднее наблюдаемой A в состоянии ρ

$$\langle A \rangle = \mathrm{tr}\, \rho A = \mathrm{tr} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} =$$

$$= \rho_{11} A_{11} + \rho_{22} A_{22} + \rho_{12} A_{21} + \rho_{21} A_{12}.$$

Первые два члена $\rho_{11} A_{11} + \rho_{22} A_{22}$ — усреднение наблюдаемой A по распределению вероятности $\{\rho_{ii}\}$, $i = 1, 2$.
Внедиагональные члены $\rho_{12} A_{21} + \rho_{21} A_{12}$ описывают интерференцию вероятностей, то есть чисто квантовый эффект, отсутствовавший в классической теории вероятности.
Интерференционные члены исчезают в случае коммутативной алгебры наблюдаемых, когда все наблюдаемые описываются диагональными матрицами. Также интерференционных членов не будет, если матрица плотности диагональна, то есть система находится в классическом состоянии.

Эксперимент с двумя щелями

Эксперимент с двумя щелями есть известный в квантовой механике интерференционный эксперимент (см. например "Фейнмановские лекции по физике"). Состояния проходящих через щели частиц будут удовлетворять уравнению Шрёдингера, то есть их фазы будут экспоненциально осциллировать в зависимости от пройденного пути $e^{-\frac{i}{\hbar}S}$.
Пути S, S' от двух щелей до точек установленного за щелями экрана будут зависеть от точки экрана, поэтому мы будем наблюдать интерференционную картину — в точках, где экспоненты складываются в противофазе, будет иметь место деструктивная интерференция, если экспоненты будут складываться в фазе, мы получим конструктивную интерференцию.
Такой эксперимент показывает наличие интерференции вероятностей в квантовой механике.

Открытые квантовые системы и декогеренция

Известно, что обычно интерференция вероятностей не наблюдается. Это означает, что для таких случаев матрица плотности должна быть диагональна, то есть должна представлять из себя классическое распределение вероятности. Таким образом, квантовые матрицы плотности под действием динамики должны в большинстве случаев стремиться к классическому (диагональному) виду. Такое поведение называют явлением потери когерентности, или декогеренцией (decoherence). Пояснить возникновение декогеренции можно на примере динамики в квантовых открытых системах.

Декогеренция есть результат деструктивной интерференции

Рассмотрим систему, взаимодействующую с окружением (резервуаром), Гильбертово пространство — тензорное произведение пространств системы и резервуара $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$.

Введём на операторах плотности в $\mathcal{H}$ операцию частичного следа. Пусть $\{e_m^{(S)}\}$, $\{e_n^{(R)}\}$ суть ортонормированные базисы в пространствах $\mathcal{H}_S$ и $\mathcal{H}_R$, $\{e_{mn} = e_m^{(S)} \otimes e_n^{(R)}\}$ есть ортонормированный базис в $\mathcal{H}$.
Рассмотрим в $\mathcal{H}$ подпространства $\mathcal{H}_n = \mathcal{H}_S \otimes e_n^{(R)}$.
Подпространство $\mathcal{H}_n$ натянуто на базисные вектора e_{mn}, где индекс n фиксирован. Рассмотрим оператор

$$P_n : \mathcal{H} \to \mathcal{H}_S, \qquad e_{mn} \mapsto e_m, \qquad e_{mn'} \mapsto 0, \quad n' \neq n.$$

P_n переводит $\mathcal{H}_n$ в $\mathcal{H}_S$ и переводит в нуль дополнение к $\mathcal{H}_n$.
Назовём частичным следом по степеням свободы резервуара преобразование оператора плотности в $\mathcal{H}$ вида

$$\rho^{(S,R)} \mapsto \sum_n P_n \rho^{(S,R)} P_n.$$

Такое преобразование переводит оператор плотности системы плюс резервуара в оператор плотности системы.

Рассмотрим оператор плотности ρ системы (оператор плотности в $\mathcal{H}_S$). Применим к такому оператору изометричную (сохраняющую метрику) эволюцию U, перемешивающую состояния системы и резервуара

$$U\rho U^*, \qquad U : \mathcal{H}_S \to \mathcal{H},$$

получим оператор плотности в $\mathcal{H}$.
К результату эволюции применим операцию частичного следа

$$\sum_n P_n U\rho U^* P_n.$$

Мы взяли состояние системы, провзаимодействовали систему с резервуаром путём совместной эволюции, а затем усреднили по состояниям резервуара.
Можно показать, что в силу **деструктивной интерференции** полученное состояние будет смешанным, а если размерность резервуара высока, то при естественных предположениях такое состояние будет близко к диагональному, то есть будет иметь место **декогеренция**.

Сверхизлучение, сверхперенос

Сверхизлучение есть эффект конструктивной интерференции в системе одинаковых осцилляторов, взаимодействующих с полем. Если такие осцилляторы колеблются в фазе, то за счёт конструктивной интерференции амплитуды вероятности излучения складываются, и происходит усиление излучения (диполи излучают как диполь с суммарным дипольным моментом).

Dicke R. H. Coherence in Spontaneous Radiation Processes, Phys. Rev. 1954. Vol. 93. P. 99.
Меньшиков Л. И., Сверхизлучение и некоторые родственные явления, УФН 169, 113–154 (1999)

Процесс квантового переноса (транспорта) — динамика диагональной части матрицы плотности. Сверхперенос — квантовое усиление переноса по типу сверхизлучения за счёт конструктивной интерференции.

Спиновое эхо

Спиновое эхо — наблюдение когерентности в системе спинов с использованием сверхизлучения. Спины в магнитном поле прецессируют вокруг направления поля.

1) Начальное состояние — спины вдоль поля.

2) Импульс э.-м. излучения (свет, инфракрасное, радиоволны) — спины разворачиваются и начинают прецессировать (с разной скоростью в силу неоднородности окружения спинов).

3) Ещё один импульс, разворачивающий спины на 180° — спины разворачиваются и прецессируют в противоположную сторону (но с той же скоростью!).

4) Поскольку скорости спинов те же, в некоторый момент они приходят в одинаковое направление и синхронизируются. За счёт сверхизлучения происходит высвечивание — возникает импульс.

Э. А. Маныкин, Спиновое и фотонное эхо, Соросовский Образовательный Журнал, 8 (1998) 88.