

Математический формализм КМ

НАЗНАЧЕНИЕ

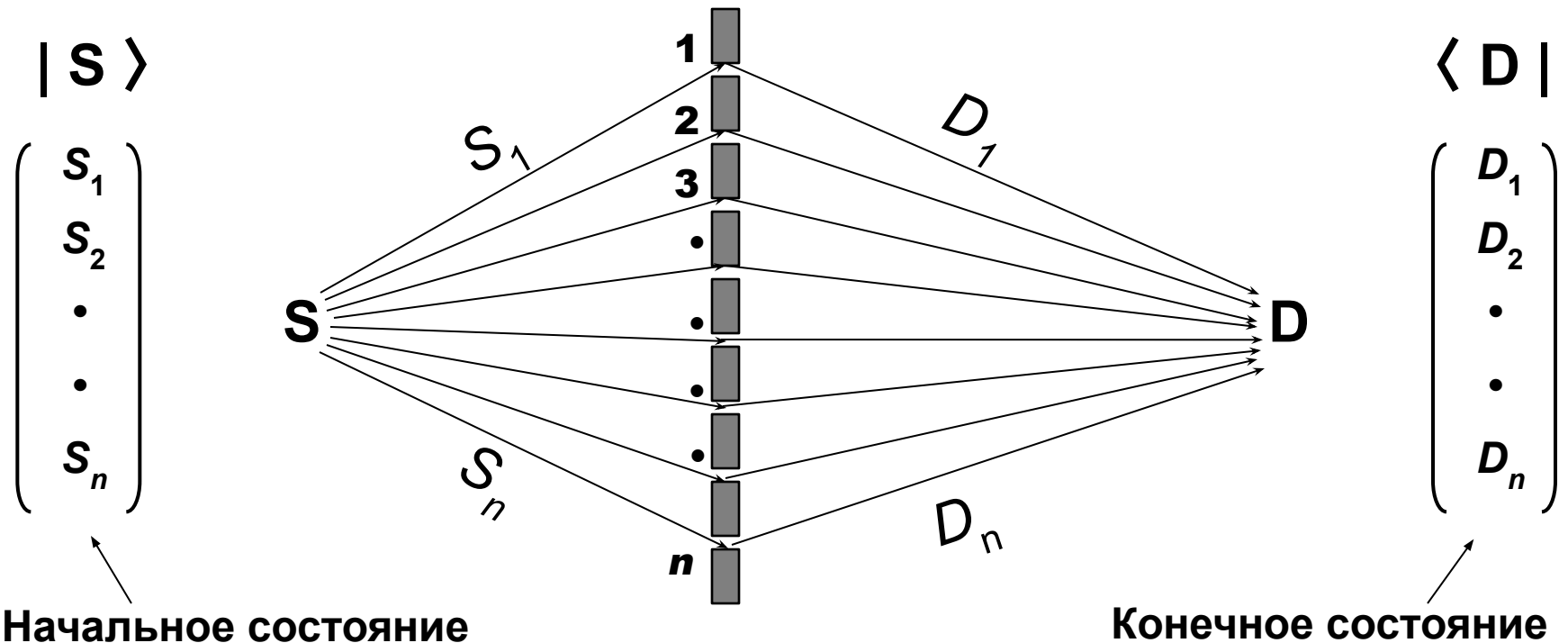
облегчение вычислений с участием
большого числа однотипных
операций сложения и умножения
амплитуд, характеризующих
элементарные события.

Основные понятия

ВЕКТОР

ОПЕРАТОР

Вектор состояния



$$A_{S \rightarrow D} = A_1 + A_2 + \dots = D_1 \cdot S_1 + D_2 \cdot S_2 + \dots = \sum (D_i \cdot S_i)$$

$$\langle D|S\rangle = \langle D|1\rangle \cdot \langle 1|S\rangle + \langle D|2\rangle \cdot \langle 2|S\rangle + \dots = \sum \langle D|i\rangle \cdot \langle i|S\rangle$$

СКАЛЯРНОЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕ двух векторов — $\langle D|$ и $|S\rangle$

Правило 1

амплитуда вероятности любого события (квантового перехода) всегда может быть представлена в виде скалярного произведения двух векторов, изображающих НАЧАЛЬНОЕ и КОНЕЧНОЕ состояния:

$$A_{S \rightarrow D} = \langle D | \cdot | S \rangle = \langle D | S \rangle$$

$\langle D |$ — бра-вектор, вектор конечного состояния (вектор-строка)

$| S \rangle$ — кет-вектор, вектор начального состояния (вектор-столбец)

Координатное представление

$$A_{S \rightarrow D} = \langle D | S \rangle = (D_1 \ D_2 \ \dots \ D_n) \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \vdots \\ S_n \end{pmatrix} = \sum_i (D_i \cdot S_i)$$

Правило 2

любой вектор может быть представлен в виде линейной комбинации базисных векторов

$$|S\rangle = S_1 \cdot |1\rangle + S_2 \cdot |2\rangle + \dots = \sum S_i \cdot |i\rangle$$

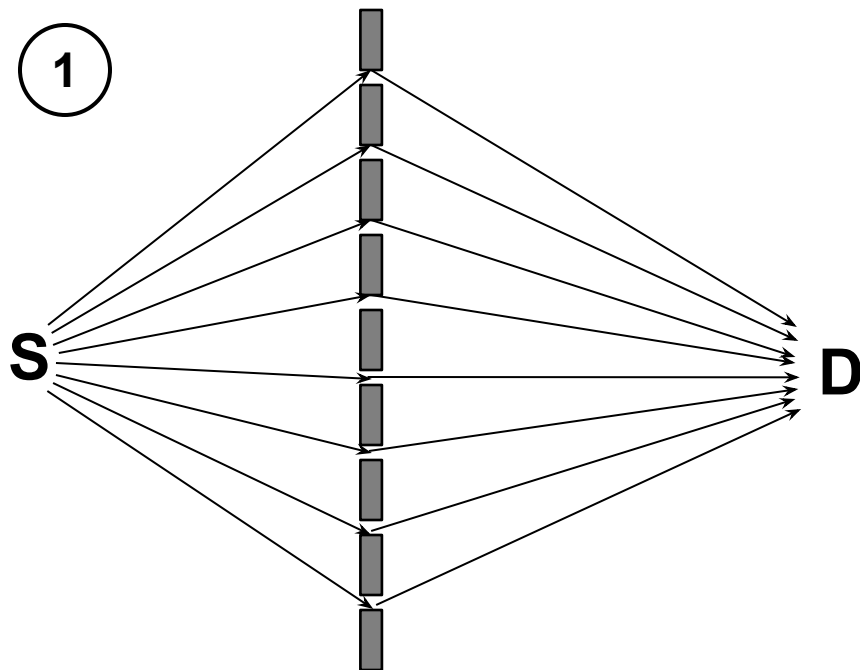
$$\langle D| = \langle 1| \cdot D_1 + \langle 2| \cdot D_2 + \dots = \sum \langle i| \cdot D_i$$

Физический смысл координат

$S_i = \langle i | S \rangle$ — амплитуда перехода частицы из начального состояния $|S\rangle$ в конечное состояние $\langle i|$ (т.е. в i -е базисное состояние прибора-анализатора)

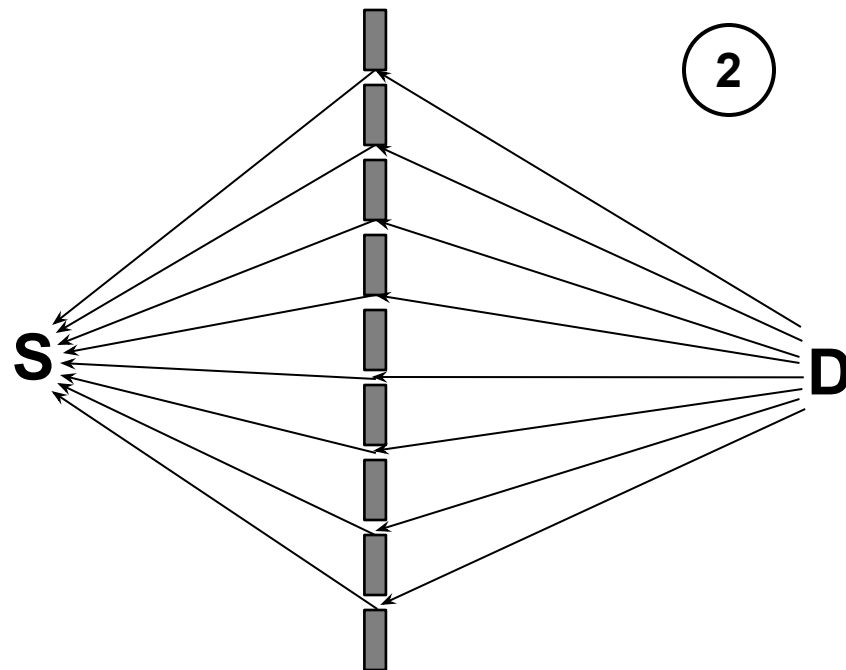
$D_i = \langle D | i \rangle$ — амплитуда перехода частицы из начального состояния $|i\rangle$ (т.е. i -го базисного состояния прибора-анализатора) в конечное состояние $\langle D|$

1



$$\theta_1 = kx = \omega t$$

2



$$\theta_2 = -\theta_1 = -kx = -\omega t$$

Ситуация 1: $|S\rangle = S_1 \cdot |1\rangle + S_2 \cdot |2\rangle + \dots = \sum S_i \cdot |i\rangle$
 $\langle D| = \langle 1| \cdot D_1 + \langle 2| \cdot D_2 + \dots = \sum \langle i| \cdot D_i$

Ситуация 2: $\langle S| = \langle 1| \cdot S_1^* + \langle 2| \cdot S_2^* + \dots = \sum \langle i| \cdot$

$$S_i^*$$

$$|D\rangle = D_1^* \cdot |1\rangle + D_2^* \cdot |2\rangle + \dots = \sum S_i^* \cdot |i\rangle$$

Правило 3

каждое состояние можно представить двумя экземплярами вектора состояния, которые являются ЭРМИТОВО СОПРЯЖЕННЫМИ относительно друг друга

$$| S \rangle = \langle S |^+ \quad \langle D | = | D \rangle^+$$

«бра»-векторы $\langle D |$ используются для представления конечных состояний,

«кет»-векторы $| S \rangle$ используются для представления начальных состояний

Анализ векторов состояния

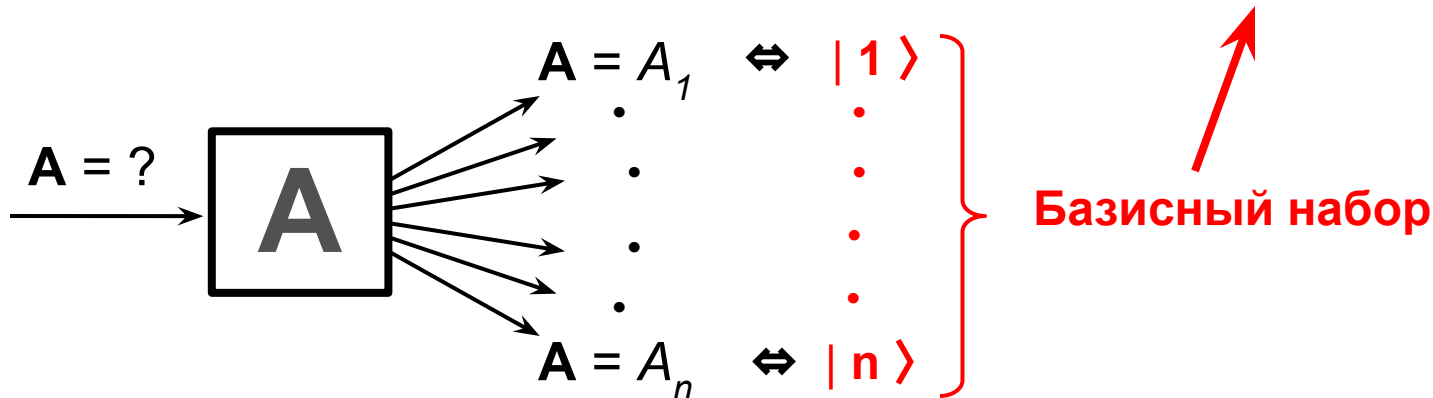
Проблема: для вычисления амплитуд необходимы координатные представления векторов состояния

$$A_{S \rightarrow D} = (D_1 \ D_2 \ \dots \ D_n) \cdot \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \vdots \\ S_n \end{pmatrix} = \sum (D_i \cdot S_i)$$

$$|S\rangle = S_1 \cdot |1\rangle + S_2 \cdot |2\rangle + \dots = \sum S_i \cdot |i\rangle$$

$$\langle D| = \langle 1| \cdot D_1 + \langle 2| \cdot D_2 + \dots = \sum \langle i| \cdot D_i$$

Спектральный анализатор

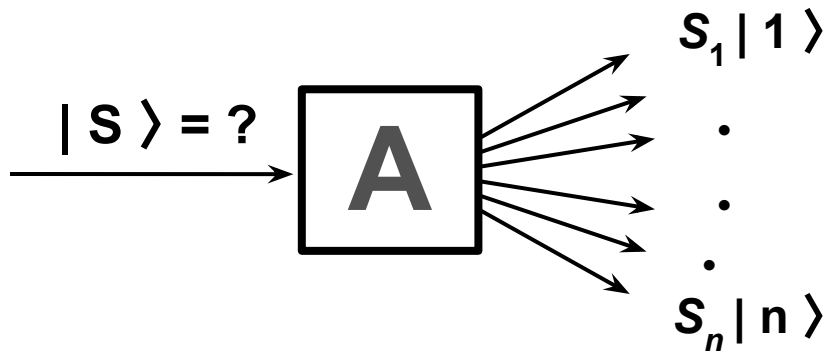


$$\{|1\rangle \ |2\rangle \ \dots \ |n\rangle\} = ???$$

Правило 4

любое базисное состояние является собственным для некоторого спектрального анализатора (A), т.е. для этого состояния одна из наблюдаемых (A) имеет точно определенное значение, выраженное не функцией распределения, а одним числом: $A = A_i$.

Анализ вектора состояния



$$S_i = \langle i | S \rangle$$

$$|S_i|^2 = P(A = A_i)$$

$$\sum |S_i|^2 = \sum P_i = 1$$

Условие нормировки

$$|S\rangle = S_1 \cdot |1\rangle + S_2 \cdot |2\rangle + \dots + S_n \cdot |n\rangle$$

Представления векторов состояния

Прибор А:

$$|\Psi\rangle_A = a_1 \cdot |A_1\rangle + a_2 \cdot |A_2\rangle + \dots = \sum a_i \cdot |A_i\rangle, \quad \text{где } a_i = \langle A_i | \Psi \rangle$$

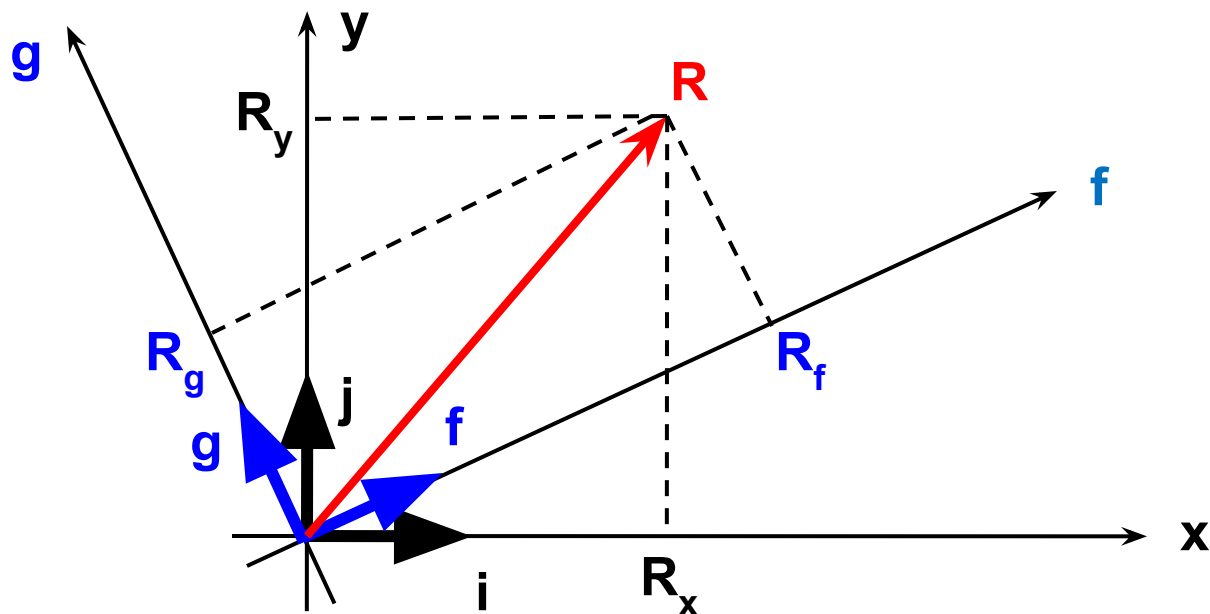
Прибор В:

$$|\Psi\rangle_B = b_1 \cdot |B_1\rangle + b_2 \cdot |B_2\rangle + \dots = \sum b_i \cdot |B_i\rangle, \quad \text{где } b_i = \langle B_i | \Psi \rangle$$

Прибор С:

$$|\Psi\rangle_C = c_1 \cdot |C_1\rangle + c_2 \cdot |C_2\rangle + \dots = \sum c_i \cdot |C_i\rangle, \quad \text{где } c_i = \langle C_i | \Psi \rangle$$

Один и тот же вектор может быть представлен в разных координатных системах (в разном базисе)



$$\mathbf{R} = R_x + R_y = x \cdot \mathbf{i} + y \cdot \mathbf{j} = (x, y) \quad (\text{в базисе } \mathbf{i}, \mathbf{j})$$

$$\mathbf{R} = R_f + R_g = f \cdot \mathbf{f} + g \cdot \mathbf{g} = (f, g) \quad (\text{в базисе } \mathbf{f}, \mathbf{g})$$

$$\begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{ccc}
 & \xrightarrow{\mathbf{U}_{\mathbf{B} \leftarrow \mathbf{A}}} & \\
 |\Psi\rangle & & |\Psi\rangle_{\mathbf{B}} \\
 \mathbf{A} & \xleftarrow{\mathbf{U}_{\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{B}}} &
 \end{array}$$

$\mathbf{U}_{\mathbf{B} \leftarrow \mathbf{A}}$ и $\mathbf{U}_{\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{B}}$ — матричные операторы преобразования координат вектора от одного базиса к другому

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{U}_{\mathbf{B} \leftarrow \mathbf{A}} = (\mathbf{U}_{\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{B}})^+ \\ (\mathbf{U}_{\mathbf{B} \leftarrow \mathbf{A}})^+ = \mathbf{U}_{\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{B}} \end{array} \right\} \text{ Унитарные операторы}$$

A и B — зависимые наблюдаемые

Независимые наблюдаемые

Прибор А:

$$|\Psi\rangle_A = a_1 \cdot |A_1\rangle + a_2 \cdot |A_2\rangle + \dots + a_n \cdot |A_n\rangle = (a_1, a_2, \dots, a_n)$$

Прибор В:

$$|\Psi\rangle_B = b_1 \cdot |B_1\rangle + b_2 \cdot |B_2\rangle + \dots + b_m \cdot |B_m\rangle = (b_1, b_2, \dots, b_m)$$

Прибор С:

$$|\Psi\rangle_C = c_1 \cdot |C_1\rangle + c_2 \cdot |C_2\rangle + \dots + c_k \cdot |C_k\rangle = (c_1, c_2, \dots, c_k)$$

«Прямая» сумма векторов

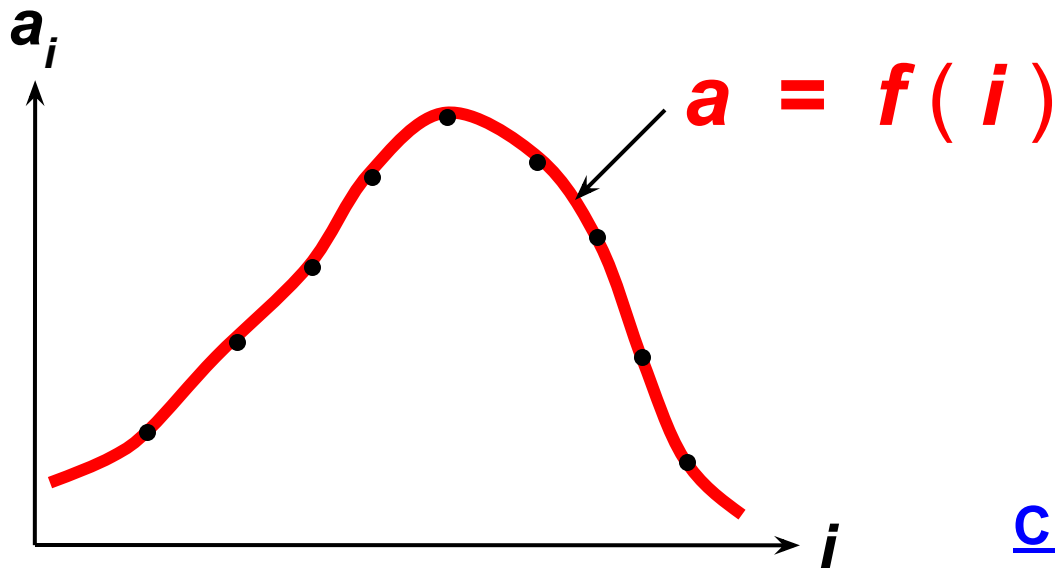
$$|\Psi\rangle_{ABC} = |\Psi\rangle_A \oplus |\Psi\rangle_B \oplus |\Psi\rangle_C$$

$$|\Psi\rangle_{ABC} = (a_1, a_2, \dots, a_n, b_1, b_2, \dots, b_m, c_1, c_2, \dots, c_k)$$

Функциональные представления

$$| \Psi \rangle_A = a_1 \cdot | A_1 \rangle + a_2 \cdot | A_2 \rangle + \dots + a_n \cdot | A_n \rangle + \dots =$$

$$= (a_1, a_2, \dots, a_n, \dots \rightarrow \infty)$$



Функциональное
представление
вектора
(«волновая» функция)

Скалярное произведение

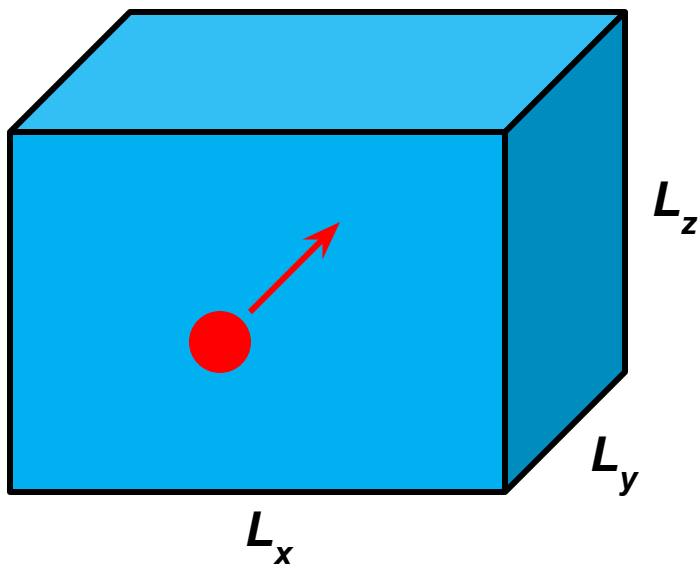
$$\langle \mathbf{D} | \mathbf{S} \rangle = \sum (D_i \cdot S_i)$$

векторы

$$\langle \mathbf{D} | \mathbf{S} \rangle = \int \psi_{(D)} \cdot \phi_{(S)} dv$$

волновые функции

Пример: «частица в ящике»



$$\psi(x, y, z) \sim \sin(\alpha x) \cdot \sin(\beta y) \cdot \sin(\gamma z)$$

«волновая»
функция

$$P = |A|^2$$



$$P = \phi(x, y, z)$$

Вероятностная
функция



$$A = \psi(x, y, z)$$

Амплитудная
функция



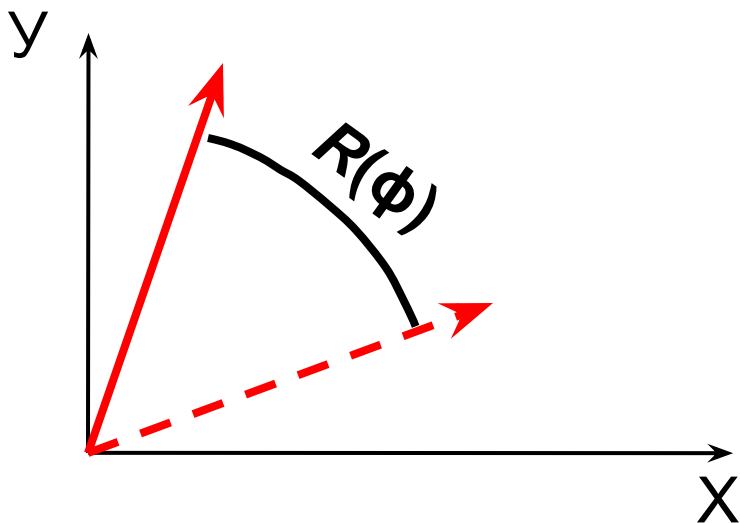
$$P = \phi(x, y, z) = |A|^2 = |\psi(x, y, z)|^2$$

$$\left(\begin{array}{l} 0 \leq x \leq L_x \\ 0 \leq y \leq L_y \\ 0 \leq z \leq L_z \end{array} \right)$$

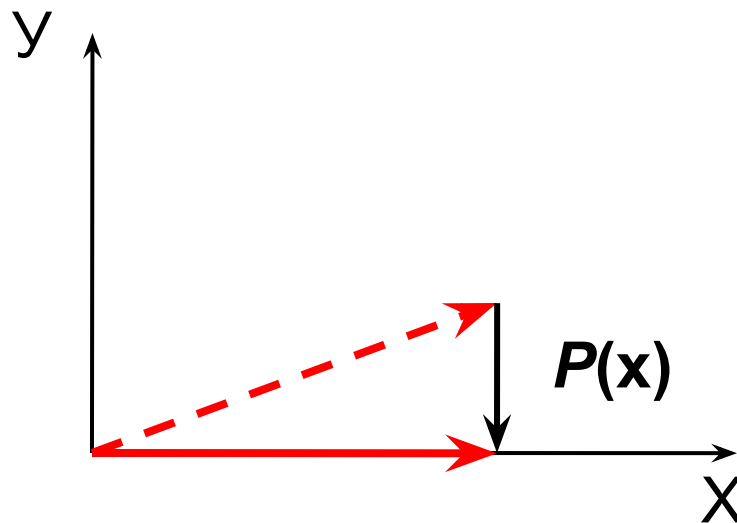
Квантовомеханические операторы

ОПЕРАТОР — процедура (операция),
выполняемая над векторами.

"Оператор поворота" $R(\phi)$
поворачивает любой
вектор на угол ϕ



"Оператор проектирования" $P(x)$
переводит вектор в его
проекцию на ось X и т.д.



$$a \xrightarrow{F} b$$

$$b = F \cdot a$$

$$F : a \rightarrow b$$

Координатное представление

$$b = F \cdot a \quad \text{или}$$

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} & \dots & F_{1n} \\ F_{21} & F_{22} & \dots & F_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ F_{m1} & F_{n2} & \dots & F_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$$

Функциональное представление

Оператор дифференцирования

$$\frac{d}{dx} [\Phi(x)] = \Phi'(x)$$

 ↑ ↑
 функция производная

Оператор интегрирования

$$F(x) = \int [\Phi(x)] dx$$

 ↑ ↑
 первообразная функция

Явный вид оператора зависит от использованного базиса

$$\mathbf{b} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{a}$$

1-й базис

$$(\mathbf{b})_1 = (\mathbf{F})_1 \cdot (\mathbf{a})_1$$

$$\begin{array}{c} \uparrow \\ U_{12} \\ \downarrow \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ U_{21} \\ \downarrow \end{array}$$

2-й базис

$$(\mathbf{b})_2 = (\mathbf{F})_2 \cdot (\mathbf{a})_2$$

$$\begin{array}{c} \uparrow \\ U_{12} \\ \downarrow \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ U_{21} \\ \downarrow \end{array}$$

Связь между представлениями оператора F

$$(F)_1 = U_{12} \cdot (F)_2 \cdot U_{21}$$

$$(F)_2 = U_{21} \cdot (F)_1 \cdot U_{12}$$

$$U_{12} = (U_{21})^{-1} = (U_{21})^+$$

$$U_{21} = (U_{12})^{-1} = (U_{12})^+$$



Унитарные
операторы

Спектральные свойства операторов

Каждый оператор F имеет:

набор **СОБСТВЕННЫХ ВЕКТОРОВ** (функций)

$$(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_n)$$

набор **СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ** (чисел)

$$(f_1, f_2, \dots, f_n)$$

которые удовлетворяют «уравнению на собственные значения»:

$$F \cdot \mathbf{f} = f \cdot \mathbf{f}$$

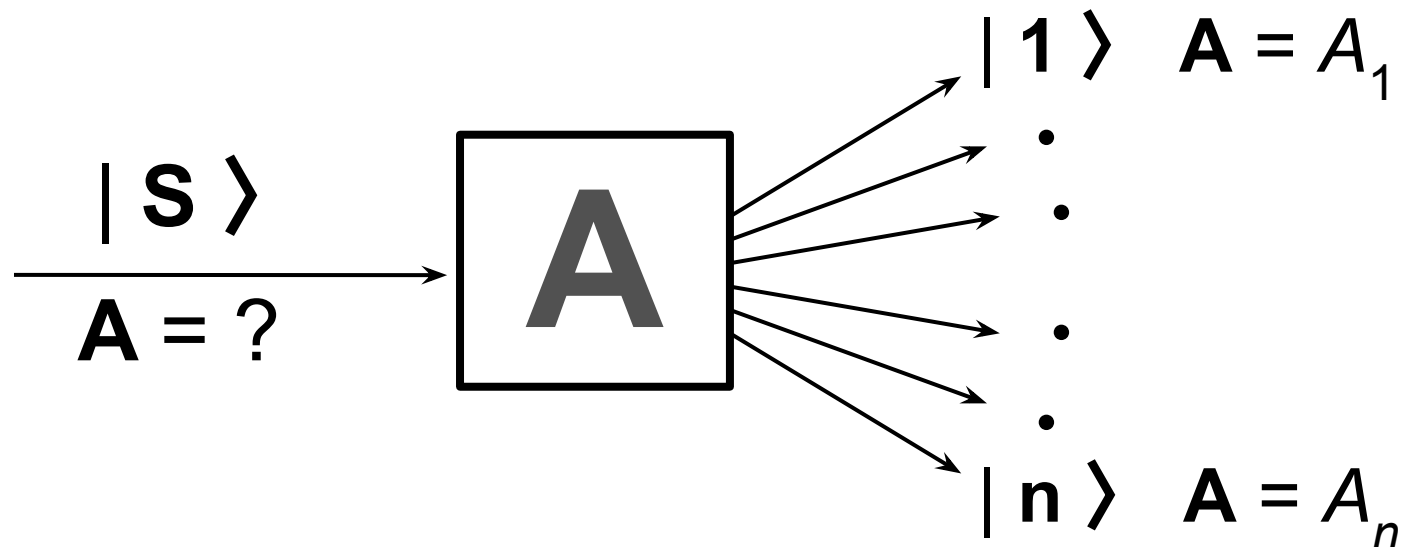
ОПЕРАТОР $\mathbf{F} \iff \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_n \\ f_1, f_2, \dots, f_n \end{array} \right\}$ СПЕКТР оператора

$$\mathbf{C}_2^Z = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \iff \left\{ \begin{array}{l} \begin{pmatrix} X \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ Y \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ Z \end{pmatrix} \\ (-1) \quad (-1) \quad (+1) \end{array} \right\}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ Z \end{pmatrix} = (+1) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ Z \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ 0 \end{pmatrix} = (-1) \cdot \begin{pmatrix} X \\ Y \\ 0 \end{pmatrix}$$

Операторы квантовомеханических наблюдаемых



Оператор
наблюдаемой
 A

$$A \longleftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle \\ A_1, A_2, \dots, A_n \end{array} \right\}$$

Собственные векторы любого оператора КМ-наблюдаемой

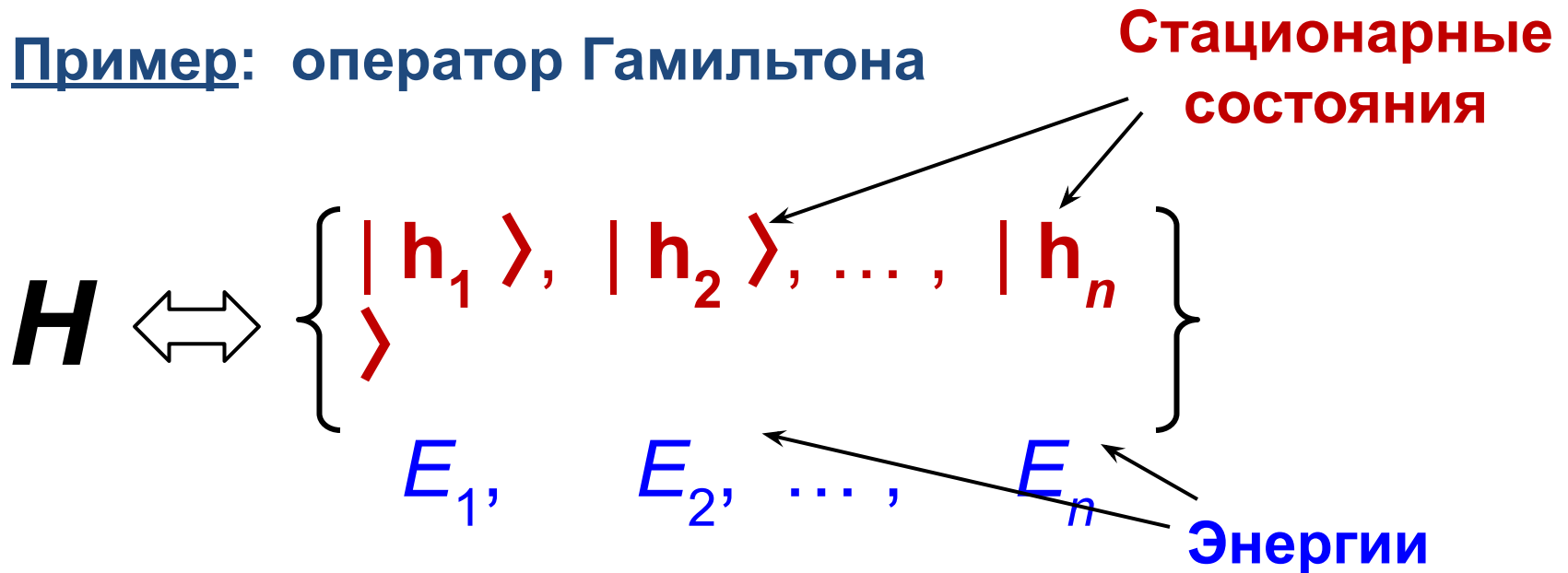
а) взаимно ортогональны

$$\langle \phi_i | \phi_k \rangle = 0 \quad \text{если } i \neq k$$

б) образуют базисный набор

$$|\Phi\rangle = C_1 \cdot |\Phi_1\rangle + \dots + C_n \cdot |\Phi_n\rangle$$

Пример: оператор Гамильтона



Квантовые переходы в атоме

$$\langle 2s | 1s \rangle = A_{1s \rightarrow 2s} = 0$$

(векторы **1s** и **2s** взаимно ортогональны, так как принадлежат спектру одного и того же оператора **H**)

Представление нестационарных состояний

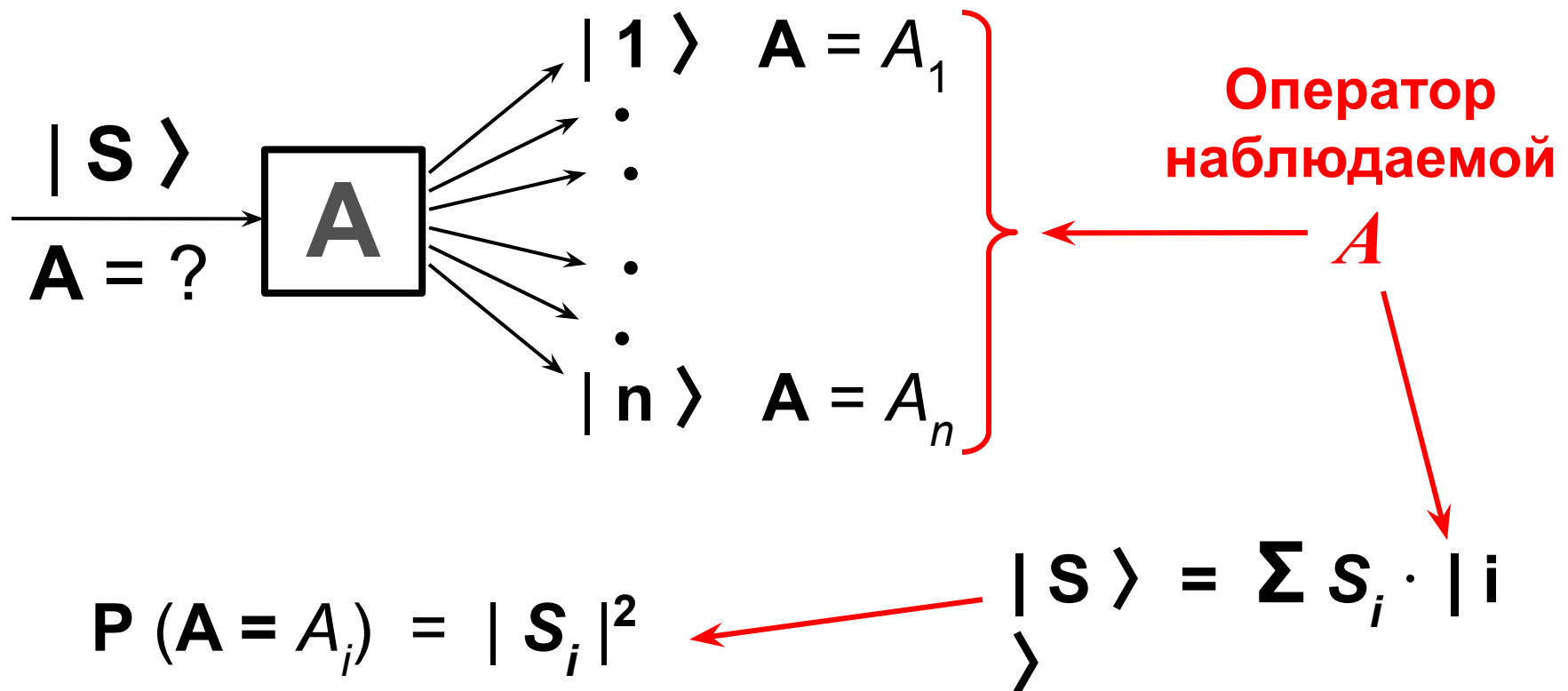
$$| \Phi \rangle = C_1 \cdot | h_1 \rangle + C_2 \cdot | h_2 \rangle + \dots + C_n \cdot | h_n \rangle$$
$$| \Phi \rangle = (C_1, C_2, \dots, C_n)$$

$$| \text{Вода} \rangle = 2 \cdot | \text{H} \rangle + 1 \cdot | \text{O} \rangle = (2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, \dots)$$

МЕТОДИКА квантовой механики

Задача: найти все возможные значения некоторой наблюдаемой $A = (A_1, A_2, \dots, A_n)$

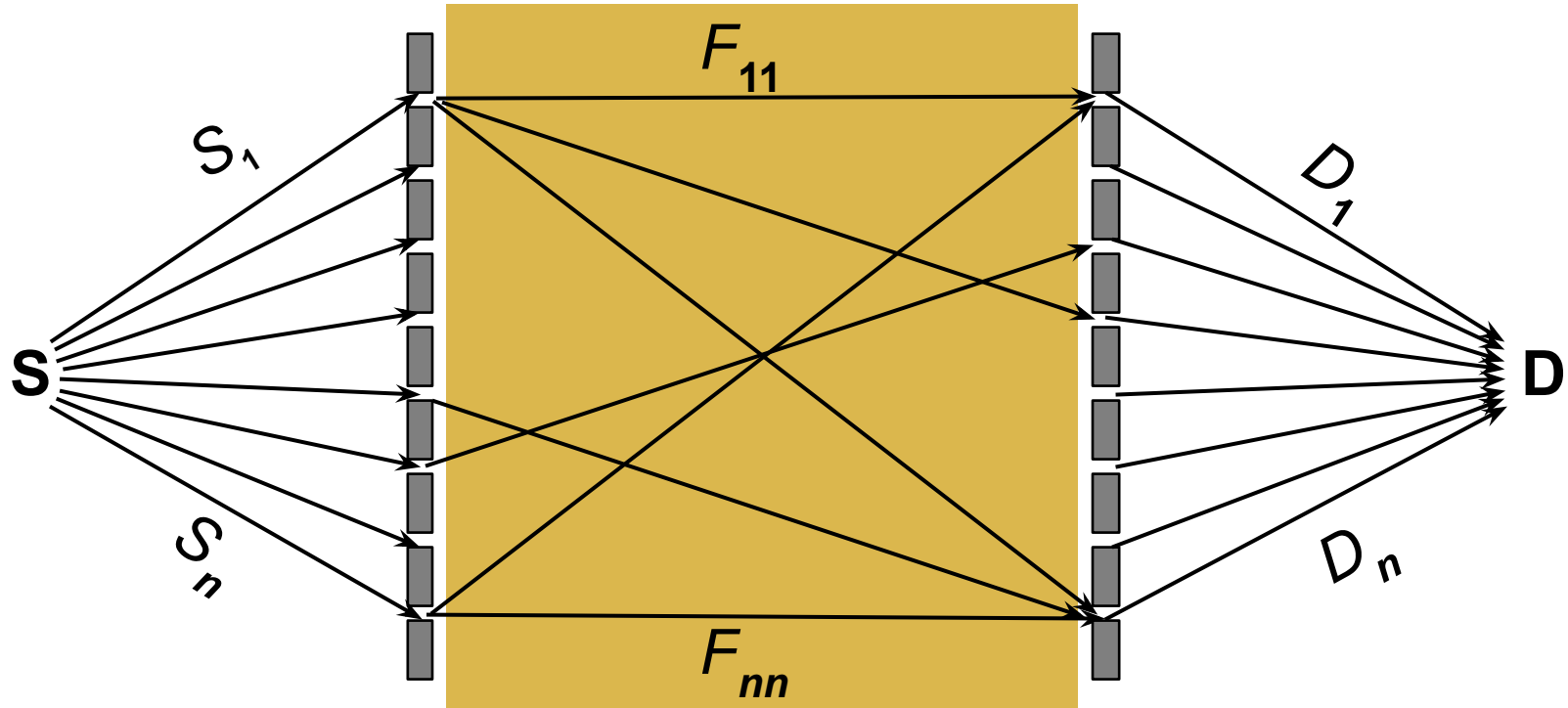
Решение: 1) прямое измерение
2) вычисление спектра оператора



Выводы

1. Всякой механической наблюдаемой A можно сопоставить оператор A
2. Оператор A является математической моделью спектрального анализатора:
 - собственные значения оператора A являются допустимыми значениями наблюдаемой A , которые обнаруживаются в ходе реального измерения
 - собственные векторы (функции) оператора A описывают собственные состояния (выходные пучки) спектрального анализатора и могут быть использованы для анализа векторов состояний

Операторы возмущения



Вычисление глобальной амплитуды

$$A_{S \rightarrow F \rightarrow D} = \sum \sum [D_j \cdot F_{ji} \cdot S_i]$$

$$A_{S \rightarrow F \rightarrow D} = \langle D | F | S \rangle = \sum \sum [\langle D | j \rangle \cdot \langle j | F | i \rangle \cdot \langle i | S \rangle]$$

Вектор начального состояния,
измененный в результате внешнего
воздействия (возмущения)

$$\begin{bmatrix} s_1' \\ s_2' \\ \vdots \\ s_n' \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}_{S \rightarrow F \rightarrow D} = (D_1, D_2, \dots, D_n) \cdot$$

Вектор
конечного
состояния

Оператор
возмущения

Вектор
начального
состояния

$$\begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} & \dots & F_{1n} \\ F_{21} & F_{22} & \dots & F_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ F_{n1} & F_{n2} & \dots & F_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \\ \vdots \\ s_n \end{bmatrix}$$

Вывод

В квантовой механике используют три разновидности операторов

1. Операторы наблюдаемых

Применение

- а) вычисление допустимых значений наблюдаемых (собственные значения),**
- б) использование собственных векторов в качестве базисных наборов для анализа векторов состояния**

2. Операторы возмущения

Применение

Описание влияния внешних тел или полей (электромагнитных, гравитационных и др.) на движение частиц

3. Унитарные операторы

Применение

Преобразование координатных представлений векторов и операторов от одного базиса к другому