

СЗ23

Б-705



ЛЕКЦИИ
ДЛЯ МОЛОДЫХ
УЧЕНЫХ

Д. И. БЛОХИНЦЕВ

Квантовая механика

ДУБНА

ЛВЭ

82

ЛЕКЦИИ ДЛЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

Выпуск 16

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

Д.В.Ширков - председатель
А.Т.Филиппов - зам. председателя
А.Н.Сисакян - ученый секретарь
О.А.Займидорога
А.А.Карлов
В.А.Никитин
Ю.П.Попов

© 1978 Объед

ий Ду

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

P2 - 11728

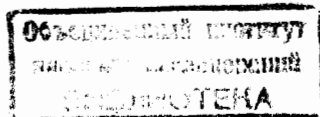
Д.И.Блохинцев

С323
Б-705

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Лекции по избранным вопросам

109525



Дубна 1978

Рукопись поступила в издательский отдел
4 июля 1978 года.

ЛЕКЦИЯ I

Введение

В современной науке все более широкое применение находят статистические методы, основанные на понятии вероятности.

Особенно основательно возросла роль этих методов после открытия квантовой механики и кибернетики. Существует строгий, аксиоматический подход к теории вероятностей. Экскурс в эту область отвлек бы нас от основного предмета лекций — статистической интерпретации квантовой механики и теории квантовых измерений.

Мы будем понимать вероятность как меру потенциальной возможности того или иного события. Эта мера в каждом случае должна быть указана.

В простейших случаях вероятность события A определяют, как отношение числа возможностей m , благоприятных событию A , к общему числу возможностей n : $P = \frac{m}{n}$.

Несмотря на широкое развитие статистических методов в современной науке, часто сохраняется ностальгия по детерминистическому, строго причинному описанию явлений. При этом обычно опускается из виду очень важная деталь детерминистического описания, которая делает его на самом деле условным.

Суть дела заключается в том, что при детерминистическом описании явлений недостаточно задать значения динамических переменных в начальный момент времени $t = 0$ в некоторой пространственной области АВ (см. рис. I), но

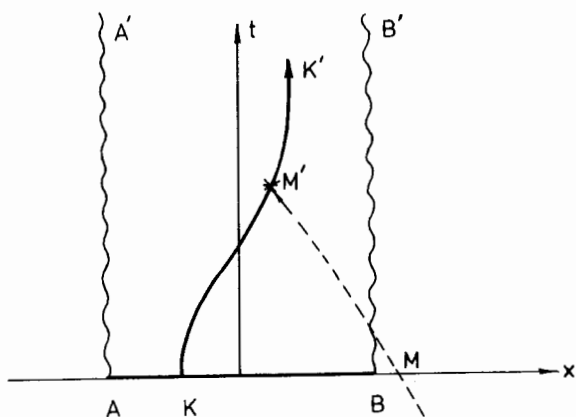


Рис. I. Здесь t - время, x - одномерное пространство. АВ - область, для которой заданы начальные условия. Указаны траектории корабля KK' и случайного метеора MM' .

необходимо задать еще и граничные условия на границах области AA', BB' для $t > 0$, т.е. для будущего времени. Иными словами, следует высказать гипотезу о будущем на границах области AB . Такого рода гипотезы уводят от детерминистической механики в область статистики. Например, траектория космического корабля может быть вычислена по его начальным данным, но возможное взаимодействие корабля с метеоритом может быть оценено только методами статистики^{/1/}. В отличие от классической физики в области квантовых явлений статистическое описание явлений оказывается совершенно неизбежным и лежит в самой её основе. Помимо классической механики существует ещё классическая статистическая механика. В квантовой области также существует квантовая механика, оперирующая с волновой функцией ψ , и квантовая статистическая механика, оперирующая со статистическим оператором $\hat{\rho}$, иначе называемым матрицей плотности по аналогии с плотностью вероятности в классической статистической механике. Однако соотношения между механикой и статистической механикой в классической и квантовой области совершенно различны: классическая механика является основой статистической механики, связь здесь односторонняя. Квантовая механика сама по себе является статистической теорией.

Важнейшую роль в квантовой механике играет теория измерений. Теория измерений не может быть построена без квантовой статистической механики: связь здесь взаимная. Эти соотношения поясняются схемой:

Классическая механикаОписание траекториями
или функцией действия S Квантовая механикаОписание волновой функцией
 ψ Классическая статисти-
ческая механикаОписание плотностью
вероятности $\mathcal{S}(p, q)$
в $2f$ -мерном пространствефаз $\mathcal{R}(p, q)$ Квантовая статистическая
механикаОписание статистическим
оператором $\hat{\rho}$, в f -мер-
ном пространстве конфи-
гураций $\mathcal{R}(q)$ или импульс-
ном пространстве $\mathcal{R}(p)$
и др.

Здесь p, q - сокращенные обозначения для импульсов p_1, p_2, \dots, p_f и сопряженных координат q_1, q_2, \dots, q_f .
 f - число степеней свободы изучаемой системы.

В дальнейших лекциях изложение квантовой механики будет построено на расширенном понимании квантовой механики, в которое как неотъемлемая глава входит теория квантовых измерений и вместе с тем статистическая квантовая механика.

Такому изложению квантовой механики будет предшествовать небольшой экскурс в классическую механику и классическую статистическую механику, носящий характер напоминания.

ЛЕКЦИИ IIКлассический ансамбль Гиббса

Напомним основные положения классической механики системы материальных точек. Движение такой системы может быть описано с помощью канонических уравнений Гамильтона,

оперирующих обобщёнными координатами $q \equiv (q_1, q_2, \dots, q_f)$ и сопряженными им импульсами $p \equiv (p_1, p_2, \dots, p_f)$. Здесь f - число степеней свободы рассматриваемой системы.

Условия канонической сопряженности выражаются с помощью скобок Пуассона. Скобки Пуассона для двух динамических величин $A(q, p)$ и $B(q, p)$ определяются так:

$$[A, B] = \sum_{s=1}^f \left(\frac{\partial A}{\partial p_s} \frac{\partial B}{\partial q_s} - \frac{\partial A}{\partial q_s} \frac{\partial B}{\partial p_s} \right). \quad (I)$$

В терминах этих скобок условие канонической сопряженности (q) и (p) гласит:

$$[q_s, q_r] = 0; [p_s, p_r] = 0; [p_s, q_r] = \delta_{sr}. \quad (2)$$

Характер рассматриваемой динамической системы определяется функцией Гамильтона $H(q, p, t)$.

В частном случае независимости от времени $H(q, p)$ есть полная энергия системы E .

Состояние системы определяется точкой (q, p) в фазовом, $2f$ -мерном пространстве $\mathcal{R}(q, p)$; f -мерное пространство $\mathcal{R}(q)$ называется пространством конфигураций, а f -мерное пространство $\mathcal{R}(p)$ - импульсным пространством. Задача механики заключается в нахождении траектории системы $q_1(t), q_2(t), \dots, q_f(t)$ в пространстве конфигураций $\mathcal{R}(q)$ по начальному состоянию системы при $t=0$, заданному точкой в фазовом пространстве:

$$(q^0, p^0) \equiv q_1^0, q_2^0, \dots, q_f^0; p_1^0, p_2^0, \dots, p_f^0.$$

Ввиду связи, существующей между $p_s(t)$ и $q_s(t)$, вместе с тем определяется траектория и в пространстве фаз $\mathcal{R}(p, q)$, и в пространстве импульсов $\mathcal{R}(p)$.

Переменные $q_s(t)$, $p_s(t)$ определяются из системы канонических уравнений Гамильтона, которые гласят:

$$\frac{dq_s}{dt} = [H, q_s], \quad \frac{dp_s}{dt} = [H, p_s]. \quad (3)$$

Эти уравнения и скобки (2) остаются инвариантными при переходе к новым каноническим переменным $Q_1 \dots Q_f, P_1 \dots P_f$, если имеет место условие:

$$\sum_{s=1}^f (P_s dQ_s - p_s dq_s) = dW, \quad (4)$$

где dW — полный дифференциал. Такое преобразование называется каноническим. Движение, определяемое уравнениями (3), может рассматриваться как последовательность бесконечно малых канонических преобразований. Действительно, из них следует, что

$$Q_s = q_s + \frac{\partial W}{\partial p_s} \Delta t, \quad P_s = p_s - \frac{\partial W}{\partial q_s} \Delta t, \quad (5)$$

где Q_s и P_s суть значения переменных q_s и p_s в момент $t + \Delta t$. Само собой очевидно, что Q_s и P_s удовлетворяют уравнениям (3); нетрудно проверить, что они удовлетворяют также каноническим соотношениям (2) и условию (4) /2/.

В отличие от описанной выше постановки проблемы, характерной для классической механики, в классической статисти-

ческой механике состояние системы задается не какой-либо определенной точкой (q, p) в пространстве фаз $\mathcal{R}(q, p)$, а вероятностью dW или ее плотностью ρ :

$$dW(q, p, t) = \rho(q, p, t) dq dp, \quad (6)$$

указывающей вероятность того, что рассматриваемая система в момент времени t имеет координаты в интервале

$$q_s, q_s + dq_s ; p_s, p_s + dp_s ; \quad s = 1, 2, \dots, f. \quad (7)$$

По смыслу вероятности функция $\rho(q, p)$ неотрицательна и нормирована на 1:

$$\int \rho(q, p, t) dq dp = 1. \quad (8)$$

Этот интеграл не должен зависеть от времени, так как вероятность найти рассматриваемую систему где-либо в $\mathcal{R}(q, p)$ должна быть постоянной. За более детальным изложением этих вопросов следует обратиться к курсам статистической физики (см., например, /3/).

Вероятностное описание предполагает наличие некоторого статистического коллектива, или иначе ансамбля, который должен быть определен физически и тем самым должно быть указано, к какому коллективу событий относится теоретическая вероятность.

В рассматриваемой ниже статистической теории таким ансамблем является ансамбль Гиббса^{/3/x)}.

x) Термины "статистический коллектив", "статистический ансамбль", "статистическая совокупность" равнозначны. Мы будем чаще пользоваться термином "ансамбль", связанным с именем Гиббса (см. /3/).

Суть его такова: предполагается, что изучаемая механическая система " μ " (это может быть атом, молекула, кристалл, газ и т.п.) находится в определенной макроскопической обстановке " \mathcal{M} ", которая определяется макроскопическими параметрами (температурой, силой и направлением внешних полей и т.п.). Обратное влияние " μ " на " \mathcal{M} " считается малым. Напротив, обстановка " \mathcal{M} " вполне, в статическом смысле, определяет состояние системы " μ ". Предполагается, что такая ситуация повторяется N раз ($N \rightarrow \infty$). На рис. 2 изображено такое повторение. Измеряются динамические переменные (q, p) системы " μ ". В первом случае получено (q', p') , во втором — (q'', p'') , в n -м — $(q^{(n)}, p^{(n)})$ и т.д. Предполагается, что в этой серии независимых измерений возникает вполне определенное предиктованное обстановкой " \mathcal{M} " распределение результатов измерения, которое и предсказывается вероятностью

$$dW_{\mathcal{M}}(q, p, t) = \rho_{\mathcal{M}}(q, p, t) dq dp. \quad (9)$$

Значок \mathcal{M} указывает параметры обстановки \mathcal{M} . Простейшим, но и крайне важным случаем обстановки \mathcal{M} является большой термостат температуры T , с которым система " μ " обменивается энергией. Д. Гиббс предположил, что в этом случае плотность вероятности является функцией только полной энергии $E = H(p, q)$ системы " μ ", и, исходя из рассмотрения составной системы " μ " = " μ_a " + " μ_b ", доказал, что плотность ρ должна иметь вид ^{2,4/}

$$\rho_{\theta}(p, q) = e^{-\frac{F - H(p, q)}{kT}}. \quad (10)$$

Здесь k - постоянная Больцмана. Функция F , зависящая от T , определяется из условия нормировки (9). Как доказывается в статистической термодинамике, F есть свободная энергия системы. Формула (10) называется каноническим распределением. Оно описывает ансамбль систем, находящихся в термодинамическом равновесии с термостатом.

Д. Гиббс был первым учёным, который не стремился "вывести" статистику из детерминированной механики. Он предпочитал изучать следствия из простых статистических предположений. Каноническое распределение лежит в основе термодинамической статистики. Обратимся теперь к описанию движения в этом ансамбле. Удобно представить себе вместо плотности $\rho(q, p, t)$ рой независимых точек, плотность которых пропорциональна $\rho(q, p, t)$. Ясно, что число этих точек должно сохраняться. Поэтому, в $2f$ -мерном пространстве фаз $\mathcal{R}(q, p)$ плотность $\rho(q, p, t)$ должна подчиняться обычному, но многомерному уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{s=1}^f \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_s} \dot{q}_s + \frac{\partial \rho}{\partial p_s} \dot{p}_s \right) = 0. \quad (11)$$

С другой стороны, это выражение есть не что иное, как полная производная плотности по времени вдоль траектории. Пользуясь уравнениями (3), мы можем написать вместо (11)

$$\frac{d\rho}{dt} \equiv \frac{\partial \rho}{\partial t} + [H, \rho] = 0. \quad (I2)$$

Эта формула выражает основной закон движения плотности $\rho(q, p, t)$. Она позволяет определить $\rho(q, p, t)$ для $t > 0$, если плотность $\rho(q, p, 0)$ дана для $t = 0$. Из этого уравнения следует постоянство условия нормировки (8). Действительно, скобка $[H, \rho]$ имеет свойство дивергенции вектора и исчезает при интегрировании по объему в $\mathcal{R}(q, p)$ по теореме Гаусса. Следовательно,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho \, dq \, dp = 0. \quad (I3)$$

Приведем теперь важнейшие формулы для ансамбля Гиббса, фиксированного макроскопической обстановкой "M".

Нормировка плотности вероятности $\rho_M(q, p)$ имеет вид:

$$\int \rho_M(q, p) \, dq \, dp = 1. \quad (I4)$$

Среднее значение любой динамической величины $L(q, p)$ системы "μ"

$$\bar{L} = \langle L \rangle = \int \rho_M(q, p) L(q, p) \, dq \, dp. \quad (I5)$$

Среднее квадратичное отклонение переменной $L(q, p)$

$$\overline{\Delta L^2} = \int \rho_M(q, p) \{L(q, p) - \bar{L}\}^2 \, dq \, dp. \quad (I6)$$

Вероятность данного значения L величины $L(q, p)$

$$dW(L) = \int \rho_M(q, p) \delta(L(q, p) - L) dq dp. \quad (*)$$

(17)

Вероятность той или иной конфигурации системы " μ " в пространстве $\mathcal{R}(q)$ равна:

$$dW(q) = \int \rho_M(q, p) dp.$$

(18)

Вероятность данного импульса

$$dW(p) = \int \rho_M(q, p) dq.$$

(19)

Заметим, что часто мы будем опускать индекс M у плотности ρ_M , но неявно он всегда будет присутствовать.

x) Здесь $\delta(x)$ обозначает известную сингулярную функцию Дирака.

ЛЕКЦИИ III

Классическая статистическая механика в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$

Глубокие связи между классической статистической механикой и квантовой механикой особенно ясно обнаруживаются, если обратиться к представлению классической статистической механики в двойном пространстве конфигураций $\mathcal{R}(q, q')$ вместо обычного рассмотрения ее в пространстве фаз $\mathcal{R}(q, p)$ [1,5]. Такое рассмотрение можно осуществить, если вместо точки (p) пространства фаз ввести вторую точку в пространстве конфигураций (q') посредством следующего преобразования Фурье любой динамической переменной $L(q, p)$:

$$L(q, p) = \int L(q, \xi) e^{i p \xi / \hbar^*} d\xi. \quad (1)$$

Здесь $\xi = q' - q$ и \hbar^* — некоторая произвольная постоянная размерности действия. Подобным же образом

$$\rho(q, p) = \int \rho(q, \xi) e^{\frac{i p \xi}{\hbar^*}} d\xi. \quad (2)$$

Обратные формулы гласят:

$$L(q, q') \equiv L(q, \xi) = \int L(q, p) \frac{e^{-i p \xi / \hbar^*}}{2\pi \hbar^*} dp, \quad (3)$$

$$\rho(q, q') \equiv \rho(q, \xi) = \int \rho(q, p) \frac{e^{-i p \xi / \hbar^*}}{2\pi \hbar^*} dp. \quad (4)$$

Это представление сближает классическую статистическую механику

с квантовой механикой. Замечательным образом динамические переменные классической статистической механики в новом представлении оказываются обобщенными функциями. В частности, имеем в этом представлении:

$$P_{qq'} \equiv P_{q\xi} = \int p e^{\frac{-ip\xi}{\hbar^*}} \frac{dp}{2\pi\hbar^*} =$$

$$= i\hbar^* \frac{d\delta(\xi)}{d\xi} = i\hbar^* \frac{d\delta(q-q')}{dq'}, \quad (5)$$

$$Q_{qq'} \equiv Q_{q\xi} = \int q e^{-ip\xi/\hbar^*} \frac{dp}{2\pi\hbar^*} = q'\delta(\xi) = q'\delta(q-q'). \quad (6)$$

Эти выражения для p и q полностью совпадают с выражениями для операторов \hat{p} и \hat{q} в квантовой механике (в координатном представлении). В рассматриваемом представлении динамические переменные статистической механики перемешаются, как компоненты Фурье:

$$C(q, \xi) = \widehat{A}B(q, \xi) = \int A(q, u) B(q, \xi - u) du. \quad (7)$$

Поэтому произведение $AB = BA$. В частности, легко проверить, что

$$(Pq - qP)_{q\xi} = 0 \quad (8)$$

в отличие от квантовой механики, где это выражение не равно нулю. Заметим теперь важнейшие формулы в новом представлении.

Нормировка плотности ρ , как следует из (2), теперь гласит:

$$\int \rho(q, p) dq dp = \int \rho(q, \xi)_{\xi=0} dq = 1, \quad (9)$$

или

$$\int \rho(q, q) dq = 1.$$

Формула (П.7)^{*} для среднего значения величины $L(q, p)$ после подстановки туда выражений (I) и (2) приобретает вид:

$$\bar{L} = \int \rho(q, \xi) L^*(q, \xi) dq d\xi,$$

или

$$\bar{L} = \int \rho(q, q') L^*(q, q') dq dq'. \quad (10)$$

Далее, вероятность конфигурации (П.18) будет равна:

$$\rho(q) = \rho(q, \xi)_{\xi=0} = \rho(q, q), \quad (11)$$

и, наконец, имеет место соотношение

$$(A \cdot B - B \cdot A)_{q, \xi} = 0. \quad (12)$$

Подробности необходимых выкладок, приводящих к этим формулам,

*Здесь и в дальнейшем первая цифра обозначает номер лекции, вторая - номер формулы.

даны в дополнении I. В заключение этого раздела приведем уравнения движения для плотности ρ в координатном представлении в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$.

Для получения этого уравнения необходимо выразить все величины в уравнении (II.12) через их компоненты Фурье согласно преобразованию (I) и (2) и воспользоваться законом умножения (7). Мы ограничимся простым случаем одной степени свободы q и простым гамильтонианом:

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q). \quad (13)$$

Здесь p - импульс частицы, m - ее масса, $V(q)$ - ее потенциальная энергия. Уравнение для $\rho(q, p, t)$, как это легко получить из (II.12), теперь гласит:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial \rho}{\partial q} - \frac{\partial V}{\partial q} \frac{\partial \rho}{\partial p} = 0. \quad (14)$$

Выполняя указанное преобразование, в результате выкладок, приведенных в дополнении I, получим вместо (10) уравнение для

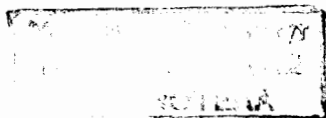
$\rho(q, \xi, t)$:

$$\frac{\partial \rho(q, \xi)}{\partial t} - \frac{i \hbar^*}{m} \frac{\partial^2 \rho(q, \xi)}{\partial q \partial \xi} + \frac{i}{\hbar^*} \frac{\partial V}{\partial q} \xi \rho(q, \xi) = 0. \quad (15)$$

Ниже приводятся два простых случая, когда уравнение (16) решается несложно.

A. Свободное движение. $V = \text{const}$. Положим

$$\rho(q, p, t) = \int \tilde{\rho}(\alpha, \beta) e^{i\omega t - i(\alpha q + \beta \xi)} d\alpha d\beta, \quad (16)$$



где $\tilde{\rho}(\alpha, \beta)$ - произвольная функция, которую следует выбрать по начальным данным. Подстановка в (15) приводит к дисперсионному уравнению:

$$i \omega(\alpha, \beta) + \frac{i \hbar^*}{m} \alpha \beta = 0. \quad (17)$$

Если подставить (17) в (16) и перейти с помощью преобразования Фурье от $\rho(q, \xi, t)$ к $\rho(q, p, t)$, то получается, что $\rho(q, p, t) = f(p, q - pt/m)$, где функция $f(p, q)$ описывает начальное распределение при $t=0$.

Нетрудно проверить, что это решение удовлетворяет уравнению (14) при $\partial V / \partial q = 0$.

В. Осциллятор. $V = \frac{1}{2} m \omega_0^2 q^2$. В этом случае следует ввести переменную $z = q\xi / \Lambda^2$, где $\Lambda^2 = \hbar^* / m\omega_0$. Преобразуя уравнение (15) с помощью этой подстановки для специального случая гармонической зависимости $\hat{\rho}$ от t :

$$\rho(z, t) = \rho(z) e^{i\omega t}$$

получим уравнение

$$\frac{d^2 \rho}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d\rho}{dz} - \left(1 + \frac{\omega}{\omega_0} \frac{1}{z}\right) \rho = 0, \quad (18)$$

которое имеет решение^{x)}:

$$\rho(z) = e^{\pm z} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} \pm \frac{\omega}{\omega_0}; 1; \pm 2z\right). \quad (19)$$

* См. Ватсон Г.Н. Теория бесселевых функций, ч. I, ИЛ. М., 1949, стр. 110-119.

ЛЕКЦИЯ IV

Квантовая механика как обобщение классической статистической механики

Объектом применения квантовой механики является квантовый ансамбль. Подобно ансамблю Гиббса, квантовый ансамбль образован неограниченным повторением ситуаций, состоящих из определенной макроскопической обстановки "М", погруженной в эту обстановку микроскопической системы "μ". Рис. 2 может опять иллюстрировать это положение дел. Пусть система "μ" характеризуется набором переменных $L \equiv (L_1, L_2, \dots, L_f)$, f - число степеней сво-

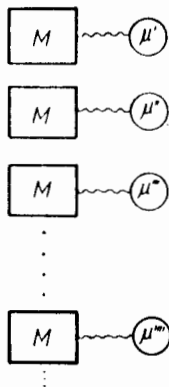


Рис.2. Ансамбль Гиббса. М - макроскопическая обстановка;

μ - система, погруженная в эту обстановку. Указанная ситуация воспроизводится много раз: $N \rightarrow \infty$.

бодн. Пусть в первом измерении $L = L'$, во втором $L = L''$, в n -м $L = L^{(n)}$ и т.д. Предполагается, что в этих условиях результаты измерений L имеют определенное воспроизводимое распределение $dW(L)$ (для непрерывной переменной $dW(L) = \rho(L)dL$). Однако это распределение основано на совсем новых законах движения, характерных для квантовых явлений.

Наиболее важной чертой квантового ансамбля является тот факт, что среднее квадратичное отклонение координаты Δq_s^2 не независимо от среднего квадратичного отклонения сопряженного ей импульса Δp_s^2 . Они связаны знаменитым соотношением "неопределенностей" В. Гейзенберга^{/6/}:

$$\overline{\Delta p_s^2} \overline{\Delta q_s^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (I)$$

Это соотношение может рассматриваться как математическое выражение принципа дополнительности Н. Бора. Согласно этому принципу динамические переменные, характеризующие микросистемы, распадаются на два взаимно дополняющих друг друга класса: класс пространственно-временных переменных (Q) и класс импульсно-энергетических переменных (P), относящихся к исключаящим друг друга, несовместимым измерениям. Из (I) следует, что никаким выбором результатов измерений нельзя получить квантовый ансамбль, в котором отсутствовала бы статистическая дисперсия по всем динамическим переменным, иными словами, ансамбль, в котором все динамические переменные L имели бы определенное значение $L = L'$.

Всегда найдутся переменные, для которых среднее квадратичное отклонение $\Delta L^2 \neq 0$.

Поэтому в квантовой области статистика неустранима в принципе.

Квантовую механику мы будем рассматривать как обобщение классической статистической механики, данной в координатном представлении, в двойном пространстве конфигураций $\mathcal{R}(q, q')$.

Суть необходимого обобщения заключается в замене коммутативной алгебры (III.12) динамических переменных и их функций на некоммутативную алгебру, в которой, вообще говоря, $AB \neq BA$. Эта программа реализуется путем замены классических компонент Фурье $A(q, \xi) \equiv A(q, q')$, изображающих классические динамические переменные в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$, на элементы матриц $\hat{A}(q, q')$, закон умножения $\hat{C} = \hat{A} \hat{B}$ которых гласит:

$$\hat{C}(q, q') \equiv \hat{A} \hat{B}(q, q') = \int \hat{A}(q, q'') \hat{B}(q'', q') dq'' \quad (2)$$

В общем случае теперь $\hat{A} \hat{B} \neq \hat{B} \hat{A}$, так что возникает новая некоммутативная алгебра.

Исходными динамическими переменными, характеризующими квантовую систему, являются канонические импульсы p_s ($s = 1, 2, \dots, f$), изображаемые теперь операторами \hat{p}_s , и сопряженные им координаты q_s ($s = 1, 2, \dots, f$), изображаемые операторами \hat{q}_s .

Другие динамические переменные, аналоги классических $\mathcal{L}(q, p)$, изображаются операторами $\hat{\mathcal{L}}$, которые являются функциями от операторов \hat{p}, \hat{q} :

$$\hat{\mathcal{L}} = \mathcal{L}(\hat{p}, \hat{q}). \quad (3)$$

Операторы, представляющие действительные физические величины, должны быть эрмитовыми, т.е.

$$\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{L}}^\dagger \quad (4)$$

Это условие в раскрытом виде гласит: $\hat{\mathcal{L}}(q, q') = \hat{\mathcal{L}}^*(q', q)$
 (* - знак комплексного сопряжения). Условие канонической
 сопряженности величин, изображаемых операторами \hat{p} , \hat{q} ,
 постулируется в форме

$$[\hat{p}_s, \hat{p}_r] = 0; [\hat{q}_s, \hat{q}_r] = 0; [\hat{p}_s, \hat{q}_r] = \delta_{sr}, \quad (5)$$

где $[\hat{A}, \hat{B}]$ есть квантовая скобка Пуассона:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \frac{i}{\hbar} (\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}). \quad (6)$$

Условия (5) должны рассматриваться как условия "квантования"
 соответствующих классических величин, впервые установленные
 В. Гейзенбергом^{x)}.

Операторы \hat{p} и \hat{q} , удовлетворяющие каноническим
 условиям (5), имеют вид (в представлении в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$):

$$\hat{p}(q, q') = i \hbar \frac{\partial \delta(q - q')}{\partial q}, \quad (7)$$

$$\hat{q}(q, q') = q' \delta(q' - q) \quad (7^I)$$

и отличаются от соответствующих классических обобщенных функ-
 ций p, q' и q, q' (П.5,6) только законом умножения (2)
 вместо (Ш.12) и заменой произвольной постоянной \hbar^* на пос-

x) История этого открытия освещена в журнале "Успехи физических
 наук" в связи с пятидесятилетием квантовой механики^{/7/}.

тоянную Планка \hbar . Доказательство того, что (7) и (7^I) удовлетворяют условиям (5), дано в дополнении II.

В соответствии с развиваемой программой построения квантовой механики предполагается, что квантовый ансамбль, состоящий из микросистемы "M", определяемый макроскопической обстановкой "M", описывается статистическим оператором, или "матрицей плотности":

$$\hat{\rho}_M = \hat{\rho}_M^+ \quad (3)$$

Мы будем пользоваться первым термином и обычно в сокращенной форме: статоператор $\hat{\rho}_M$. Этот оператор был введен фон Нейманом^{8/}. Он имеет в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$ матричные элементы $\rho_M(q, q')$ и играет в квантовой механике ту же роль, что и фурье-компонента плотности вероятности $\rho_M(q, \xi) = \rho_M(q, q')$ в классической статистической физике^{x)}. Оператор $\hat{\rho}$ нормируется на 1:

$$\text{Sp } \hat{\rho} = 1, \quad (3)$$

где знак Sp означает сумму диагональных элементов оператора (след матрицы). Связь с наблюдаемыми величинами устанавливается определением среднего значения \bar{L} величины L, изображаемой оператором \hat{L} , в ансамбле, описываемом статистическим оператором $\hat{\rho}$. Это определение гласит:

x) В последующем мы опускаем значок "M", но его неявное присутствие не должно забываться.

$$\bar{L} = \text{Sp}(\hat{p} \hat{L}).$$

(10)

В дополнении III показано, что эти формулы (9) и (10) отличаются от соответствующих формул классической статистической механики (III.9) и III.10) только изменением закона умножения.

Операторы \hat{L} и \hat{L}' считаются эквивалентными, т.е. представляющими одну и ту же физическую величину L , если они связаны друг с другом унитарным преобразованием

$$\hat{L}' = S \hat{L} S^{-1},$$

(11)

где S - унитарная матрица, а S^{-1} - обратная ей матрица, которые определяются соотношениями

$$S S^{-1} = S^{-1} S = 1; \quad S^{-1} = S^*,$$

(12)

т.е. комплексно-сопряженная матрица S^* равна обратной S^{-1} . Унитарное преобразование обладает важнейшим свойством: оно сохраняет канонические соотношения (5) так, что новые переменные $\hat{q}' = S \hat{q} S^{-1}$ и $\hat{p}' = S \hat{p} S^{-1}$ подчиняются также соотношениям (5) (см. дополнение IV). Поэтому унитарное преобразование можно также называть каноническим. Это преобразование оставляет также неизменным условие нормировки (9) и формулу для вычисления среднего (10), т.е. $\text{Sp} \hat{p}' = \text{Sp} \hat{p}$ и $\bar{L} = \bar{L}'$. Эти утверждения вытекают из известной возможности переставлять циклически множители, стоящие под знаком Sp (доказательство смотри в дополнении IV).

Рассмотрим теперь бесконечно малое унитарное преобразование динамических переменных. Такое преобразование может быть записано в виде

$$S = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{A} d\alpha} = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \hat{A} d\alpha + \dots \right), \quad (13)$$

где \hat{A} - некоторый эрмитов оператор $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, α - параметр преобразования. Подставляя (13) в формулу (II), получим

$$\hat{\psi}' = \hat{\psi} + [\hat{A}, \hat{\psi}] d\alpha. \quad (14)$$

Оператор $\frac{\hat{\psi}' - \hat{\psi}}{d\alpha}$ следует рассматривать как оператор $\frac{d\hat{\psi}}{d\alpha}$, представляющий производную оператора по α . Если оператор $\hat{\psi}$ явно зависит от α , то следует учесть частную производную $\partial\hat{\psi}/\partial\alpha$; таким образом, можно написать:

$$\frac{d\hat{\psi}}{d\alpha} = \frac{\partial\hat{\psi}}{\partial\alpha} + [\hat{A}, \hat{\psi}]. \quad (15)$$

Это важное соотношение позволяет придать смысл понятию производной оператора по параметру.

В классической механике движение можно рассматривать как последовательность бесконечно малых канонических преобразований от $q(t), p(t)$ к $q(t+\Delta t), p(t+\Delta t)$. Такое понимание движения переносится и в квантовую механику. Если в бесконечно малом унитарном преобразовании под параметром α разуметь время, то формула (15) определяет производную оператора по времени. Оператор \hat{A} в этом специальном случае называется оператором Гамильтона, $\hat{\mathcal{H}} = \mathcal{H}(\dots \hat{p} \dots \hat{q} \dots, t)$.

Он является характерным для каждой квантовой системы. В частном случае, когда этот оператор не зависит от времени t , он совпадает с оператором полной энергии системы. Согласно (15) будем иметь для оператора производной по времени

$$\frac{d\hat{Y}}{dt} = \frac{\partial \hat{Y}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{Y}]. \quad (16)$$

Если \hat{H} есть оператор полной энергии, то из (16) получается:

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = [\hat{H}, \hat{H}] = 0, \quad (17)$$

что выражает, на языке операторов, закон сохранения энергии.

Применяя (16) к статистическому оператору $\hat{\rho}$, получим

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (18)$$

По аналогии с законом движения для классической плотности

ρ (П. 12) на основании (18) постулируется закон движения для статистического оператора $\hat{\rho}$:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = 0, \quad \text{или} \quad \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0. \quad (19)$$

Из этого уравнения следует сохранение нормировки оператора

$$\hat{\rho} \quad (9)^x:$$

^{x)} Следует заметить, что при обращении с операторными формулами необходимо соблюдать осторожность: в некоторых случаях такие выражения, как $\text{Sp } \hat{A}$, могут расходиться, тогда полезно прибегать к ограничениям, а потом переходить к нужному пределу.

$$\text{Sp} \left(\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \text{Sp} \hat{\rho} = -\text{Sp} [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0. \quad (20)$$

Основное уравнение (19) допускает формальное решение (для случая $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$):

$$\hat{\rho}(t) = e^{i \frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{\rho}(0) e^{-i \frac{\hat{H}t}{\hbar}}, \quad (21)$$

где $\hat{\rho}(0)$ - статоператор при $t=0$, а $\hat{\rho}(t)$ - этот же оператор при $t>0$. Однако раскрытие лаконичной операторной записи (21) редко бывает легче решения уравнения (19), которое обычно оказывается дифференциальным уравнением в частных производных. Во многих важных задачах оператор Гамильтона может быть разложен на сумму:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}, \quad (22)$$

где \hat{H}_0 представляет энергию рассматриваемой квантовой системы, состоящей из двух или более частей, без взаимодействия их между собой, а \hat{W} - энергию их взаимодействия. \hat{H}_0 может также представлять энергию системы самой по себе ("свободной" системы), а \hat{W} - энергию ее взаимодействия с внешним полем. В этих случаях оказывается целесообразным перейти к представлению, называемому представлением взаимодействия. Оно определяется с помощью следующего унитарного преобразования:

$$\hat{\rho}' = e^{i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{\rho} e^{-i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}, \quad (23)$$

$$\hat{\mathcal{L}}' = e^{i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{\mathcal{L}} e^{-i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}, \quad (23')$$

и в отличие от (21) вычисление явного вида $\hat{\rho}'$ и $\hat{\mathcal{L}}'$ не представляет труда.

Энергия взаимодействия \hat{W} , конечно, преобразуется так же, как и любой другой оператор $\hat{\mathcal{L}}$:

$$\hat{W}' = e^{i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{W} e^{-i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}. \quad (24)$$

Операторы $\hat{\rho}'$, \hat{W}' , $\hat{\mathcal{L}}'$ будут теперь явно зависеть от времени даже и в том случае, если $\hat{\rho}$, \hat{W} , $\hat{\mathcal{L}}$ независимы от времени. Выражая $\hat{\rho}$ и \hat{W} через $\hat{\rho}'$ и \hat{W}' и подставляя эти выражения в (19), получим новое уравнение для

$$\hat{\rho}': \quad \frac{\partial \hat{\rho}'}{\partial t} + [\hat{W}', \hat{\rho}'] = 0. \quad (25)$$

Выгода этого уравнения в сравнении с (19) заключается в том, что оператор $\hat{\rho}'$ при слабом взаимодействии $\hat{W}'(t)$ медленно, спокойно зависит от времени (при $\hat{W}' = 0$ $d\hat{\rho}'/dt = 0$). Поэтому оно полезно при решении уравнения (19) методом теории возмущений.

ЛЕКЦИЯ V

Теория когерентного ансамбля

В этой лекции мы рассмотрим специальный, но очень важный класс квантовых ансамблей, который характеризуется тем, что статистический оператор подчиняется условию

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}. \quad (I)$$

Такой ансамбль называют "когерентным", или "чистым"^{x)}

^{x)} Термин "когерентный" ансамбль был введен К.В. Никольским^{/9/}, термин "чистый" ансамбль-фон Нейманом^{/8/}. Терминология К.В. Никольского, на мой взгляд, точнее отображает суть дела.

Рассмотрение такого ансамбля позволит нам ввести в теорию важнейшее понятие волновой функции и показать эквивалентность описания когерентного ансамбля с помощью статоператора $\hat{\rho}$ и с помощью волновой функции ψ . Рассмотрим среднее квадратичное отклонение какой-либо динамической переменной, изображаемой оператором \hat{Y} . Обозначим среднее его значение \bar{L} через λ . Оператор отклонения от среднего будет

$$\Delta Y = Y - \lambda, \text{ а оператор квадратичного отклонения } - \Delta Y^2.$$

Его среднее значение на основании общей формулы для среднего (IV.10) будет иметь вид

$$\overline{\Delta L^2} = \text{Sp}(\hat{\rho} \Delta Y^2). \quad (2)$$

В частном случае когерентного ансамбля (1) мы можем заметить в (2) $\hat{\rho}$ на $\hat{\rho}^2$; тогда получим:

$$\overline{\Delta L^2} = \text{Sp}(\hat{\rho}^2 \Delta Y^2). \quad (3)$$

Пользуясь возможностью циклической перестановки множителей над знаком Sp , заменим $\hat{\rho}^2 \Delta Y^2$ на $\Delta Y \cdot \hat{\rho} \cdot \hat{\rho} \cdot \Delta Y$. Обозначая теперь $\hat{C} = \Delta Y \hat{\rho}$, имеем $\hat{C}^+ = \hat{\rho}^+ \Delta Y^+$; в силу эрмитовости $\hat{\rho}$ и ΔY $\hat{C}^+ = \hat{\rho} \Delta Y$. Поэтому (3) можно переписать в виде

$$\overline{\Delta L^2} = \text{Sp}(C C^+). \quad (3I)$$

Рассмотрим теперь такой специальный случай, когда

$$\overline{\Delta L^2} = 0. \quad (4)$$

тогда из (3^I) следует

$$\int p(\hat{C} \hat{C}^+) = 0, \quad (5)$$

иными словами, такой ансамбль, в котором динамическая переменная

L имеет лишь одно определенное значение $L = \lambda$. Это возможно лишь в том случае, когда

$$\hat{C} = \hat{C}^+ = 0 \quad (6)$$

(см. дополнение V). Имея в виду определение операторов \hat{C} , \hat{C}^+ и оператора $\Delta \hat{L} = \hat{L} - \lambda$, получаем из (6) два уравнения:

$$\hat{L} \hat{\rho} = \lambda \hat{\rho} \quad \text{и} \quad \hat{\rho} \hat{L} = \lambda \hat{\rho}, \quad (7)$$

или в раскрытом виде:

$$\int \hat{L}(q, q'') \hat{\rho}(q'', q') dq'' = \lambda \hat{\rho}(q, q'), \quad (8)$$

$$\int \hat{\rho}(q, q'') \hat{L}(q'', q') dq'' = \lambda \hat{\rho}(q, q'). \quad (8^I)$$

Эти уравнения для матричных элементов статоператора $\hat{\rho}$ могут быть сведены к уравнению для "волновой" функции $\psi_\lambda(q)$ и уравнению для функции $\psi_\lambda^*(q')$, комплексно-сопряженной $\psi_\lambda(q')$.

Эти уравнения гласят:

$$\int \hat{L}(q, q'') \psi_\lambda(q'') dq'' = \lambda \psi_\lambda(q), \quad (9)$$

$$\int \psi_{\lambda}^*(q'') \hat{\mathcal{L}}(q'', q') dq'' = \lambda \psi_{\lambda}^*(q'). \quad (9^I)$$

В силу эрмитовости $\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{L}}(q'', q') = \hat{\mathcal{L}}^*(q', q'')$, так что уравнение (9^I) попросту комплексно-сопряжено к (9). Поэтому достаточно рассматривать только (9). Коротко оно записывается в виде

$$\hat{\mathcal{L}} \psi_{\lambda} = \lambda \psi_{\lambda}, \quad (10)$$

а искомым матричный элемент оператора $\hat{\mathcal{L}}$, принадлежащий значению $L = \lambda$, получает вид

$$\hat{\mathcal{L}}_{\lambda}(q, q') = \psi_{\lambda}(q) \psi_{\lambda}^*(q'). \quad (11)$$

Доказательство этой формулы приведено в дополнении (У). Статоператор (11), удовлетворяющий уравнениям (7), мы будем называть собственным статоператором оператора $\hat{\mathcal{L}}$. Из теории линейных уравнений с самосопряженными операторами ($\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{L}}^+$) известно, что уравнение (10) имеет корректные (регулярные) решения только для определенных значений параметра $\lambda = \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_S, \dots$. Эти значения называют собственными значениями оператора $\hat{\mathcal{L}}$, а соответствующие функции $\psi_{\lambda}(q)$ — его собственными функциями. Во многих случаях спектр собственных значений λ может быть и непрерывным или кусочно-непрерывным.

Собственные функции $\psi_{\lambda}(q)$, принадлежащие различным λ , ортогональны.

Они могут быть нормированы в пространстве $\mathcal{R}(q)$ на 1.

Последовательность функций $\psi_{\lambda_1}(q), \psi_{\lambda_2}(q) \dots \psi_{\lambda_n}(q)$... образует ортонормированную систему функций в функциональном пространстве Гильберта \mathcal{H} . Условие нормировки и ортогональности гласит:

$$\int \psi_{\lambda}(q) \psi_{\mu}^*(q) dq = \delta_{\lambda\mu} \quad (12)$$

для дискретного спектра λ ,

$$\int \psi_{\lambda}(q) \psi_{\lambda'}^*(q) dq = \delta(\lambda - \lambda') \quad (12^I)$$

для непрерывного спектра λ . Оба уравнения можно записать в виде символического скалярного произведения

$$\langle \psi_{\lambda}, \psi_{\mu} \rangle = \delta_{\lambda\mu}. \quad (13)$$

Собственные функции $\psi_{\lambda}(q)$ обладают также свойством полноты

$$\int \psi_{\lambda}(q) \psi_{\lambda}^*(q') d\lambda = \delta(q - q'), \quad (13^I)$$

которое можно записать кратко в виде символического разложения единицы по операторам проектирования:

$$\int d\hat{p}_{\lambda} = 1, \quad (13^{II})$$

где $d\hat{\rho}_\lambda = \psi_\lambda(q) \psi_\lambda^*(q') d\lambda$ для непрерывного спектра или $d\hat{\rho}_\lambda = \psi_\lambda(q) \psi_\lambda^*(q') \delta(\lambda - \lambda_n) d\lambda$ для дискретного ($\lambda = \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$). Мы не будем более подробно останавливаться на теории уравнения (10), поскольку она хорошо описана в традиционных курсах по квантовой механике.

Важно, что исходя из теории статистического оператора мы пришли к понятию собственных функций операторов \hat{Q} , образующих в пространстве Гильберта ортонормированные последовательности функций $\psi_\lambda(q)$. Это позволяет нам определить любую волновую функцию $\psi(q)$ - вектор в пространстве Гильберта посредством спектрального разложения по ортонормированным функциям $\psi_\lambda(q)$:

$$\psi(q) = \int \psi_\lambda(q) dC_\lambda, \quad (14)$$

где dC_λ - амплитуда волны $\psi_\lambda(q)$. Запись этого разложения в виде (14) пригодна как для непрерывного спектра, так и для дискретного. В первом случае $dC_\lambda = c(\lambda) d\lambda$; во втором $dC_\lambda = \sum_n c(\lambda) \delta(\lambda - \lambda_n) d\lambda$ и интеграл (14) переходит в сумму по дискретным значениям $\lambda = \lambda_n$, $c(\lambda) = c(\lambda_n) \equiv c_n$. Разложение (14) представляет собою представление любой волновой функции в виде когерентной суперпозиции частных волновых функций ψ_λ . Статоператор $\hat{\rho}$ когерентного ансамбля может быть построен не только на основе собственных функций $\psi_\lambda(q)$ какого-либо оператора \hat{Q} (см. (II)), но и на основе любой их когерентной суперпозиции (14):

$$\hat{\rho}(q, q') = \psi(q) \psi^*(q'). \quad (15)$$

Подставляя сюда $\psi(q)$ из (I4), мы увидим, что возникают интерференционные члены типа $\psi_\lambda(q)\psi_{\lambda'}^*(q')$. Это обстоятельство и послужило основанием для названия рассматриваемых ансамблей когерентными.

Нетрудно показать, что общий статоператор (I5), так же, как и более частный (II), оба удовлетворяют условию $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$.

Условие (I) позволяет назвать статоператор когерентного ансамбля оператором проектирования. Рассмотрим любой вектор в пространстве Гильберта $\Phi(q)$ и подействуем на него оператором $\hat{\rho}$ (I5), получим (см. дополнение (V)):

$$\hat{\rho} \Phi(q) = \psi(q) \langle \Phi, \psi \rangle, \quad (I6)$$

где $\langle \Phi, \psi \rangle$ есть определенное выше скалярное произведение. Из вектора $\Phi(q)$ оператор $\hat{\rho}$ (I5) вырезает кусок, параллельный $\psi(q)$, и длина функционального отрезка равна $\langle \Phi, \psi \rangle$. Это и есть проектирование Φ на ψ . Полагая в (I6) $\Phi(q) = \psi(q)$, получим

$$\hat{\rho} \psi(q) = \psi(q) \quad (I7)$$

(так как $\langle \psi, \psi \rangle = 1$). Из этого видно, что любой проекционный оператор имеет одно-единственное собственное значение λ , равное +1.

5 Отметим еще одну важную формулу: любой эрмитов оператор можно записать в виде разложения по операторам проектирования:

$$\hat{\mathcal{L}} = \int \lambda d\hat{p}_\lambda, \quad (18)$$

где λ - собственные значения оператора $\hat{\mathcal{L}}$, а статоператор \hat{p} есть собственный статоператор оператора $\hat{\mathcal{L}}$. (Оператор $d\hat{p}_\lambda$ был определен. Ранее соотношение (18) проверяется подстановкой (18) в (10).

В заключение этого раздела покажем, что развитие волновой функции $\psi(q)$ от времени подчиняется уравнению Шредингера.

Для этой цели применим уравнение движения для статоператора \hat{p} (IV.9) к специальному случаю когерентного ансамбля, когда элементы \hat{p} имеют вид $\psi(q)\psi^*(q')$. В раскрытом виде уравнение (IV.9) гласит:

$$\frac{\partial \hat{p}(q, q')}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \int \{ \hat{H}(q, q'') \hat{p}(q'', q') - \hat{p}(q, q'') \hat{H}(q'', q') \} dq'' = 0, \quad (19)$$

где $\hat{H}(q, q')$ означает матричный элемент оператора Гамильтона. Подставим в это уравнение $\hat{p}(q, q')$ в виде (15) и разделим результат на $\psi(q)\psi^*(q')$; соберем далее порознь члены, зависящие от q и q' . В результате получим:

$$\frac{1}{\psi(q)} \left[\frac{\partial \psi(q)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \int \hat{H}(q, q'') \psi(q'') dq'' \right] + \frac{1}{\psi^*(q')} \left[\frac{\partial \psi^*(q')}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} \int \psi^*(q'') \hat{H}(q'', q') dq'' \right] \stackrel{(21)}{=} 0.$$

Это равенство возможно только в том случае, если каждое из выражений, зависящих одно от q , другое от q' , постоянны и эти постоянные равны друг другу с обратным знаком. Если обозначить эту постоянную через $\frac{i}{\hbar} E_0$, то тот или иной вынос постоянной E_0 будет, как нетрудно проверить, означать выбор отсчёта потенциальной энергии. Поэтому без ограничения можно положить $E_0 = 0$. Тогда из (19) получаем уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q)}{\partial t} = \int \hat{H}(q, q'') \psi(q'') dq'' \quad (21)$$

и второе уравнение, комплексно-сопряжённое к приведенному.

Уравнение (20) есть уравнение Шредингера в координатном представлении.

Таким образом, доказано, что описания когерентного ансамбля статсеператором и волновой функцией эквивалентны одно другому.

В этой связи заметим, что волновую функцию нельзя считать величиной, которую можно приписать микрочастице самой по себе. Никаким способом она не может быть измерена путем измерения на одной частице. Волновая функция $\psi(q)$ так же, как и статсеператор $\hat{\rho}$, характеризует принадлежность микрочастицы к определенному квантовому ансамблю, суть которого была описана в IV -й лекции. Путем измерений в таком ансамбле, в случае когерентного ансамбля, волновая функция $\psi(q)$ в принципе может быть найдена из измерений, конечно, с точностью до постоянного нормированного множителя.

ЛЕКЦИЯ VI

Вероятности и квадратичные отклонения

Обратимся сначала к унитарным преобразованиям операторов $\hat{\rho}$ и \hat{Q} . В пространстве Гильберта такое преобразование можно рассматривать как поворот — переход от одной ортонормированной системы векторов $\psi_\lambda(q)$ к другой $\varphi_\mu(q)$.

Покажем теперь, что эти функции могут выступать и в другой роли: в роли матричных элементов унитарного преобразования S . Определим элементы этого преобразования посредством соотношения

$$S(\lambda, q) = \psi_\lambda^*(q), \quad (1)$$

а элементы обратного преобразования S^{-1} — через соотношения^{x)}

$$S^{-1}(q, \lambda) = \psi_\lambda(q). \quad (1^I)$$

Перемножим теперь матрицы (1) и (1^I), согласно закону умножения матриц будем иметь:

$$\begin{aligned} \int S(\lambda, q'') dq'' S^{-1}(q'', \lambda') &= \\ &= \int \psi_\lambda(q'') \psi_{\lambda'}^*(q'') dq'' = \delta(\lambda - \lambda'). \end{aligned} \quad (2)$$

^{x)} Заметим, что в формулах (2) и (1^I) строчки и колонки матриц нумеруются в разных пространствах $\mathcal{R}(\lambda)$ и $\mathcal{R}(q)$.

Условие полноты системы ортонормированных функций (IV.13) позволяет доказать также и равенство $S^{-1}S=1$. Именно из него следует, что

$$\int S^{-1}(q, \lambda'') S(\lambda'', q') d\lambda'' = \delta(q - q'). \quad (2I)$$

Далее, согласно (I) и (I^I) $S^{-1} = S^*$. Поэтому преобразование с матричными элементами (I) и (I^I) есть унитарное. Это преобразование позволяет нам переходить из одного представления операторов в другое. В частности, преобразование с элементами (I) и (I^I) позволяет переходить из координатного представления в пространстве переменных $q - \mathcal{R}(q)$ в пространство переменных $\lambda - \mathcal{R}(\lambda)$, которое есть пространство собственных значений некоторого оператора $\hat{\mathcal{L}}$, представляющего динамическую переменную L .

Если оператор $\hat{\mathcal{L}}$ задан в пространстве $\mathcal{R}(q)$ своими матричными элементами $\hat{\mathcal{L}}(q, q')$, то унитарное преобразование (I) приведет его к диагональному виду. Действительно, элементы преобразованного оператора $\hat{\mathcal{L}}'$ равны элементам $S \hat{\mathcal{L}} S^{-1}$. В раскрытом виде элементы оператора $\hat{\mathcal{L}}'$ в "L" - представлении (в пространстве $\mathcal{R}(\lambda)$)

имеют вид

$$\hat{\mathcal{L}}'(\lambda, \lambda') = \int \psi_{\lambda}^*(q) dq \hat{\mathcal{L}}(q, q') \psi_{\lambda'}(q') dq dq' =$$

$$= \lambda' \int \psi_{\lambda}^*(q) \psi_{\lambda'}(q') dq dq' = \lambda' \delta(\lambda - \lambda'). \quad (3)$$

В случае дискретного спектра $\lambda = \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$ элементы $\hat{\mathcal{L}}'$ имеют вид

$$\hat{\mathcal{L}}'(n, m) = \lambda_{nm} \delta_{mn}, \quad (3I)$$

где n - номер собственного значения λ . При выводе (3) и (3^I) было использовано то обстоятельство, что ψ_λ есть собственная функция оператора \hat{L} , т.е. уравнение (У.10).

Преобразуем теперь путем этого же унитарного преобразования стат-оператор $\hat{\rho}$, заданный первоначально в пространстве $\mathcal{R}(q)$ формулой (У.15). Элементы оператора $\hat{\rho}'$ в "L"-представлении согласно определению унитарного преобразования (I), (I^I) будут равны:

$$\hat{\rho}'(\lambda, \lambda') = \int \psi_\lambda^*(q) \psi(q) \psi^*(q') \psi_{\lambda'}(q') dq dq'. \quad (4)$$

Подставляя сюда $\psi(q)$ в виде суперпозиции (I4), получим

$$\hat{\rho}'(\lambda, \lambda') = c(\lambda) c^*(\lambda') \quad (5)$$

в случае непрерывного спектра λ и

$$\hat{\rho}'(n, m) = c(n) c^*(m) \quad (5^I)$$

в случае дискретного спектра λ . Эти формулы дают элементы статоператора $\hat{\rho}$ в "L"-представлении.

Воспользуемся теперь этими формулами, чтобы вычислить среднее от величины L в состоянии, описываемом статоператором $\hat{\rho}$ в "L"-представлении. Как было показано ранее, унитарное преобразование не меняет следа матриц:

$$Sp(\hat{\rho} \hat{L}) = Sp(\hat{\rho}' \hat{L}').$$

Это означает, что в формуле для среднего значения величины

L , измеряемой в ансамбле, мы можем написать произведение $\hat{\rho} \hat{L}$ в форме произведения $\hat{\rho}' \hat{L}'$, взятых теперь в "L'"-представлении. В раскрытом виде след этого произведения равен

$$\bar{L} = \text{Sp} (\hat{\rho} \hat{L}) = \int \hat{\rho}(\lambda, \lambda'') \hat{L}(\lambda'', \lambda) d\lambda'' d\lambda.$$

Замечай, что в "L" - представлении матрица \hat{L} диагональна $\hat{L}(\lambda, \lambda'') = \lambda \delta(\lambda - \lambda'')$, получаем из (6):

$$\bar{L} = \int \lambda d\hat{\rho}(\lambda, \lambda) \quad (7)$$

при условии $\text{Sp} \hat{\rho} = 1$, т.е. при условии

$$\int d\hat{\rho}(\lambda, \lambda) = 1. \quad (7I)$$

В случае непрерывного спектра $d\hat{\rho}(\lambda, \lambda) = |c(\lambda)|^2 d\lambda$, а в случае дискретного спектра $d\hat{\rho}(\lambda, \lambda) = \sum_n |c(n)|^2 \delta(\lambda - \lambda_n) d\lambda$. Поэтому имеем для этих случаев:

$$\bar{L} = \int \lambda |c(\lambda)|^2 d\lambda, \quad (8)$$

или

$$\bar{L} = \sum_n \lambda_n |c(n)|^2. \quad (8I)$$

Сравним эти выражения с общим определением среднего, принятым в теории вероятностей.

Среднее значение случайной величины L , принимающей значения $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$, с вероятностью $P_1, P_2, \dots, P_n, \dots$ ($\sum P_n = 1$), равно

$$\bar{L} = \sum_n \lambda_n P_n. \quad (9)$$

Сравнивая (8) с (9), мы видим, что величину $|c(n)|^2$ мы обязаны трактовать как вероятность наблюдения в ансамбле $\hat{\rho}$ значения динамической переменной $L = L_n$, т.е.

$$P_n = |c(n)|^2 \quad (10^1)$$

Нетрудно видеть, что в случае непрерывного спектра вероятность того, что $\lambda \leq L \leq \lambda + \Delta\lambda$, будет равна

$$P(\lambda) d\lambda = |c(\lambda)|^2 d\lambda. \quad (10)$$

Рассмотрим теперь две динамические величины, L и M , изображаемые операторами \hat{L} и \hat{M} соответственно. нас будет интересовать случай, когда

$$[\hat{L}, \hat{M}] = \hat{C} \neq 0. \quad (11)$$

Пусть ансамбль будет когерентным и определяется статоператором

$$\hat{\rho}(q, q') = \psi(q) \psi^*(q'). \quad (12)$$

Если волновая функция $\psi(q)$ не является собственной функцией ни того, ни другого оператора, то ясно, что в таком ансамбле ни величина L , ни величина M не имеют определенного значения. Поэтому $\overline{\Delta L^2} > 0$ и $\overline{\Delta M^2} > 0$. Установим соотношения между этими квадратичными отклонениями.

В дополнении (VI) показано, что если \hat{A} и \hat{B} — два эрмитовских оператора, а \hat{C} — их коммутатор, $\hat{C} = [\hat{A}, \hat{B}]$, то имеет место соотношение

$$\overline{\hat{A}^2} \overline{\hat{B}^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} |\overline{\hat{C}^2}|, \quad (13)$$

где $\overline{\hat{A}^2}$, $\overline{\hat{B}^2}$ суть средние значения квадратов операторов \hat{A} и \hat{B} (х). Полагая в (13) $\hat{A} = \hat{Q} - \bar{L}$ и $\hat{B} = \hat{M} - \bar{M}$, где \bar{L} и \bar{M} - среднее значение величин Q и M соответственно, получим замечательное соотношение:

$$\overline{\Delta L^2} \overline{\Delta M^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} |[\hat{Q}, \hat{M}]|^2. \quad (14)$$

В частности, если $\hat{Q} = \hat{p}_s$ и $\hat{M} = \hat{q}_s$, пользуясь условием квантования (IV.5), получим соотношение Гейзенберга в самой общей форме:

$$\overline{\Delta p_s^2} \overline{\Delta q_s^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \delta_{s2}. \quad (15)$$

Существование соотношений вида (14) и фундаментального соотношения (15), как уже отмечалось ранее, показывает, что никаким выбором подансамблей \hat{P}_λ когерентного ансамбля \hat{Q} невозможно получить ансамбль, в котором все средние квадратичные отклонения были бы равны нулю.

Как видно из (14), если коммутатор (II^I) равен нулю, то возможно одновременное равенство $\overline{\Delta L^2} = \overline{\Delta M^2} = 0$, т.е. обе величины, L и M , могут иметь определенные значения, λ и μ . Из равенства нулю коммутатора (II^I) следует, что уравнения для собственных функций операторов \hat{Q} и \hat{M} :

х) При условии, что эти средние величины конечны.

$$\hat{\mathcal{L}}\psi = \lambda\psi, \quad (I6)$$

$$\hat{\mathcal{M}}\psi = \mu\psi,$$

(I6^I)

могут быть удовлетворены одной общей волновой функцией ψ . Чтобы убедиться в этом, следует подействовать на уравнение (I6) оператором $\hat{\mathcal{M}}$, а на уравнение (I6^I) — оператором $\hat{\mathcal{L}}$ и взять разность результатов.

ЛЕКЦИЯ УП

Некогерентный ансамбль

Рассмотрим такую ситуацию, когда не определено, какому некогерентному ансамблю $\hat{\rho}_\lambda$ из возможных в заданной макроскопической обстановке \mathcal{M} принадлежит частица "μ". Однако мы будем предполагать, что нам известны вероятности того, что частица "μ" может оказаться принадлежащей соответствующему когерентному ансамблю $\hat{\rho}_\lambda$.

Вероятности P_λ являются постоянными числами ($P_\lambda \geq 0$, $\sum P_\lambda = 1$), характеризующими заданную информацию о квантовом ансамбле. Набор статоператоров $\hat{\rho}_\lambda$ и вероятностей P_λ ($\lambda=1, 2, \dots, N$) может быть заменен одним статоператором $\hat{\rho}$ характеризующим самый общий квантовый ансамбль:

$$\hat{\rho} = \sum_{\lambda=1}^N P_\lambda \hat{\rho}_\lambda, \quad (I)$$

$$\hat{\rho}_\lambda(q, q') = \psi_\lambda(q) \psi_\lambda^*(q'). \quad (I^I)$$

Такой ансамбль называют некогерентным или смешанным^{х)}.

Основанием для такого названия является то обстоятельство, что в волновые функции $\psi_\lambda(q)$, определяющие когерентные подансамбли, складываются в (I) своими интенсивностями $|\psi_\lambda(q)|^2$ (при $q=q'$) и поэтому не интерферируют между собой. Напомним, что в когерентном ансамбле складываются амплитуды волновых функций с учётом их фаз:

$$\psi(q) = \sum_{\lambda} \psi_{\lambda}(q).$$

Частные операторы проекции \hat{P}_{λ} , определяющие полный статоператор $\hat{\rho}$ для некогерентного ансамбля (I), ортогональны друг другу:

$$\hat{P}_{\lambda} \hat{P}_{\mu} = 0, \quad \lambda \neq \mu \quad (2)$$

и определяют статистически независимые события.

Поэтому сумма вероятностей P_{λ} , входящих в определение $\hat{\rho}$ (1), подчиняется условию вероятностей независимых событий:

$$\sum_{\lambda} P_{\lambda} = 1. \quad (3)$$

Собственные значения операторов \hat{P}_{λ} , как и всякого оператора проекции, равны +1. В силу этого факта собственные значения оператора $\hat{\rho}$ (1) равны вероятностям $P_1, P_2, \dots, P_{\lambda}, \dots, P_N$. Поэтому оператор $\hat{\rho}$ (1), будучи приведен к диагональному виду, приобретает вид:

х) Термин "смешанный" принадлежит фон Нейману. Термин "некогерентный" - К.В. Никольскому.

$$\hat{\rho} = \begin{vmatrix} P_1 & & 0 \\ & P_2 & \\ 0 & & \dots & P_N \end{vmatrix}. \quad (4)$$

Заметим, что общая запись оператора (I), пригодная как для непрерывного, так и для дискретного спектра, гласит:

$$\hat{\rho} = \int P(\lambda) d\rho_\lambda, \quad (5)$$

при этом, конечно, $d\rho_\lambda$ не обязательно задавать в координатном представлении в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$. Посредством унитарного преобразования можно перейти к любому другому представлению "M".

Если собственные значения $M_1, \dots, M_n, \dots, M_m$ оператора \hat{M} дискретны, то оператор $\hat{\rho}$ в пространстве $\mathcal{R}(M, M')$ приобретает вид

$$\hat{\rho}(n, m) = \sum_{\lambda} P_{\lambda} \psi_{\lambda}(n) \psi_{\lambda}^*(m), \quad (6)$$

где $\psi_{\lambda}(n)$ суть амплитуды в разложении

$$\psi_{\lambda}(q) = \sum_n \psi_{\lambda}(n) \Phi_n(q), \quad (6^I)$$

а $\Phi_n(q) (n=1, 2, \dots)$ - собственные функции оператора \hat{M} . В силу того, что вероятности P_{λ} входят в матрицу $\hat{\rho}$ линейно и не зависят от времени, а только от нашей информации об ансамбле, то все соотношения и уравнения, уста-

повленные ранее для когерентного ансамбля, остаются верными и для ансамбля некогерентного, конечно, за исключением условия $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, характерного только для когерентного ансамбля.

В некогерентном ансамбле имеем:

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 \hat{\rho}_{\lambda}. \quad (7)$$

Собственные значения $\hat{\rho}^2$ суть $P_{\lambda}^2 < 1$.

Вычислим теперь среднее квадратичное отклонение какой-либо величины L , изображенной оператором \hat{L} .

Если среднее значение L есть \bar{L} , то

$$\begin{aligned} \overline{\Delta L^2} &= \text{Sp}[\hat{\rho}(\hat{L} - \bar{L})^2] = \sum_{\lambda} P_{\lambda} \text{Sp} \rho_{\lambda} (\hat{L} - \bar{L})^2 = \\ &= \sum_{\lambda} P_{\lambda} \text{Sp} \hat{\rho}_{\lambda} \{ (\hat{L} - \bar{L}_{\lambda})^2 + (\bar{L} - \bar{L}_{\lambda})^2 \} = \\ &= \sum_{\lambda} P_{\lambda} [\overline{\Delta L_{\lambda}^2} + (\bar{L} - \bar{L}_{\lambda})^2], \end{aligned} \quad (8)$$

где \bar{L}_{λ} есть среднее значение L в подансамбле $\hat{\rho}_{\lambda}$, $\overline{\Delta L_{\lambda}^2}$ есть среднее квадратичное отклонение в том же подансамбле, величина $(\bar{L} - \bar{L}_{\lambda})^2$ есть дополнительная статистическая дисперсия, характерная для некогерентного ансамбля.

Эта дополнительная дисперсия устранима применением анализатора, разлагающего некогерентный ансамбль $\hat{\rho}$ на когерентные подансамбли $\hat{\rho}_{\lambda}$, которые уже не разложимы на бездисперсионные подансамбли.

Обратимся теперь к уравнению движения для оператора $\hat{\rho}$ (I). Из постоянства вероятностей P_{λ} мы заключаем, что уравнение движения для статоператора $\hat{\rho}$ некогерентного ансамбля не будет отличаться от уравнения движения для статоператора когерентного ансамбля (IV.19). Действительно:

$$\frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = \sum_{\lambda} P_{\lambda} \frac{\partial \hat{P}_{\lambda}}{\partial t} = - \sum_{\lambda} P_{\lambda} [\hat{H}, \hat{P}_{\lambda}] = - [\hat{H}, \sum_{\lambda} \hat{P}_{\lambda}] \quad (9)$$

Поэтому уравнение

$$\frac{\partial \hat{P}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{P}] = 0 \quad (9^I)$$

сохраняет своё значение и для самого общего квантового ансамбля, каким является ансамбль некогерентный. В этом выводе строго учитывается требование $\partial P_{\lambda} / \partial t = 0$. Подчеркнем еще раз, что величины P_{λ} меняются только с изменением нашей информации. Разумеется, если эта информация меняется очень медленно, например, термостат, в который загружена система "M", очень медленно меняет свою температуру θ , и если при этом наша микросистема "M" приходит в тепловое равновесие, то в формуле (9) величины $P_{\lambda} = P_{\lambda}(\theta)$, $\theta = \theta(t)$, можно считать зависящими от времени, пренебрегая все же величиной $\partial P_{\lambda} / \partial t$.

Если же изменения температуры θ быстрые, то и сам термостат нужно изучать средствами квантовой механики и определить новую макроскопическую обстановку "M'", такую, что "M" погружено теперь в "M'". Новая обстановка "M'" должна быть достаточно стабильна, как и всякая хорошая система отсчёта.

Рассмотрим теперь, как изменяется с течением времени вероятность $\rho(n, t)$ найти в момент времени t значение какой-либо динамической величины L , равное λ . Для

определённости будем считать, что спектр оператора \hat{L} дискретный: $L = \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots, \lambda_m$.

Вероятность $\rho(n, t)$, по определению, равна диагональному элементу матрицы $\hat{\rho}$, взятой в "L" - представлении:

$$\rho(n, t) = \hat{\rho}(n, n; t) \equiv \langle n | \hat{\rho}(t) | n \rangle. \quad (10)$$

Часто интересуются не самой вероятностью, а скоростью её изменения со временем. Ответ на этот вопрос даётся непосредственно уравнением (9), которое удобнее для нашей цели написать в представлении взаимодействия. Согласно (1У.25) в этом представлении уравнение (9) приобретает вид

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{W}(t), \hat{\rho}] = 0, \quad (11)$$

где \hat{W} - энергия взаимодействия, из этого уравнения следует

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(n, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \langle n | \hat{\rho}(t) | n \rangle = -\frac{i}{\hbar} \sum_{n''} \{ \langle n | \hat{W}(t) | n'' \rangle \\ &\langle n'' | \hat{\rho} | n \rangle - \langle n | \hat{\rho} | n'' \rangle \langle n'' | \hat{W}(t) | n \rangle \} = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{n''} \{ \langle n | \hat{W}(t) | n'' \rangle \langle n'' | \hat{\rho} | n \rangle - \\ &\quad - \langle n'' | \hat{\rho} | n \rangle^* \langle n | \hat{W}(t) | n'' \rangle^* \}, \quad (12) \end{aligned}$$

откуда

$$\frac{\partial \rho(n, t)}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \text{Im} \langle n | \hat{W}(t) \hat{\rho}(t) | n \rangle. \quad (13)$$

Если было известно, что при $t=0$ система " μ " находилась в состоянии $L=L_m$, так что при $t=0$ $\hat{\rho}(0) = \delta_{nm}$, то формула (13) даст вероятность перехода системы " μ " в единицу времени из состояния m в состояние n .

Эта вероятность имеет простой вид в том случае, когда можно ограничиться первым исчезающим приближением теории возмущения. В этом приближении из уравнения (11) будем иметь

$$\frac{\partial \langle n | \hat{\rho}(t) | n \rangle}{\partial t} = \langle n | [\hat{W}(t), \hat{\rho}(0)] | m \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle n | \hat{W}(t) | m \rangle \langle m | \rho(0) | m \rangle. \quad (14)$$

Имея в виду, что $\hat{\rho}(0) = \delta_{nm}$, получаем отсюда

$$\langle n | \hat{\rho}(t) | m \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle n | \hat{W}(\tau) | m \rangle d\tau \quad (15)$$

и, наконец, подставляя это выражение в (12), находим

$$\frac{\partial \rho(n, t)}{\partial t} = \frac{\partial \langle n | \hat{\rho}(t) | n \rangle}{\partial t} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d}{dt} \left| \int_0^t \langle n | \hat{W}(\tau) | m \rangle d\tau \right|^2. \quad (16)$$

Эта известная формула теории квантовых переходов определяет в первом приближении вероятность перехода системы в единицу времени из состояния с $L=L_m$ в состояние с $L=L_n$.

ЛЕКЦИЯ УШ

Уравнение движения для статоператора в различных представлениях

Рассмотрим уравнения движения для статоператора $\hat{\rho}$,

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0, \quad (1)$$

в раскрытом виде в координатном представлении в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$.

Ограничимся случаем одной степени свободы. Соответственно этому возьмем оператор функции Гамильтона (оператор полной энергии) в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}), \quad (2)$$

где \hat{p} — оператор импульса, m — масса частицы, $V(\hat{q})$ — оператор потенциальной энергии. В координатном представлении матричные элементы этого оператора имеют вид

$$\hat{H}(q, q') = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \delta(q - q')}{\partial q'^2} + V(q') \delta(q - q'). \quad (3)$$

Подставляя это выражение в (1) и применяя правила умножения матриц, используя при этом интегрирование по частям, получим

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(q, q')}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \hat{\rho}(q, q')}{\partial q^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \hat{\rho}(q, q')}{\partial q'^2} + \{V(q) - V(q')\} \hat{\rho}(q, q') = 0. \quad (4)$$

Если ввести новые переменные $\xi = q' - q$ и $Q = \frac{1}{2}(q' + q)$, то получается

$$\frac{\partial \hat{\rho}(Q, \xi)}{\partial t} - \frac{i\hbar}{m} \frac{\partial^2 \hat{\rho}}{\partial Q \partial \xi} + \frac{i}{\hbar} \left\{ V\left(Q + \frac{\xi}{2}\right) - V\left(Q - \frac{\xi}{2}\right) \right\} \hat{\rho}(Q, \xi) = 0. \quad (5)$$

Это уравнение формально можно записать в виде разложения по степеням ξ :

$$\frac{\partial \hat{\rho}(Q, \xi)}{\partial t} - \frac{i\hbar}{m} \frac{\partial^2 \hat{\rho}}{\partial Q \partial \xi} + \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{\partial V}{\partial Q} \xi + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n V}{\partial Q^n} \xi^n \right\} \cdot \rho(Q, \xi) = 0. \quad (5^I)$$

Уравнение (5^I) переходит в уравнение для классической плотности $\rho(q, p)$, представленной в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$.

Действительно, если потенциал $V(Q)$ и матрица $\hat{\rho}(Q, \xi)$ достаточно гладкие функции, то в (5^I) можно пренебречь высшими производными $\partial^n V / \partial Q^n$, начиная с $n=2$.

В этом случае уравнение (5^I) отличается от соответствующего уравнения классической статистической механики заменой в (Ш.15) произвольной постоянной \hbar^* на постоянную Планка \hbar .

В этой связи заметим ещё одно важное представление для статоператора $\hat{\rho}$. Подобно тому как классическую плотность $\rho(q, p')$ можно представить в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$, так и квантовый оператор $\hat{\rho}(q, q')$ можно представить в пространстве фаз $\mathcal{R}(q, p)$. Для этой цели колонки матрицы $\hat{\rho}(q, q')$ будем нумеровать не переменной q' , а переменной p .

Это можно достигнуть, если выполнить "половинное" унитарное преобразование, вводя вместо $\hat{\rho}(q, q')$ величину $\hat{\rho}(q, p)$, определенную преобразованием колонки (q'):

$$\hat{\rho}(q, p) = \int \hat{\rho}(q, q'') S(q'', p) dq''. \quad (6)$$

где матрица унитарного преобразования S имеет элементы

$$S(q, p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i \frac{pq}{\hbar}}. \quad (7)$$

В таком представлении, называемом "смешанным", квантовые операторы отображаются в пространство фаз $\mathcal{R}(q, p)$ и возникает новая связь с классической статистической механикой (см. /1, 10, 11, 12/).

Было замечено, что целесообразней вместо матричных элементов $\hat{\rho}(q, p)$ ввести новые элементы, отличающиеся (6) множителем $e^{-ipq/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$, не обращающимся нигде ни в 0, ни в ∞ .

Эти новые элементы мы обозначим через $R(q, p)$:

$$R(q, p) = \hat{\rho}(q, p) e^{-ipq/\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (8)$$

Такому преобразованию следует подчинить и все другие операторы. Вместо матричных элементов $\hat{\mathcal{L}}(q, q')$ будем иметь

$$L(q, p) = \hat{\mathcal{L}}(q, p) e^{-ipq/\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (9)$$

и

$$\hat{\mathcal{L}}(q, p) = \int \hat{\mathcal{L}}(q, q'') e^{ipq''/\hbar} \frac{dq''}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (10)$$

Пользуясь этими преобразованиями, нетрудно убедиться, что новые матричные элементы $L(q, p)$ в простейших случаях в точности совпадают с соответствующими классическими величинами. Именно,

$$p_{q,p} = p \quad \text{и} \quad q_{q,p} = q, \quad (11)$$

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + V(q). \quad (12)$$

Доказательство см. в дополнении УП.

Там же показано, что формула для среднего значения величины $L(q,p)$ принимает "классический" вид:

$$\bar{L} = \int R^*(q,p) L(q,p) dq dp. \quad (13)$$

Вероятность найти систему "μ" в точке (q) пространства конфигураций $\mathcal{R}(q)$ имеет также классический вид:

$$p(q) = \int R(q,p) dp. \quad (14)$$

Подобным же образом для импульсного пространства

$$g(p) = \int R(q,p) dq \quad (15)$$

при условии нормировки

$$\int R(q,p) dq dp = 1. \quad (16)$$

Однако $R(q,p)$ не является вероятностью найти систему "μ" в точке (q,p) фазового пространства $\mathcal{R}(q,p)$.

что противоречило бы принципу дополнительности. Это обстоятельство находит своё выражение в том, что величина $\hat{R}(q, p)$, как можно доказать, всегда комплексная, т.е. что

$$R(q, p) \neq R^*(q, p). \quad (17)$$

В силу линейности выполнимых преобразований уравнение движения (I) сохраняется и для величины $\hat{R}(q, p)$:

$$\frac{\partial \hat{R}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{R}] = 0. \quad (18)$$

Однако конкретный вид операторной скобки Пуассона $[\hat{H}, \hat{R}]$ совершенно меняется. Именно, в раскрытом виде уравнение (18) теперь гласит (см. дополнение VII):

$$\frac{\partial R(q, p)}{\partial t} + \int e^{i\xi\eta/\hbar} \{ H(q, p+\eta) R(q+\xi, p) - R(q, p+\eta) H(q+\xi, p) \} d\xi d\eta \quad (19)$$

Если заметить, что интеграл

$$I_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi\eta/\hbar} \xi^n \eta^m d\xi d\eta = (i\hbar)^{n+m} m! \delta_{nm} \quad (20)$$

имеет приведенное в (20) конечное значение, то можно разложить в (19) $H(q+\xi, p+\eta)$ и $R(q+\xi, p+\eta)$ по степеням ξ и η и выполнить интегрирование по этим переменным. Тогда получается (см. дополнение)

$$\frac{\partial R(q,p)}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial R(q,p)}{\partial q} - \frac{\partial V}{\partial q} \frac{\partial R(q,p)}{\partial p} =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 R(q,p)}{\partial q^2} + \sum_{n \geq 2} \frac{(-i\hbar)^{n-1}}{n!} \cdot$$

$$\cdot \frac{\partial^n V(q)}{\partial q^n} \frac{\partial^n R(q,p)}{\partial p^n} \quad (2I)$$

В случае достаточной гладкости функций $R(q,p)$ и $V(q)$ можно пренебречь правой частью в (2I). При этом условии уравнение (2I) для $R(q,p)$ превращается в уравнение для классической плотности $\rho(q,p)$. Представление квантовой механики в пространстве фаз $R(q,p)$ сближает её с классической статистической механикой в том же пространстве.

Это позволяет нам сделать вывод о том, что обе теории, классическая и квантовая, работают в одинаковых пространствах:

$$R(q, q') \text{ и } R(q, p) \text{ х).$$

Некоторое расширение набора динамических переменных, характеризующих микроскопические системы " μ ", по сравнению с набором классических переменных происходит за счет дискретных квантовых переменных, таких, как механический спин частицы $\vec{\sigma}$ или её изотопический спин $\vec{\tau}$. Непрерывные же переменные полностью уместаются в классических пространствах.

х) Возможно ещё и представление в импульсном пространстве

$$R(p, p').$$

ЛЕКЦИЯ IX

Симметрии в системах тождественных частиц

Система " μ ", состоящая из N тождественных частиц, обладает симметриями, имеющими фундаментальное значение для физики микрочастиц.

Оператор Гамильтона \hat{H} такой системы должен быть симметричным относительно перестановок частиц. Это свойство гамильтониана есть математическое выражение самого понятия тождественности частиц: тождественные частицы одинаково взаимодействуют между собой и со внешними полями, имеют одинаковые массы, заряды и другие признаки. Если через P_{ik} обозначить операцию перестановки i -й и k -й частиц, то для тождественных частиц имеет место равенство

$$P_{ik} \hat{H} = \hat{H}.$$

(I)

Однако это тривиальное соотношение, справедливое, кстати сказать, и в классической механике, в квантовой области ведёт к особым последствиям. Для выяснения этих последствий следует обратиться к изучению возможных симметрий статоператора $\hat{\rho}$ для случая N тождественных частиц. Ясно, что оператор $\hat{\rho}$ может быть симметричным в отношении перестановки частиц. Нетривиальная симметрия относится к перестановкам $P_{ik}(q)$ и $P_{ik}(q')$, переставляющим частицы только в строках матрицы $\hat{\rho}(q, q')$ и только в её колонках соответственно. Если вспомнить, что любой статоператор $\hat{\rho}$ есть сумма билинейных выражений типа $\psi(q)\psi^*(q')$, где $\psi(q)$ есть волновая функция, то перестановки частиц $P_{ik}(q)$ и $P_{ik}(q')$ означают перестановки частиц в волновой функции $\psi(q)$ и

соответственно в функции $\psi^*(q')$. Поэтому симметрия статоператора при подобных перестановках полностью определяется симметрией волновых функций $\psi(q)$.

Рассмотрим волновые функции N тождественных частиц $\psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_k, \dots, q_N)$, являющиеся собственными функциями оператора перестановки P_{ik} :

$$P_{ik} \psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_k, \dots, q_N) = \lambda \psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_i, \dots, q_N), \quad (2)$$

где λ — собственное значение оператора P_{ik} . Применяя к уравнению (2) вторично перестановку P_{ik} и замечая, что $P_{ik}^2 = 1$, приходим к заключению, что $\lambda^2 = 1$. Следовательно, возможные собственные значения оператора перестановки равны $\lambda = \pm 1$.

Поэтому волновые функции системы тождественных частиц распадаются на два класса: класс симметричных функций $\psi_s(q)$ и класс антисимметричных функций $\psi_a(q)$. Для этих функций имеем

$$P_{ik} \psi_s(\dots q \dots) = +\psi_s(\dots q \dots); \quad P_{ik} \psi_a(q) = -\psi_a(q) \quad (3)$$

для любой пары частиц i, k . Соответственно этим двум классам волновых функций возникает два класса статоператоров для систем тождественных частиц: \hat{P}_s и \hat{P}_a , построенных на функциях $\psi_s(q)$ или $\psi_a(q)$. Матрица $\hat{P}_s(q, q')$ имеет структуру суммы $\psi_s(q) \psi_s^*(q')$, а матрица $\hat{P}_a(q, q')$ имеет структуру суммы $\psi_a(q) \psi_a^*(q')$. Первая симметрична относительно перес-

тановок $P_{ik}(q)$, $P_{ik}(q')$. Вторая антисимметрична относительно этих же перестановок.

В обоих случаях статоператоры \hat{P} симметричны относительно перестановок частиц $P_{ik} = P_{ik}(q)P_{ik}(q')$. Рассмотренные свойства симметрии статоператора не зависят от представления. В приведенных выше рассуждениях под переменными q можно понимать не только координаты частиц, но и любые другие переменные L , которые полностью характеризуют состояние микросистемы "μ".

При изменении статоператора с течением времени симметрия статоператора сохраняется. Согласно основному уравнению движения приращение статоператора \hat{P} за время dt равно

$$d\hat{P} = - [\hat{H}, \hat{P}] dt. \quad (4)$$

В силу симметрии оператора \hat{H} при перестановке частиц скобка Пуассона имеет симметрию или \hat{P}_a , или \hat{P}_s . Вместе с тем $d\hat{P}$ имеет симметрию $d\hat{P}_a$ или $d\hat{P}_s$ соответственно (см. подробнее дополнение УШ).

Поэтому если в какой-то момент времени оператор \hat{P} принадлежал классу симметричных \hat{P}_s или к классу антисимметричных \hat{P}_a статоператоров, то это его свойство инвариантно при движении. Деление операторов на два класса носит абсолютный характер.

В согласии с опытными данными ансамбли частиц с целым спином принадлежат к классу симметричных ансамблей, ансамб-

ли частиц с полуцелым спином принадлежат к классу антисимметричных ансамблей^{x)}.

В соответствии с этим делением различают два типа квантовых статистических ансамблей - две статистики: статистику Бозе-Эйнштейна (ρ_s) и статистику Ферми-Дирака (ρ_a). В случае статистики Бозе-Эйнштейна:

$$P_{ik}(q) \hat{\rho}_s = + \rho_s ; \hat{\rho}_s P_{ik}(q') = + \hat{\rho}_s. \quad (5)$$

В случае статистики Ферми-Дирака

$$P_{ik}(q) \hat{\rho}_a = - \hat{\rho}_a ; \hat{\rho}_a P_{ik}(q') = - \hat{\rho}_a. \quad (5^I)$$

для любой пары частиц (i, k) . Заметим, что свойства симметрии на языке оператора $\hat{R}(q, p)$, описывающего квантовый ансамбль в фазовом пространстве $\mathcal{R}(q, p)$, выражаются более сложно. Именно:

$$P_{ik} \hat{R}(q, p) = \pm \hat{R}(q, p) e^{\frac{i(p_i - p_k)(x_i - x_k)}{\hbar}}. \quad (6)$$

Это при перестановке координат. При перестановке импульсов знак у фазы противоположный. При перестановке частиц $\hat{R}(q, p)$ не меняется. В предыдущих лекциях указывалось, что квантовое уравнение движения для статоператора $\hat{\rho}(t)$

x) Это разделение может быть теоретически обосновано в квантовой теории поля^{/12/}.

формально переходит в классическое при $\hbar \rightarrow 0$ и при достаточной гладкости потенциала и начального статоператора $\hat{\rho}(0)$.

В этой связи следует подчеркнуть, что свойства симметрии не могут исчезать при $\hbar \rightarrow 0$. Симметричный или антисимметричный статоператор обычно будет содержать существенную особенность по \hbar как параметру. Это свойство ясно видно из формулы (6), когда статоператор дан в пространстве фаз $\mathcal{R}(q, p)$.

Поясним суть дела простым примером. Пусть имеются две тождественные свободные частицы, 1 и 2, имеющие координаты x_1 и x_2 и импульсы p_1 и p_2 . Несимметризованная волновая функция ψ имеет вид произведения двух волн:

$$\psi(x_1, x_2) = e^{i p_1 x_1 / \hbar} e^{i p_2 x_2 / \hbar} \quad (7)$$

Диагональный элемент соответствующего статоператора

$$\hat{\rho}(x_1, x_2; x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2) \psi^*(x_1, x_2). \quad (7I)$$

Для симметризованных состояний

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ e^{i p_1 x_1 / \hbar} e^{i p_2 x_2 / \hbar} \pm e^{i p_2 x_1 / \hbar} e^{i p_1 x_2 / \hbar} \right\}. \quad (8)$$

Здесь знак выбирается в зависимости от статистики. Отсюда получим:

$$\hat{\rho}_{a,s}(x_1, x_2; x_1, x_2) = 1 + \cos \left\{ \frac{(p_1 - p_2)(x_1 - x_2)}{\hbar} \right\}. \quad (8I)$$

При $\hbar \rightarrow 0$ возникают осцилляции, частота которых неограниченно нарастает; точка $\hbar = 0$ есть существенно особая точка.

Рассмотренный здесь пример реализуется в природе при рассеянии одинаковых частиц, например протона на протоне (случай статистики Ферми-Дирака), или при рассеянии α -частиц на He (случай статистики Бозе-Эйнштейна).

При определенном классическом рассмотрении, когда точность измерений недостаточна, чтобы различать области фазового пространства $\mathcal{R}(q, p)$ размером $|(p_1 - p_2)(x_1 - x_2)| \cong \hbar$, осциллирующий член в (8^I) становится ненаблюдаемым, но не исчезает сам по себе^{/11/}.

ЛЕКЦИЯ X

Энтропия и информация

В статистической термодинамике энтропия S системы определяется известной формулой Гиббса

$$S = -k \sum_{\lambda} P_{\lambda} \ln P_{\lambda}, \quad \sum_{\lambda} P_{\lambda} = 1, \quad (I)$$

где k - постоянная Больцмана, а P_{λ} суть вероятности возможных состояний (λ) системы. Согласно (VII.4) вероятности P_{λ} суть собственные значения статоператора $\hat{\rho}$. Поэтому формулу (I) можно записать в виде, инвариантном относительно выбора представления статоператора $\hat{\rho}$, а именно, в виде ^{x)}

$$S = -k \text{Sp}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}); \quad \text{Sp} \hat{\rho} = 1. \quad (2)$$

^{x)} Эти формулы впервые даны фон Нейманом (см. /8/).

Собственное и единственное значение оператора $\hat{\rho}$ для когерентного ансамбля есть $P_\lambda = 1$. Поэтому энтропия для когерентного ансамбля равна нулю:

$$S = 0. \quad (3)$$

Для некогерентного ансамбля, как следует из (1),

$$S > 0. \quad (4)$$

С другой стороны, когерентный и некогерентный ансамбли отличаются с кибернетической точки зрения различным содержанием информации.

Когерентный ансамбль содержит максимум информации о микросистеме "K", совместимый с принципом дополнительности.

Такой ансамбль, несмотря на наличие в нем статистической дисперсии, является максимально упорядоченным ансамблем, поэтому его энтропия равна нулю и не может быть уменьшена.

Некогерентный ансамбль путем отбора результатов измерений может быть разбит на чистые, когерентные ансамбли $\hat{\rho}_\lambda$, в каждом из которых энтропия $S_\lambda = 0$.

Мерой информации I в теории информации принимается величина, пропорциональная разности энтропий $-I_3/$:

$$I \cong S \text{ (до измерения), } -S \text{ (после измерения)}. \quad (5)$$

При этом энтропию S обычно измеряют в единицах информации -

в битах. Если перейти к этим единицам, то (5) переписывается в виде

$$I = H(\text{до измерения}) - H(\text{после измерения}). \quad (6)$$

Величина

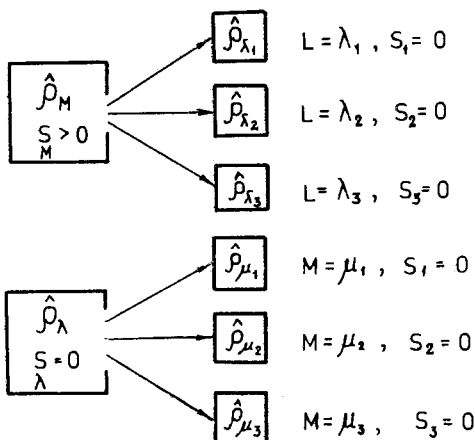
$$H = - \sum_{\lambda} P_{\lambda} \ln_2 P_{\lambda} = \frac{S}{k \ln 2} \quad (7)$$

принимается за меру неопределенности информации. Если имеются только две возможности, то $P_{\lambda} = 1/2$ и, следовательно, $H = 1$ бит.

Рис. За иллюстрирует измерения в некогерентном ансамбле, определяемом статоператором $\hat{\rho}_M$. Энтропия этого ансамбля $S_M > 0$. После измерений величины L , имеющей собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$, все экземпляры микросистемы "μ", имеющие $L = \lambda_1$, помещают в первый ящик, экземпляры, имеющие $L = \lambda_2$, - во второй ящик и т.д. После этой операции внутри каждого ящика номера S имеется когерентный ансамбль частиц с $L = \lambda_s$. Энтропия этого ансамбля $S_s = 0$. Сумма энтропий всех этих ансамблей $S = 0$.

В рассматриваемом случае S' (до измерений) = $S_M > 0$, S (после измерений) = $\sum S_s = 0$. Информация I оказывается положительной: $I = S / k \ln 2 > 0$.

На рис. 3 иллюстрируется также измерение в когерентном ансамбле. Предполагается, что ансамбль задан значением некоторой динамической переменной $L = \lambda$, описываемой оператором \hat{L} . Ансамбль S_{λ} является когерентным; в этом ансамбле $\overline{\Delta L^2} = 0$. Мы будем интересоваться некоторой другой динамической переменной M описываемой оператором \hat{M} , причем предполагается, что



- Рис.3 а) Измерение в некогерентном ансамбле. Исходная энтропия $S_M > 0$. После измерения величины L в каждом ящике с определенным $L = \lambda$ $S_\lambda = 0$. Объем информации возрос.
- б) Измерение в когерентном ансамбле. Исходная энтропия $S_\lambda = 0$. После измерения величины M в каждом ящике энтропия $S_\mu = 0$. Объем информации не изменился.

$$[\hat{L}, \hat{M}] \neq 0.$$

(8)

В силу соотношения (VI. 14) в исходном ансамбле $\overline{\Delta M^2} > 0$. Если собственные значения оператора \hat{M} есть $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_s, \dots$, а собственные функции суть $\varphi_\mu(q)$, то волновая функция $\psi_\lambda(q)$, описывающая исходный ансамбль, есть когерентная суперпозиция функций $\varphi_\mu(q)$:

$$\Psi_{\lambda}(q) = \sum_{\mu} c_{\lambda}(\mu) \varphi_{\mu}(q). \quad (9)$$

Анализатор прибора раскладывает эту суперпозицию на пучки, каждый с определенным значением $M = \mu_s$. Экземпляры с определенным M собираем в соответствующие "ящики". Таким путем из одного чистого исходного ансамбля $\hat{\rho}_{\lambda}$ возникло несколько чистых, когерентных ансамблей $\hat{\rho}_{\mu_1}, \hat{\rho}_{\mu_2}, \dots, \hat{\rho}_{\mu_n}, \dots$. Во всех этих ансамблях энтропия равна нулю.

Поэтому полученная информация I в этом случае равна нулю.

Этот результат не должен казаться странным, так как во вновь возникших когерентных ансамблях $\overline{\Delta M^2} = 0$, но $\overline{\Delta L^2} > 0$. Мы получили информацию о величине M , но потеряли информацию о величине L . В частности, если L и M - канонически сопряженные величины, то

$$[\hat{L}, \hat{M}] = 1, \quad (10)$$

$$\overline{\Delta L^2} \cdot \overline{\Delta M^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (11)$$

Измерять изменения информации, сопровождающие измерения в когерентных квантовых ансамблях, в терминах энтропии уже невозможно, поскольку она все время остается равной нулю. Поделим (11) на $\hbar^2/4$ и введем безразмерные квадратичные дисперсии $\overline{\Delta L^2}$ и $\overline{\Delta M^2}$. Беря \ln от полученного выражения, найдем:

$$(-\ln \overline{\Delta L^2}) + (-\ln \overline{\Delta M^2}) \leq 0. \quad (12)$$

Если каждое из слагаемых рассматривать как меру информации о величинах L и M (соответственно) в когерентном ансамбле, то (12) указывает верхнюю границу для этой информации и взаимную дополняемость информации об L и M .

В заключение этого раздела приведем некоторые формулы относящиеся к квантовому ансамблю, находящемуся в равновесии с термостатом температуры $\theta = kT$ (T - абсолютная температура). Макроскопическая обстановка M вполне определяется этим термостатом.

Это равновесный квантовый ансамбль Гиббса. Распределение в этом случае является каноническим:

$$P_{\lambda} \sim e^{-E_{\lambda}/\theta}, \quad (13)$$

где E_{λ} - энергия микросистемы " μ " в состоянии λ .
Условие нормировки $\sum_{\lambda} P_{\lambda} = 1$ приводит к выражению

$$P_{\lambda} = e^{-\frac{F(\theta) - E_{\lambda}}{\theta}}, \quad (14)$$

где $F(\theta)$ есть свободная энергия системы. Из условия нормировки на 1 имеем

$$e^{F/\theta} = z^{-1}(\theta); \quad z(\theta) = \sum_{\lambda} e^{-E_{\lambda}/\theta}. \quad (15)$$

$z(\theta)$ называется суммой состояний.

Из формулы (1) для энтропии, подставляя туда P_{λ} из (14), найдем

$$S = -k \left\{ \frac{F}{\theta} - \frac{\bar{E}}{\theta} \right\} = \frac{\bar{E} - F}{T}, \quad (16)$$

где \bar{E} — это средняя энергия системы. Из (16) следует известная формула $F = \bar{E} - TS$. Статистический оператор для канонического ансамбля имеет матричные элементы:

$$\hat{\rho}_{\theta}(q, q') = \sum_{\lambda} e^{\frac{F - E_{\lambda}}{\theta}} \psi_{\lambda}(q) \psi_{\lambda}^*(q'), \quad (17)$$

где $\psi_{\lambda}(q)$ — это собственная функция оператора энергии \hat{H} .

$$\hat{H} \psi_{\lambda}(q) = E_{\lambda} \psi_{\lambda}(q). \quad (18)$$

Отсюда

$$f(\hat{H}) \psi_{\lambda}(q) = f(E_{\lambda}) \psi_{\lambda}(q). \quad (19)$$

Это соотношение позволяет записать (18) в символическом виде:

$$\hat{\rho}_{\theta} = e^{F/\theta} \int e^{-\hat{H}(q)/\theta} d\hat{p}_{\lambda}, \quad (20)$$

и, следовательно, величина $\hat{R}_{\theta} = -\hat{\rho}_{\theta}^{-1} \frac{\partial \hat{\rho}_{\theta}}{\partial \beta}$ удовлетворяет уравнению:

$$\frac{\partial \hat{R}}{\partial \beta} = \hat{H}(q) \hat{R}. \quad (21)$$

Здесь $\beta = 1/\theta$. Это уравнение замечательным образом совпадает с уравнением Шредингера с "мнимым" временем $t = i\hbar\beta$. Причем $t=0$ отвечает $\beta=0$, т.е. бесконечно высокой температуре θ .

Теория открытых систем и процесс измерения

Под открытой квантовой системой понимается система A с ограниченным числом степеней свободы f_A , взаимодействующая с другой системой B , имеющей неограниченное (или очень большое) число степеней свободы f_B . Обозначим координаты системы A через $x \equiv (x_1, \dots, x_{f_A})$, а координаты системы B — через $Q \equiv (q_1, \dots, q_{f_B})$; $f_B \gg 1$. Пусть состояния системы A сосредоточены в гильбертовом пространстве \mathcal{A} , в котором заданы ортонормированные функции $\psi_\alpha(x)$. Состояния системы B сосредоточены в пространстве \mathcal{B} , в нем заданы ортонормированные функции $\varphi_\beta(Q)$. α означает динамические переменные системы A , а β — динамические переменные системы B . Оператор Гамильтона всей системы ($A+B$) обозначим через \hat{H} ,

$$\hat{H} = \hat{H}_A(x) + \hat{H}_B(Q) + \hat{W}_{AB}(x, Q), \quad (1)$$

где $H_A(x)$ — гамильтониан изолированной системы A , $H_B(Q)$ — гамильтониан изолированной системы B ; $\hat{W}_{AB}(x, Q)$ — энергия взаимодействия систем A и B . Предполагается, что для $t \leq 0$ $\hat{W}_{AB}(x, Q) = 0$. В момент $t=0$ состояние системы A определяется статоператором $\hat{\rho}_A(0)$ (определен в пространстве \mathcal{A}), а состояние системы B определяется статоператором $\hat{\rho}_B(0)$ (определенным в пространстве \mathcal{B}).

Статороператор для всей системы обозначим через \hat{P}_{AB} ; этот оператор действует в пространстве $\sigma \otimes \delta$. Согласно предположению при $t=0$ имеем:

$$\hat{Q}_{AB}(0) = \hat{Q}_A(0) \cdot \hat{P}_B(0). \quad (2)$$

Чтобы найти оператор $\hat{Q}_{AB}(t)$, описывающий состояние взаимодействующей системы (A+B) для $t > 0$, необходимо решить уравнение

$$\frac{\partial \hat{Q}_{AB}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{Q}_{AB}] = 0 \quad (3)$$

с начальным условием (2) и гамильтонианом (1).

Решение уравнений подобного типа, содержащих большое число переменных (система B), представляет собой труднейшую математическую проблему. Существенный вклад в одоление этих трудностей был сделан Н.Н.Боголюбовым /14,15/.

Формальное решение уравнения (3) может быть записано с помощью унитарного преобразования

$$\hat{P}_{AB}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{Q}_A(0) \hat{P}_B(0) e^{-i\hat{H}t}, \quad (4)$$

где \hat{H} - оператор Гамильтона (1). Это же решение может быть записано в виде ряда Тейлора по степеням времени t :

$$\hat{P}_{AB}(t) = e^{\hat{H}t} \hat{Q}_A(0) \hat{P}_B(0), \quad (5)$$

где \hat{Z} — оператор взятия скобок Пуассона (т.е. $\hat{Z}\hat{q} \equiv [\hat{H}, \hat{q}]$). Разлагая (5) по степеням t , получим ряд, коэффициенты которого суть n -кратные ($n = 0, 1, 2, \dots$) скобки Пуассона. Эти скобки имеют смысл n -й производной по времени от \hat{q} : $\hat{Z}^n \hat{q} = d^n q / dt^n$. Поэтому представление (5) эквивалентно ряду Тейлора.

Часто интересуются не столько совместным состоянием систем А и В, сколько состоянием малой системы А. Статоператор $\hat{P}_A(t)$, определяющий состояние системы А, в момент времени t , при любом состоянии системы В, выражается через статоператор $\hat{P}_{AB}(t)$ с помощью формулы

$$\hat{P}_A(t) = S_P^{(B)} \hat{P}_{AB}(t), \quad (6)$$

где след $S_P^{(B)}$ берется только по переменным системы В (т.е. в пространстве \mathcal{L}).

Построить точное уравнение движения только для оператора $\hat{P}_A(t)$ невозможно. Однако возможны различные приближения. Если влиянием системы А на большую систему В можно пренебречь, то $\hat{P}_B(t) = \hat{P}_B(0)$ и, следовательно, $\hat{P}_{AB}(t) = \hat{P}_A(t) \hat{P}_B(0)$. Подставляя это выражение для статоператора в уравнение (3) и замечая, что

$$S_P^{(B)} \hat{P}_B(0) = 1; S_P^{(B)} [\hat{H}_B, \hat{P}_B(0)] = 0 \quad (7)$$

получим уравнение для $\hat{P}_A(t)$:

$$\frac{\partial \hat{\rho}_A(t)}{\partial t} + [\hat{H}_A, \hat{\rho}_A(t)] + [\hat{W}_A, \hat{\rho}_A(t)] = 0, \quad (8)$$

где оператор \hat{W}_A равен

$$\hat{W}_A = S_P^{(B)} \hat{W}_{AB} \quad (9)$$

и представляет собой взаимодействие \hat{W}_{AB} , усредненное по состояниям системы В. В таком приближении система В создает некоторое внешнее поле, действующее на систему А. Нетрудно доказать, что из условия $\hat{W}_{AB} = \hat{W}_{AB}^+$ следует эрмитовость $\hat{W}_A = \hat{W}_A^+$ и сохранение нормировки

$$\frac{d}{dt} S_P \hat{\rho}_A = 0. \quad (10)$$

Возможность сведения общего уравнения (3) к "управляющему" уравнению (8) (система В управляет системой А) представляет собой серьезное упрощение проблемы, но все же оно может быть очень полезным в тех случаях, когда существенно среднее поле, создаваемое системой В^{х)}. Такое приближение может быть взято также в качестве нулевого приближения с тем, чтобы позднее учесть отклонения координат системы В от их средних значений.

Возможны и такие любопытные случаи, когда система В может быть описана классической статистической механикой. В этом случае состояние системы В задается плотностью $\rho(q, p)$ в фазовом пространстве $\mathcal{R}(q, p)$ или в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$ посредством фурье-образа $\tilde{\rho}(q, \xi)$; $\xi = q' - q$ (см. лекцию III).

^{х)} Например А — атом, погруженный в электронную плазму В.

По поводу теории открытых систем существует обширная литература. Помимо классических работ Н.Н.Боголюбова^{/14,15,16,} приводим еще несколько^{/17,18,19,20/}.

Важным классом открытых систем являются системы, в которых малая, микроскопическая система А управляет состоянием большой, макроскопической системы В.

Такая ситуация осуществляется во всех измерительных приборах, предназначенных для измерений в области квантовых, микроскопических явлений^{х)}; образно можно сказать, что микросистема "μ" обязана в этом случае сдвинуть "стрелку" прибора, поставив ее в положение, определяемое микросистемой "μ". Ясно, что такое течение явлений возможно лишь в том случае, когда измерительный прибор (большая система В) является макроскопически неустойчивой системой. В противном случае частица "μ" (малая система А) не сможет изменить макроскопическое состояние большой системы В из-за недостаточности у нее энергии и импульса.

Найдем условия, налагаемые на статоператор, описывающий процедуру измерения. Пусть малая система А есть микрочастица "μ", описываемая динамическими переменными $X = (X_1, X_2, \dots, X_f)$, а система В есть макроскопически неустойчивая система, описываемая переменными $Q = (Q_1, Q_2, \dots, Q_N)$ (N - большое число). Эта система и будет служить

^{х)}Существуют макроскопические квантовые системы, например, сверхпроводники и сверхтекучие жидкости. В дальнейшем они не обсуждаются.

измерительным прибором. При $t=0$ их общий статоператор $\hat{\rho}_{AB}(0)$ имеет вид (2), причем $\hat{\rho}_A(0)$ и $\hat{\rho}_B(0)$ имеют матричные элементы:

$$\hat{\rho}_A(0) = \langle x | \hat{\rho}_A | x' \rangle, \quad \hat{\rho}_B(0) = \langle q | \hat{\rho}_B | q' \rangle. \quad (11)$$

Оператор $\hat{\rho}_B(0)$ описывает неустойчивое состояние системы В при $t=0$. Оператор $\hat{\rho}_{AB}(t)$ вычисляется из уравнения (3), которое в представлении взаимодействия принимает вид

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{AB}(t)}{\partial t} + [\hat{W}_{AB}(t), \hat{\rho}_{AB}(t)] = 0. \quad (12)$$

Для краткости обозначим матричные элементы оператора $\hat{\rho}_{AB}(t)$ через $\rho(x, q | x', q'; t)$, где чертой отделены строчки от колонок. Разложим этот оператор по собственным функциям некоторого оператора $\hat{L}(x)$, который представляет измеряемую величину L , имеющую собственные значения L_n и собственные функции $\psi_n(x)$. Тогда получим:

$$\rho(x, q | x', q'; t) = \sum_{n,m} R_{nm}(q | q'; t) \psi_n(x) \psi_m^*(x') \quad (13)$$

Макроскопическая система В будет служить измерительным прибором для измерения величины L , присущей микрочастице "μ", если с течением времени t исчезнут интерференционные члены в (13), т.е. требуется, чтобы для некоторого $t > T_1 > 0$

$$R_{nm}(q | q'; t) = 0, \quad n \neq m. \quad (14)$$

Тем самым выполняется условие о том, что прибор действует как спектральный анализатор, разлагая общее состояние в спектр по "пучкам" $\psi_n(x)$, каждый с определенным значением $L=L_n$. Иными словами, статоператор (19) превращается в статоператор, представляющий смесь состояний по признаку $l=L_n$ для $t > T_1$:

$$\rho(x, Q | x', Q'; t) = \sum_n R_n(Q | Q'; t) \psi_n(x) \psi_n^*(x') \quad (15)$$

Интересующие нас вероятности того или иного состояния нашей системы определяются диагональными членами этого статоператора. Из (21) видно, что эти члены будут равны:

$$\rho(x, Q | x, Q; t) = \sum_n R_n(Q | Q; t) |\psi_n(x)|^2 \quad (16)$$

В дальнейшем с течением времени, скажем, при $t > T_2 > T_1 > 0$, наш прибор должен свести сумму (16) к одному члену. Допустим, что пространство переменных $Q \in \mathcal{R}(Q)$ может быть разбито на непересекающиеся области $\Omega_n(Q) \in \mathcal{R}(Q)$, такие, что если $Q \in \Omega_n$, то при $t > T_2$ все $R_m(Q | Q; t) = 0$, кроме $R_n(Q | Q; t)$.

Интегрируя тогда (16) по переменным Q , найдем для системы "μ":

$$\begin{aligned} \rho_\mu(x, t) &= \int_{\mathcal{R}(Q)} \rho(x, Q | x, Q; t) dQ = \\ &= P_n |\psi_n(x)|^2, \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$P_n = \int_{\Omega_n} R_n(Q|Q; t) dQ \quad (18)$$

есть вероятность того, что измеряемая величина L равна L_n и микрочастица " μ " находится в состоянии, описываемом функцией $\psi_n(x)$.

При этом система B сосредоточивается в некоторой области $\Omega_n(Q)$ пространства $\mathcal{R}(Q)$. В силу предполагаемой макроскопичности B число переменных Q_s есть большое число N . Сосредоточение их в области Ω_n означает изменение макроскопического состояния B , которое может быть выражено в макроскопических терминах, например, сосредоточение переменных Q в области Ω_n означает изменение температуры, силы тока, цвета и т.п. Микрочастица " μ " (система A) не может вызвать таких глобальных изменений системы B , если в ней заранее не была заложена неустойчивость.

Эта неустойчивость может быть электрической, термодинамической, механической и т.п.

Работа измерительного прибора при $t > T_2$, приводящая к исчезновению всех $R_m(Q|Q; t)$, кроме $R_n(Q|Q; t)$ (т.е. все Q лежат в Ω_n), есть вторая функция измерительного прибора - функция детектора.

Из практики эксперимента хорошо известно, что все детекторы суть системы неустойчивые. Например, искровая камера неустойчива электрически; пузырьковая камера или камеры Вильсона неустойчивы термодинамически. Во всех случаях детектирование состояния микрочастицы является "взрывом"

макроскопической системы, инициированной микрочастицей /21/ .
 Разделение функций измерительного прибора на функции
 анализатора (А) и функции детектирования (D) может быть
 иллюстрировано рис.4. Источник частиц S и диафрагма OO'
 есть макроскопическая обстановка M , задающая состояние
 \hat{Q}_M частиц пучка "μ". Дифракционная решетка
 является анализатором А .

Здесь ставится вопрос: что хотим измерять? Детекторы
 D_1, D_2, \dots отвечают на вопрос, в каком именно состоянии
 оказалась частица "μ" . На языке оптики: какого она

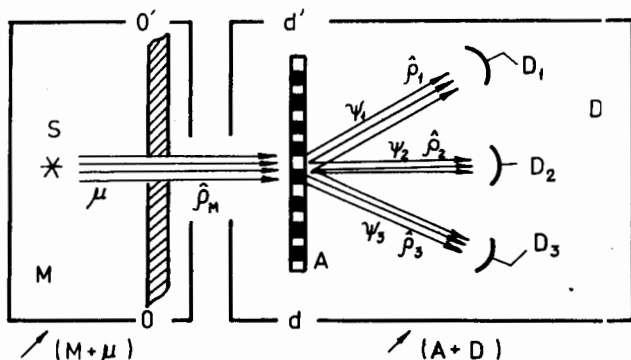


Рис.4. Схема типичного измерения. Обстановка M создана
 источником S и диафрагмой DD' . Образуется пучок
 μ . Это M + μ . Дифракционная решетка d(d')
 разлагает пучок \hat{Q}_M в спектр по признаку $L = \lambda_1, \lambda_2, \dots$
 Это анализатор А. Детекторы на пучках D_1, D_2, \dots
 образуют детекторную систему D . Внешними контурами
 обведены (μ+M) и (A+D) .

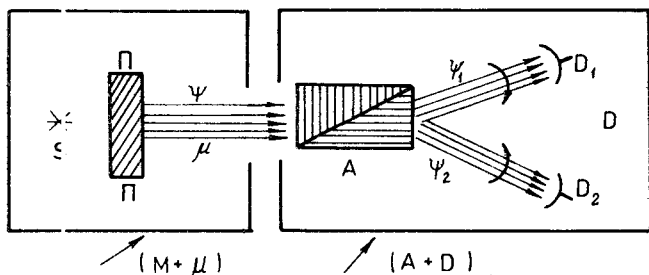


Рис.5. Измерение в когерентном ансамбле. S - источник частиц, PP - поляризатор. (Система $(M + \mu)$). Анализатор раскладывает исходный пучок на пучки ψ_1 и ψ_2 с различной круговой поляризацией. D_1, D_2 - детекторы частиц различной поляризации.

цвета? В этом примере источник измеряет "белый" свет. Статистический оператор \hat{P}_M описывает некогерентный ансамбль:

$$\hat{P}_M = \sum_{\lambda} P_{\lambda} \hat{P}_{\lambda}. \quad (25)$$

Анализатор A разлагает этот некогерентный ансамбль на "чистые" ансамбли $\hat{P}_1, \hat{P}_2, \dots$. Фазовые соотношения между различными цветами были нарушены уже в исходном ансамбле, и после анализатора пучки разного цвета остались некогерентными.

Рассмотрим другой случай, когда исходный ансамбль является когерентным ансамблем, описываемым волновой функцией $\psi = a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2$. Состояния ψ_1 и ψ_2 отличаются правой и левой поляризациями. На рис.5 изображена схема постановки опыта для измерения поляризации частиц.

Исходное состояние Ψ создается поляризатором Π , который вместе с источником частиц " μ " играет роль макроскопической обстановки \mathcal{M} . Анализатор A разлагает Ψ на право- (Ψ_1) и лево- (Ψ_2) поляризованные пучки. В этом случае пучки Ψ_1 и Ψ_2 остаются когерентными и их можно вновь свести в когерентный пучок Ψ .

Детекторы D_1 и D_2 , будучи макроскопическими системами, нарушают эту когерентность, более того, их роль обязательно сопровождается необратимыми процессами, увеличением энтропии. Это увеличение энтропии, как было разъяснено в лекции IX, есть плата за информацию.

В рассмотренных выше примерах исходная макроскопическая обстановка \mathcal{M} и вместе с ней сам исходный ансамбль ($\mathcal{M} + \mu$) задается экспериментатором. Это, конечно, особый случай. Квантовые ансамбли существуют в природе и сами по себе, независимо от экспериментаторов. Они существовали и тогда, когда вообще никаких экспериментаторов не было на свете /1,2/.

Примером природного ансамбля является ансамбль космических лучей. Этот ансамбль определяется солнечной деятельностью и магнитным полем Земли. В этом случае экспериментатор ставит своей задачей выяснить природу ансамбля, уяснить состав частиц и спектр их энергий на входе лучей, за атмосферой (т.е. определить $\hat{\rho}_M(0)$) и изучить дальнейшее развитие этого ансамбля (это означает - определить $\hat{\rho}_M(t)$). Время t отсчитывается в этом случае высотой H , на которой изучается ансамбль. Частицы космических лучей имеют скорость, близкую к скорости света c , поэтому $t = (H - H_0)/c$, где H_0 - какая-нибудь заатмосферная высота (см. рис. 6). При этом изучаются, конечно,

разные экземпляры частиц "μ". Но все они объединены принадлежностью к одному квантовому ансамблю, описываемому статоператором $\hat{\rho}_M(0)$. На рис.6 это важное обстоятельство отмечено указанием на то, что из N падающих первичных частиц N_1 употребляются для измерений на высоте H_0 (для получения информации о $\hat{\rho}_M(0)$), а N_2 частиц идут на измерения на высоте H (для получения информации о $\hat{\rho}_M(t)$). Другим интересным примером природного квантового ансамбля является природный атомный реактор, обнаруженный недавно

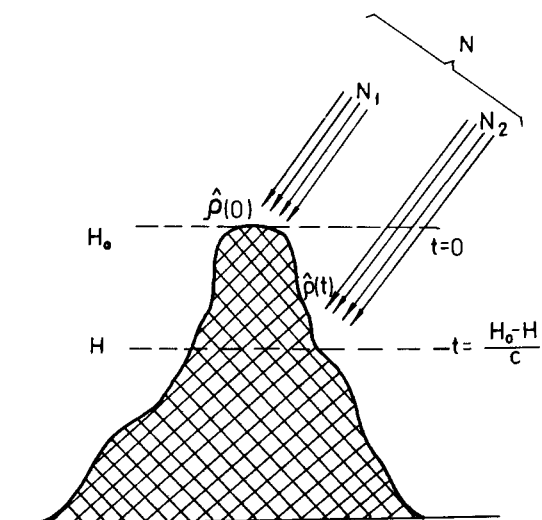


Рис.6. Космические лучи исследуют на большой высоте H_0 с целью выяснения их первичного состава (это определение $\hat{\rho}(0)$); изучая их на меньших высотах H , получают сведения об их развитии (это определение $\rho(t)$).

в Габоне (Западная Африка), который существовал примерно 2 миллиарда лет тому назад и работал около более полмиллиона лет^{/14/}.

Взвду, где в природе протекают квантовые процессы, мы имеем дело с квантовыми ансамблями. Такие ансамбли обычно принадлежат к числу некогерентных и открытых ансамблей.

ЛЕКЦИЯ XII

Простейший пример взаимодействия микрочастицы с измерительным прибором

Рассмотрим измерение, относящееся к микрочастице " μ ", которая имеет массу M . Ее координату обозначим через x (простоты ради ограничиваемся одним измерением); ее импульс — через k . Предположим, что исходное состояние частицы является суперпозицией двух плоских волн:

$$\psi_k(x) = A^+ e^{ikx} + A^- e^{-ikx}; \quad (I)$$

два частных состояния с $+k$ и $-k$ в этом случае когерентны.

Мы хотим узнать, каково направление движения частицы? Иными словами, хотим определить знак ее импульса k (ср. ^{1, 21/}).

В качестве прибора для такого измерения используем макроскопическое устройство: "шарик" массы $M \gg \mu$, расположенный на вершине усеченного конуса и способный свободно, без трения,

двигаться по поверхности конуса. На рис.7 показан график потенциальной энергии этого шарика $U(Q)$ как функция координаты его центра тяжести Q . На вершине конуса имеется неглубокая ямка шириной $2a$. Энергия ε , необходимая для освобождения шарика из этой ямки, считается очень малой:

$\varepsilon = E_p - \varepsilon_0 \ll \varepsilon_k$ - кинетической энергии частицы " μ " ($\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2\mu$). В силу малости ε шарик находится в неустойчивом равновесии, и после рассеяния на нем микрочастицы

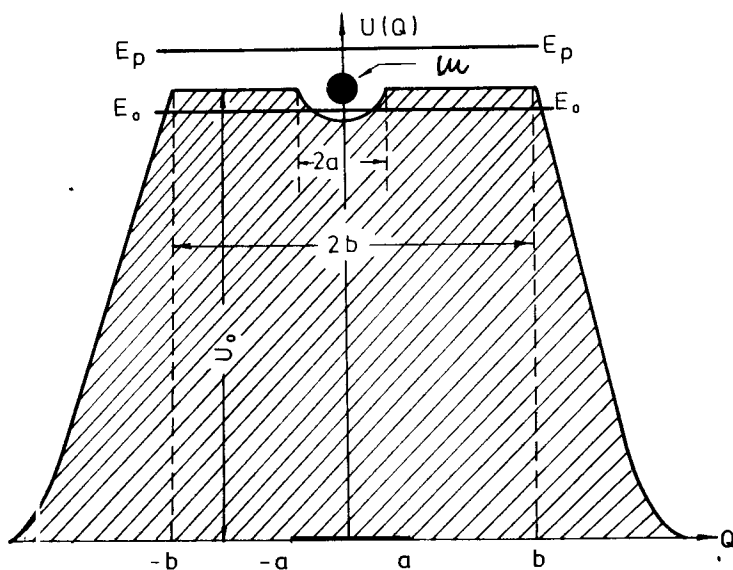


Рис.7. Потенциальная энергия $U(Q)$ шарика μ , расположенного на вершине усеченного конуса. Q - координата центра масс шарика. Указаны два уровня энергии E_0 и $E_p = p^2/2M$. U_0 - энергетическая высота конуса.

он движется либо направо, либо налево, по вершине усеченного конуса. При достижении края вершины ($Q = \pm b$) шарик начнет падать вниз и может приобрести как угодно большую энергию $E_p = P^2/2M = U_0$. (Здесь P - импульс шарика, а U_0 - энергетическая высота конуса, которая может быть очень большой.)

Таким образом, микроскопическое явление - рассеяние частицы " μ " на шарике - порождает явление макроскопическое.

Мы будем считать температуру шарика равной 0°K и будем игнорировать его сложную структуру^{x)}. При этих предположениях исходное состояние шарика можно считать "чистым" и приближенно описывать его волновой функцией осциллятора:

$$\Phi_0(Q) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a} e^{-Q^2/a^2} \quad (2)$$

Ширину вершины конуса b будем считать много большей ширины ямки a . Волновую функцию шарика после получения им импульса P в области $-b < Q < +b$ можно считать плоской волной:

$$\Phi_p(Q) = \frac{e^{iPQ}}{\sqrt{2\pi}} \quad (3)$$

Ниже будет показано, что после рассеяния частицы " μ " на шарике шарик оказывается в двух неинтерферирующих между собой состояниях. Одно из них отвечает движению шарика направо ($P > 0$), а другое - движению налево ($P < 0$)

^{x)} Поскольку она явно несущественна в рассматриваемом процессе.

в зависимости от того, в каком состоянии рассеялась на шарике микрочастица "μ": имея импульс k или $-k$. Поэтому движение шарика по вершине конуса выполняет функцию анализатора, а дальнейшее падение его вниз - выполняет функцию детектора. Таким образом, в нашем простом примере прибор, как это и должно быть, выполняет обе функции, характерные для измерительных приборов.

Обратимся теперь к математической теории этого прибора. Предположим энергию взаимодействия шарика и микрочастицы в простейшем виде:

$$\begin{aligned} \hat{W}_{AB} &= g \delta(Q-x) && \text{для } t > 0, \\ W_{AB} &= 0 && \text{для } t < 0, \end{aligned} \quad (4)$$

где g - константа взаимодействия, которую можно считать малой. Это позволит нам пользоваться теорией возмущения.

Обозначим волновую систему частица-прибор в начальный момент времени через $\Psi_0(x, Q)$:

$$\Psi_0(x, Q) = \Phi_0(Q) \varphi_k(x). \quad (5)$$

Волновую функцию системы $\Psi(x, Q, t)$ для $t > 0$ будем искать исходя из уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \left\{ \hat{H}_A(x) + \hat{H}_B(Q) + \hat{W}_{AB}(x, Q) \right\} \Psi = 0. \quad (6)$$

Здесь $\hat{H}_A(x)$, $\hat{H}_B(Q)$ - гамильтонианы свободного движения частицы "μ" и шарика M . Положим

$$\Psi(x, Q, t) = \Psi_0(x, Q) e^{-i(E_0 + \epsilon_k)t + u(x, Q, t)}, \quad (7)$$

где u - рассеянная волна.

Подставляя (7) в (6) и пренебрегая произведением $\hat{W}u$ (величиной порядка g^2), получим уравнение для рассеянной волны:

$$i\hbar \frac{\partial u(x, Q, t)}{\partial t} - \{ \hat{H}_A(x) + \hat{H}_B(Q) \} u(x, Q, t) = \hat{W}_{AB}(x, Q) \Psi_0(x, Q, t) e^{-i(E_0 + \epsilon_k)t}. \quad (8)$$

Эту волну будем искать в виде разложения:

$$u(x, Q, t) = \int \Phi_p(Q) e^{-iE_p t / \hbar} u_p(x, t) dp. \quad (9)$$

Подставляя теперь (9) в (8), умножая полученное уравнение на $\Phi_{p'}^*(Q)$, интегрируя по Q и пользуясь условием ортогональности:

$$\int \Phi_{p'}^*(Q) \Phi_p(Q) dQ = \delta(p' - p), \quad (10)$$

получим уравнение для

$$i\hbar \frac{\partial u_p(x, t)}{\partial t} - \hat{H}_A(x) u_p(x, t) = g \Phi_{p'}^*(x) \Phi_0(x) \varphi_k(x) e^{i(E_p - \epsilon_k)t} \frac{\omega_k t}{\hbar}. \quad (II)$$

Здесь

$$\hbar \omega_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}; \quad \hat{H}_A(x) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2}.$$

Уравнение (II) разрешаем с помощью функции Грина $\mathcal{G}(x-x', t-t')$ свободного уравнения (т.е. уравнения (II) при $g=0$):

$$u_p(x, t) = \int_0^t \int_{\mu} \mathcal{G}_{\mu}(x-x', t-t') dt' dx' \rho(x', t') dx' dt', \quad (12)$$

где согласно (11) источник $\rho(x', t')$ равен:

$$\rho_p(x', t) = g \Phi_p^*(x) \Phi_0(x) \varphi_k(x) e^{\frac{i(E_p - E_0)t}{\hbar} - i\omega_k t} \quad (13)$$

Амплитуды A^+ , A^- входят в (13) линейно, поэтому достаточно вместо $\varphi_k(x)$ рассматривать функции $A^{\pm} e^{\pm i k x}$ и соответствующие рассеянные волны $u_p^{\pm}(x, t)$.

Как известно, функция $\mathcal{G}(x, t)$ для свободного движения частицы с массой μ равна ^{x)}

$$\mathcal{G}_{\mu}(x, t) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i \hbar}} e^{i\mu x^2 / 2\hbar t} \frac{1}{\sqrt{t}}. \quad (14)$$

Подставляя теперь $u_p(x, t)$ в (9), мы видим, что в (9) войдет интеграл, равный:

$$\mathcal{G}_{\mu}(Q-x', t-t') = \int dP \Phi_p(Q) \Phi_{p'}^*(x') e^{iE_p(t-t')}, \quad (15)$$

который есть не что иное, как функция Грина для свободного движения частицы M (шарика). Поэтому получается:

$$u^{\pm}(x, Q, t) = g A^{\pm} \int_0^t \int_{\mu} \mathcal{G}_{\mu}(x-x', t-t') \mathcal{G}_{\mu}(Q-x', t-t') dx' dt' \Phi_0(x') e^{\pm i k x'} e^{-iE_0 t / \hbar} \quad (16)$$

x) См., например, /21/.

или в раскрытом виде, полагая $\tau = t - t'$:

$$u^{\pm}(x, Q, t) = g A^{\pm} e^{i\omega_0 t} \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i \hbar}} \sqrt{\frac{M}{2\pi i \hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(x') \int_0^t \frac{d\tau}{\tau} e^{i\mu \frac{(x-x')^2}{2i\hbar\tau} + iM \frac{(Q-x')^2}{2i\hbar\tau}} \cdot e^{\pm i k x'} \Phi_0(x') e^{-i\omega_0 \tau} \quad (17)$$

В этом интеграле можно выполнить интегрирование по $d\alpha'$ (см. дополнение IX). Тогда получим:

$$u^{\pm}(x, Q, t) = g A^{\pm} e^{i\omega_0 t} \frac{\sqrt{\mu M}}{2\pi i \hbar} \sqrt{\pi} \int_0^t \frac{d\tau}{\tau} e^{-i\omega_0 \tau} \cdot \frac{1}{A(\tau)} e^{-B_{\pm}^2(\tau) + C(\tau)} \quad (18)$$

Причем:

$$A = \frac{1}{a^2} - \frac{i}{2\hbar\tau} (\mu + M) ; B_{\pm} = \frac{1}{2A} \left\{ \pm k + \frac{i}{\hbar\tau} (\mu x + M Q) \right\}; \quad (19)$$

$$C = \frac{i}{2\hbar\tau} (\mu x^2 + M Q^2).$$

Если теперь использовать исходное предположение $M \gg \mu$, то $\text{Re } B_{\pm}^2$ принимает вид:

$$\text{Re } B_{\pm}^2 = \frac{[Q \pm v\tau]^2}{a^2}. \quad (20)$$

Здесь $v = \frac{\hbar k}{M}$ есть скорость шарика (см. дополнение УП).

Отсюда следует, что функция $u^+(Q, t)$ сосредоточена в области положительных Q : $0 < Q < vt$, а функция $u^-(Q, t)$ сосредоточена в области отрицательных Q : $-vt < Q < 0$, так что $u^+(Q, t)u^-(Q, t) \cong 0$. Дальнейшее движение шарика M в область $Q > |v|$ практически будет совпадать с классическим движением падающего с "горки" шарика.

Таким образом, доказывается, что при движении шарика в области $-b < Q < +b$ уничтожается интерференция состояний, принадлежащих различным направлениям движения шарика.

По достижении области $Q > |b|$ шарик будет падать направо или налево, набирая как угодно большую энергию U_0 . Этим выполняется детекторная функция нашего измерительного устройства: по падению шарика справа или слева мы узнаем знак импульса частицы " μ ".

ЛЕКЦИЯ XIII

Термодинамически неустойчивый детектор

В этой лекции рассматривается измерительный прибор, предназначенный для определения направления спина микрочастицы " μ " /2I/. Предполагается, что эта частица обладает магнитным моментом $\vec{\mu}$:

$$\vec{\mu} = \mu_0 \vec{\sigma}, \quad (I)$$

где $\vec{\sigma}$ - матрица Паули. Пучок частиц " μ " будем считать неполяризованным. Поэтому исходный ансамбль - некогерентный и описывается статоператором $\hat{\rho}$, имеющим матричные элементы:

$$\hat{\rho}(x, x') = P_1 \psi_1(x) \psi_1^*(x') + P_2 \psi_2(x) \psi_2^*(x'), \quad (2)$$

где волновая функция ψ_1 представляет состояние

частицы " μ " с проекцией спина на ось Oz , равной $+1/2$, а волновая функция ψ_2 представляет состояние с проекцией спина на Oz , равной $-1/2$. Эти состояния равновероятны, так что: $P_1 = P_2 = 1/2$.

С помощью неоднородного магнитного поля, параллельного оси Oz , пучки ψ_1 и ψ_2 можно разделить пространственно так, что каждый направляется в свой детектор D_1 или D_2 (см. рис.5). Этим выполняется первая функция прибора - функция анализатора. Эта функция в рассматриваемом случае тривиальна, и мы ее рассматривать далее не будем, а сосредоточимся исключительно на работе детекторов. Достаточно рассмотреть один из них.

В качестве детектора рассмотрим макроскопическое собрание осцилляторов, обладающих магнитным моментом, которое находится в термодинамически неустойчивом состоянии. Магнитный момент осцилляторов \vec{m} может быть выражен через их заряд e и их механический момент \vec{M} согласно известной формуле $\vec{m} = e\vec{M}/2mc$, где m - масса осциллятора, c - скорость света.

Энергия взаимодействия частицы " μ " с одним из осцилляторов детектора будет равна:

$$\hat{W} = - \vec{m} \vec{H}(x). \quad (3)$$

В этой формуле $\vec{H}(x)$ есть магнитное поле, воздействующее на осциллятор со стороны частицы " μ ". Это поле выражается формулой

$$\vec{H}(x) = \frac{\mu}{R^3} - \frac{\vec{R}(\vec{\mu}\vec{R})}{R^5}. \quad (4)$$

В этой формуле R — есть расстояние от частицы " μ " до осциллятора. Для нашей цели достаточно ограничиться рассмотрением двумерной задачи. Мы будем считать, что осцилляторы образуют в плоскости xY двумерный кристаллик размером a . Далее будем считать, что длина волны частицы " μ " $\lambda \gg a$. Предположим, что частица поляризована в направлении оси OZ . При этих условиях скалярное произведение $(\vec{\mu}\vec{R})$ в (4) равно нулю. Условие $\lambda \gg a$ позволяет заменить величину $1/R^3$ в (4) на ее среднее значение, так что $1/R^3 \cong 1/a^3$. При этих предположениях энергия взаимодействия частицы и S -го осциллятора принимает простой вид:

$$\hat{W}_S = \pm i \hbar \omega \frac{\partial}{\partial \varphi_S}, \quad (5)$$

где частота $\omega = \frac{1}{a^3} \frac{e}{2mc} \mu_0$, а $i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi_S} \equiv \hat{M}_{zS}$ — оператор проекции механического момента S -го осциллятора на ось OZ , φ_S — полярный угол. Знаки отвечают двум возможным ориентациям спина частицы " μ ". Достаточно ограничиться одной из возможностей. Невозмущенный гамильтониан системы из осцилляторов может быть записан в виде

$$\hat{H} = \sum_{S=1}^N \hat{H}(x_S, y_S) = \sum_{S=1}^N \left\{ \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_S^2} + \frac{1}{2} x_S^2 \right) + \right. \\ \left. + \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y_S^2} + \frac{1}{2} y_S^2 \right) \right\}. \quad (6)$$

Причем в этой формуле энергия и все координаты сделаны безразмерными путем выбора единицы длины $\ell = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}$, единицы энергии $\varepsilon = \hbar\omega_0$; ω_0 - частота колебаний осциллятора. На основании (5) энергия возмущения всей системы будет равной:

$$\hat{W} = \sum_{S=1}^M \hat{W}_S \equiv \sum_{S=1}^M \left(\pm i\hbar\omega \frac{\partial}{\partial \varphi_S} \right). \quad (7)$$

Из (6) видно, что наши осцилляторы обладают симметрией относительно вращения около каждого из узлов решетки, поэтому

$$[\hat{H}, \hat{W}] = 0. \quad (8)$$

Мы предположим, что в начальный момент времени $t=0$ (т.е. в отсутствие частицы "μ") система осцилляторов находилась в неравновесном состоянии: колебания по оси OY были "заморожены", они имели температуру $\theta=0$, а колебания по оси OX были "нагреты" до температуры $\theta = kT > 0$. Вычислим теперь элементы матрицы плотности $\rho(x, \gamma | x', \gamma')$ для одного из осцилляторов при указанных условиях.

Временно мы будем опускать индекс S у $x_s, \gamma_s, x'_s, \gamma'_s$; так как все осцилляторы нашего плоского кристаллика находятся в равных условиях. Из определения матрицы

плотности канонического ансамбля следует:

$$\hat{\rho}(x, \gamma | x', \gamma') = \sum_{n=0}^{\infty} e^{(F - E_n - E_0)/\theta} \psi_n(x) \psi_n^*(x') \cdot \psi_0(\gamma) \psi_0^*(\gamma'). \quad (9)$$

Здесь сумма взята по всем уровням энергии осцилляторов $E_n = \hbar \omega_c (n + 1/2)$, колеблющимся вдоль оси Ox ; $\psi_n(x)$ есть собственная функция такого линейного осциллятора, принадлежащая n -му уровню; $E_0 = \hbar \omega_c / 2$ есть энергия нулевых колебаний по оси Oy , $\psi_0(y)$ - соответствующая волновая функция. Эта функция, в указанных ранее безразмерных переменных, равна $\psi_0(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-y^2/2}$;

$F(\theta)$ - свободная энергия одного из N осцилляторов.

Проблему представляет суммирование по n . Эта сумма равна

$$Z(x, x') = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \psi_n(x) \psi_n^*(x'), \quad (10)$$

где положено $\beta = \hbar \omega_c / \theta$. Чтобы найти эту сумму, применим прием, описанный в лекции (22). Заменяем $e^{-\beta E_n} \psi_n(x)$ на $e^{-\beta \hat{H}(x)} \psi_n(x)$ и продифференцируем сумму по β . Тогда получим:

$$\frac{\partial Z(x, x')}{\partial \beta} + \hat{H}(x) Z(x, x') = 0 \quad (11)$$

уравнения Шредингера с мнимым временем $t = i\beta$.

В раскрытом виде это уравнение гласит:

$$\frac{\partial Z(x, x')}{\partial \beta} + \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} x^2 \right\} Z(x, x') = 0. \quad (11)$$

Заметим, что переменная x' входит в (11) как параметр.

Однако ясно, что такое же уравнение можно написать, действуя в

(10) оператором $H(x')$ на $\Psi_n(x')$. Поэтому в переменных x и x' функция $Z(x, x')$ симметрична. "Начальное условие" при $\beta = 0$ (что соответствует бесконечно большой температуре θ) определим из естественного предположения, что при $\theta \rightarrow \infty$ осциллятор испаряется, его движение по оси Ox становится свободным. Значение суммы $Z_0(x, x')$ для свободного движения хорошо известно:

$$Z_0(x, x') = \frac{1}{\sqrt{\pi\beta}} e^{-\frac{1}{2\beta}(x-x')^2} \quad (12)$$

Оно совпадает с функцией Грина для свободного движения частицы (см., например, ^{/2I/}), если в (12) положить $it = \beta$ ($m = 1$). В дополнении (\bar{x}) показано, что решение уравнения (II), удовлетворяющее этому начальному условию и имеющее необходимую симметрию, как можно убедиться прямой подстановкой в (II), имеет вид:

$$Z(x|x') = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-A - \frac{1}{2}(Bx^2 - 2Cxx' + Bx'^2)} \quad (13)$$

Причем коэффициенты A, B, C оказываются равными :

$$B = \operatorname{cotgh} \beta ; C = \frac{1}{\sinh \beta} ; A = \frac{1}{2} \ln(\sinh \beta) + \frac{1}{2} \ln 2. \quad (14)$$

Учитывая множитель $e^{-E_0/\theta} \psi_0(y) \psi_0(y')$ в (9), получим окончательно:

$$\hat{G}(x, y|x', y') = \frac{e^{\beta F - (A + \beta/2) - \frac{1}{2}(Bx^2 - 2Cxx' + Bx'^2)}}{\pi} e^{-\frac{1}{2}(y^2 + y'^2)} \quad (15)$$

Оставшаяся неопределенной свободная энергия F находится

из условия нормировки $\int \hat{\rho} = 1$. В раскрытом виде это условие гласит:

$$\iint_{-\infty}^{+\infty} \hat{\rho}(x, y | x', y') dx dy = 1. \quad (I6)$$

Полагая $B - C = a^2 = \text{tgh}(\beta/2)$ и вводя для удобства $b^2 = 1$, получаем из (I5) и (I6)

$$\frac{e^{-B} = -(A + \beta/2)}{\pi} \iint_{-\infty}^{+\infty} e^{-(a^2 x^2 + b^2 y^2)} dx dy = 1, \quad (I6^I)$$

$$\beta F - (A + \frac{\beta}{2}).$$

Откуда $e^{\beta F - (A + \frac{\beta}{2})} = b$, так что

$$\beta F = \frac{\beta}{2} + \ln \left[2 \sinh \frac{\beta}{2} \right] + \ln \beta. \quad (I7)$$

Таким образом, окончательно матричный элемент

$\hat{\rho}(x, y | x', y')$ принимает простой вид:

$$\hat{\rho}(x, y | x', y') = \frac{ab}{\pi} e^{-\frac{1}{2}(Bx^2 - 2Cx'x + Bx'^2) - \frac{1}{2}(y^2 + y'^2)} \quad (I8)$$

Обратимся теперь к вычислению матрицы плотности для $t > 0$.

В момент $t=0$ в кристаллик влетает частица " μ " и, взаимодействуя с осцилляторами, изменяет их состояние. Характер возмущения описан выше. В силу того, что оператор возмущения (7) коммутирует с исходным гамильтонианом H , см. (8), оператор \hat{W} (7) имеет одинаковый вид в шредингеровском представлении и в

представлении взаимодействия. Поэтому в последнем представлении уравнение движения для матрицы плотности $\hat{\rho}$ гласит:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{\rho}, \hat{W}] = 0. \quad (19)$$

Имея в виду (7), нетрудно показать, что в координатном представлении это уравнение, в раскрытом виде, имеет вид:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \hat{\rho}(\dots x_s \dots y_s \dots | \dots x'_s \dots y'_s \dots; t)}{\partial t} \\ & \pm \omega \sum_{s=1}^N \left\{ \frac{\partial \hat{\rho}(\dots x_s \dots y_s \dots | \dots x'_s \dots y'_s \dots; t)}{\partial \varphi_s} + \right. \\ & \left. + \frac{\partial \hat{\rho}(\dots x_s \dots y_s \dots | \dots x'_s \dots y'_s \dots; t)}{\partial \varphi'_s} \right\} = 0, \quad (20) \end{aligned}$$

где знаки \pm соответствуют двум возможным проекциям спина частицы "μ" на ось OZ . То, что обе производные, $\partial/\partial \varphi_s$ и $\partial/\partial \varphi'_s$, входят в уравнение (20) с одним знаком, следует из того, что в скобке Пуассона (19) оператор $\frac{\partial}{\partial \varphi_s}$ действует на ρ справа налево. Интегрированием по частям он переносится налево и при этом меняет свой знак. Уравнение (20) есть уравнение в частных производных, но очень простое. Общее решение этого уравнения, удовлетворяющее избранному при $t=0$ начальному значению $\rho(\dots x_s \dots y_s \dots | \dots x'_s \dots y'_s \dots; 0)$,

получается простой заменой углов φ_s и φ'_s на $\varphi_s + \omega t$ и $\varphi'_s + \omega t$ соответственно. Поэтому имеем

$$\hat{P}(\dots x_s \dots y_s \dots | \dots x'_s \dots y'_s \dots; t) = \hat{P}(\dots x_s(t) \dots y_s(t) \dots | \dots x'_s(t) \dots y'_s(t) \dots; 0). \quad (21)$$

В полярной системе координат при $t=0$, имеем следующие выражения для x_s, y_s и x'_s, y'_s :

$$x_s = r_s \cos \varphi_s; y_s = r_s \sin \varphi_s; x'_s = r'_s \cos \varphi'_s; y'_s = r'_s \sin \varphi'_s. \quad (22)$$

Как пояснено выше, в этих формулах следует заменить φ_s на $\varphi_s + \omega t$ и φ'_s на $\varphi'_s + \omega t$ и подставить в (21). Заметим, что радиусы r_s и r'_s выступают как параметры. Из этого обстоятельства следует, что под воздействием возмущения, вызванного частицей "μ", осцилляторы кристаллика, не деформируясь, прецессируют с частотой ω :

$$x_s(t) = r_s \cos(\varphi_s + \omega t), y_s(t) = r_s \sin(\varphi_s + \omega t), \quad (23)$$

$$x'_s(t) = r'_s \cos(\varphi'_s + \omega t), y'_s(t) = r'_s \sin(\varphi'_s + \omega t). \quad (23)$$

Далее нас будут интересовать лишь диагональные члены оператора \hat{P} . Пользуясь (23), на основании (21) получим из (18):

$$\hat{P}(x_s, y_s | x_s, y_s; t) = \frac{a\beta}{\pi} e^{-a^2 x_s^2(t) - \beta^2 y_s^2(t)} \quad (24)$$

где $x(t)$ и $y(t)$ даются формулой (23).

формула (24) справедлива для всех осцилляторов независимо от их положения в кристаллике. Поэтому в (24) индекс S можно опустить. Вычислим теперь с помощью (24) среднее значение величин $\frac{1}{2} x^2$ и $\frac{1}{2} y^2$.

Имеем:

$$\langle \frac{1}{2} x^2 \rangle = \frac{ab}{\pi} \int e^{-a^2 x^2(t) - b^2 y^2(t)} \frac{1}{2} x^2 dx dy \quad (25)$$

$$\langle \frac{1}{2} y^2 \rangle = \frac{ab}{\pi} \int e^{-a^2 x^2(t) - b^2 y^2(t)} \frac{1}{2} y^2 dx dy. \quad (25')$$

Для этого заметим, что

$$\begin{aligned} a^2 x^2(t) + b^2 y^2(t) &= \frac{1}{2} r^2 (a^2 + b^2) + \frac{1}{2} r^2 (a^2 - b^2) \cos \psi \\ &= Z (M + N \cos \psi), \end{aligned} \quad (26)$$

где $Z = \frac{1}{2} r^2$, $\psi = 2(\omega t + \varphi)$, $M = a^2 + b^2$, $N = a^2 - b^2 > 0$,

$$N/M = \varepsilon.$$

Далее,

$$\frac{1}{2} x^2(t) = \frac{1}{2} Z \left[1 + (\cos \psi \cos 2\omega t + \sin \psi \sin 2\omega t) \right], \quad (27)$$

$$\frac{1}{2} y^2(t) = \frac{1}{2} Z \left[1 - (\cos \psi \cos 2\omega t + \sin \psi \sin 2\omega t) \right]. \quad (27')$$

Переходя в (25) и (25') к полярной системе координат

и подставляя туда (27) (27'), получим (см. дополнение X):

$$\langle \frac{1}{2} x^2 \rangle = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right) + \frac{1}{8} \left(\frac{1}{a^2} - \frac{1}{b^2} \right) \cos 2\omega t, \quad (28)$$

$$\langle \frac{1}{2} y^2 \rangle = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right) - \frac{1}{8} \left(\frac{1}{a^2} - \frac{1}{b^2} \right) \cos 2\omega t. \quad (28')$$

Следовательно, эти величины осциллируют с частотой 2ω . Средняя потенциальная энергия $\langle U \rangle = \frac{1}{2}\langle x^2 \rangle + \frac{1}{2}\langle y^2 \rangle$, а вместе с тем и полная энергия всей системы остаются, конечно, постоянными. Частица " μ " меняет только распределение энергии между степенями свободы.

Напомним, что при относительно высокой температуре θ ($\beta \rightarrow 0$) величина $a^2 = \beta/2$, а $b^2 = 1$. Поэтому до взаимодействия с частицей " μ " при $t \leq 0$ мы имели:

$$\left\langle \frac{1}{2} x^2 \right\rangle_0 = \frac{1}{4a^2} = \frac{1}{2\beta} = \frac{1}{2} \frac{\theta}{h\omega_0} \gg 1, \quad (29)$$

$$\left\langle \frac{1}{2} y^2 \right\rangle_0 = \frac{1}{4b^2} = \frac{1}{4}. \quad (29')$$

После взаимодействия, при $t > 0$, получится:

$$\left\langle \frac{1}{2} x^2 \right\rangle_t = \frac{1}{2} \frac{\theta/2}{h\omega_0} + \frac{1}{8} \quad + \text{осц.член}, \quad (30)$$

$$\left\langle \frac{1}{2} y^2 \right\rangle_t = \frac{1}{2} \frac{\theta/2}{h\omega_0} + \frac{1}{8} \quad + \text{осц.член}. \quad (30')$$

Таким образом, при $t \gg \frac{2\pi}{\omega}$ энергия перераспределяется по обеим степеням свободы, а температура кристаллика θ падает вдвое: $\theta' = \theta/2$. Это утверждение сделано в предположении, что макроскопический термометр не успевает следить за поведением осциллирующих членов, среднее значение которых равно нулю.

В заключение вычислим изменение энтропии. Энтропия определяется формулой

$$\hat{S} = -k \text{Sp}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}), \quad (31)$$

черта сверху указывает на усреднение по времени.

Из (24) имеем:

$$\hat{\rho} \ln \hat{\rho} = \hat{\rho} \left\{ \ln \frac{ab}{\pi} - a^2 x^2(t) - b^2 y^2(t) \right\}. \quad (32)$$

Поэтому

$$-Sp(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = 2a^2 \left\langle \frac{1}{2} x^2(t) \right\rangle + 2b^2 \left\langle \frac{1}{2} y^2(t) \right\rangle - \ln(ab/\pi). \quad (33)$$

Пользуясь (30), (30'), найдем из (33) для изменения энтропии:

$$\begin{aligned} \Delta S &= -k [Sp(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})_t - Sp(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})_0] = \\ &= \frac{1}{4a^2} + \dots = \frac{k}{2} \frac{\theta}{\hbar \omega_0} + \dots > 0. \end{aligned} \quad (34)$$

Итак, частица "μ" восстановила равновесие в кристаллике.

При этом общая температура стала равной $\theta/2$, а энтропия возросла на величину $k \frac{\theta/2}{\hbar \omega_0}$. Сравним эту энтропию с энтропией исходного некогерентного ансамбля, описываемого

статоператором (2). Его энтропия равна: $S_0 = -k(P_1 \ln P_1 + P_2 \ln P_2) = -k \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} \ln(1/2) = k \ln 2 > 0$. После разделения

пучка мы имеем два пучка, каждый из которых принадлежит когерентному ансамблю $\hat{\rho}_1 = \hat{\psi}_1(x) \hat{\psi}_1(x')$ и $\hat{\rho}_2 = \hat{\psi}_2(x) \hat{\psi}_2(x')$ соответственно.

Их энтропии $S_1 = S_2 = 0$. Таким образом, анализатор уменьшил энтропию на величину $S_1 - S_0 = k \ln 2$ и вместе с этим увеличил нашу информацию на величину $I = k \ln 2$.

Получение этой информации сопровождалось увеличением энтропии детектора на величину (34), которая много больше $k \ln 2$.

Это положение дел совершенно общо, и рассмотренный пример является иллюстрацией необходимости расплачиваться за приобретенную информацию увеличением энтропии.

ЛЕКЦИИ XIV

Детектор с цепной реакцией

В этом разделе мы рассмотрим последствия взаимодействия микрочастицы " μ ", влетающей в неустойчивую макроскопическую систему, способную к размножению частиц, с этой системой.

Такой системой может являться газ или жидкость, на которую наложено внешнее электрическое поле достаточно высокого напряжения. Это поле и является причиной неустойчивости рассматриваемой системы. Влетающая в такую систему электрически заряженная частица, например электрон, вызовет ионизацию атомов или молекул этой среды, что поведет к появлению нового электрона. Ускоряясь в приложенном поле, этот новый электрон способен путем ионизации освободить еще один электрон и т.д.

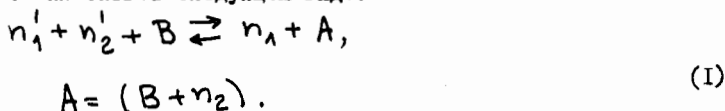
В результате возникает макроскопическое явление — электрическая искра.

Другим примером может служить попадание нейтрона в среду, образованную атомами, способными делиться с испусканием

новых нейтронов. В этом случае может возникнуть цепная реакция, инициированная нейтроном, вторгшимся в делящееся вещество.

Явления, разыгрывающиеся в приведенных примерах, весьма сложны. В дальнейшем мы рассмотрим очень упрощенную модель подобных явлений, ограничивая к тому же анализ этих явлений изучением лишь одной стороны дела - возникновением необратимых явлений в макроскопической системе под воздействием одной микрочастицы.

В качестве такой модели мы рассмотрим среду, в которой возможны только два процесса, обратные друг другу, которые можно записать в следующем виде:



Частицы n_1 и n_2 и n_1', n_2' можно рассматривать как электроны, частицу B - как ион, A^+ , и частицу A - как атом. Процесс, читаемый справа налево, есть процесс ионизации атома A , читаемый слева направо - есть процесс рекомбинации иона $B = A^+$ с электроном. Частицы n можно считать нейтронами. Тогда процесс $n_1' + A \rightarrow n_1 + n_2 + B$ можно рассматривать как простейший случай деления, происходящий с образованием одного нового нейтрона и "осколка" B . Обратный процесс есть процесс "синтеза" ядра A из ядра B (захват нейтрона). Для необратимости процессов, возникающих под действием залетевшей извне частицы, определяющим является то обстоятельство, что процесс "деления" $n_1' + A \rightarrow n_1 + n_2 + B$

возникает в результате столкновения двух частиц, n и A , обратный процесс - синтеза - есть результат тройного столкновения частиц n_1, n_2 и B .

Теория тройных столкновений не очень популярна. Поэтому в дальнейшем мы изложим эту теорию, основываясь на простой модели. Существенные для нашей проблемы выводы не будут зависеть от этих упрощений. Предположим, что гамильтониан нашей системы частиц имеет вид:

$$\hat{H}(x_1, x_2, x_3) = \hat{H}_n(x_1 - x_3) + \hat{H}_n(x_2 - x_3) + \hat{H}_A(x_3) + W(x_1 - x_2), \quad (2)$$

где $\hat{H}_n(x) = \frac{p^2}{2m} + U(x)$; $\hat{H}_A(x) = \frac{p^2}{2M}$.

Здесь x_1, x_2 - координаты электронов (или нейтронов), m - их масса, x_3 - координата иона (или ядра атома), M - его масса ($M \gg m$). U - энергия взаимодействия электрона с ионом B (или нейтрона с осколком B); $W(x_1 - x_2)$ - энергия взаимодействия электронов (или нейтронов).

Рассмотрим переход $n_1' + n_2' + B \rightarrow n_1 + A$.

Импульсы участвующих в нем частиц положим равными p_1', p_2', p_3' , p_1, p_3 соответственно. Этот процесс описывается диаграммой, изображенной на рис. 8а. Волновую функцию начального состояния для процесса α представим в виде

$$\Psi_{p'_1 p'_2 p'_3}(x_1, x_2, x_3) = \Psi_{p'_1}(x_1 - x_3) \Psi_{p'_2}(x_2 - x_3) \Psi_{p'_3}(x_3). \quad (3)$$

Волновую функцию связанного состояния (А) обозначим $\Psi_{p_1}(x_2 - x_3)$.
 Функции непрерывного спектра $\Psi_p(x)$ имеют вид:

$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \left[e^{ipx} + u_p(x) \right], \quad (4)$$

где $u_p(x)$ - рассеянная волна; они нормированы на 1 в объеме V (V - есть объем нашей системы) и ортогональны, так что

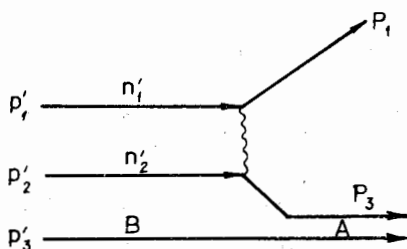


Рис.8а. Диаграмма синтеза, или захвата. Процесс $n'_1 + n'_2 + B \rightarrow n_1 + A$.

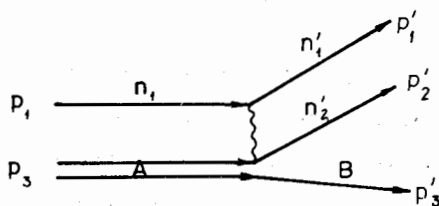


Рис.8б. Диаграмма "деления", или ионизации. Процесс $n_1 + A \rightarrow B + n'_1 + n'_2$.

$$\langle \varphi_{P_1}(x), \varphi_{P_2}^*(x) \rangle = \delta_{P_1 P_2}. \quad (5)$$

Волновая функция, описывающая конечное состояние, будет равна:

$$\Psi_{P_1, A, P_3}(x_1, x_2, x_3) = \varphi_{P_1}(x_1 - x_3) \varphi_A(x_2 - x_3). \quad (6)$$

Если ввести обозначения $\bar{x}_1 = x_1 - x_3$, $\bar{x}_2 = x_2 - x_3$,
то матричный элемент энергии возмущения W для рассматриваемого квантового перехода принимает вид:

$$\langle P'_1, P'_2, P'_3 | W | P_1, A, P_3 \rangle = \delta_{P'_3 P_3} \int d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 W(\bar{x}_1 - \bar{x}_2). \quad (7)$$

$$\varphi_{P'_1}(\bar{x}_1) \varphi_{P'_2}^*(\bar{x}_1) \varphi_{P'_3}(\bar{x}_2) \varphi_A(\bar{x}_2),$$

где $\bar{x}_1 = x_1 - x_3$, $\bar{x}_2 = x_2 - x_3$. Вводя переменные $x = \bar{x}_1 - \bar{x}_2$,
 $y = \bar{x}_1 + \bar{x}_2$, получим:

$$\langle P'_1, P'_2, P'_3 | W | P_1, A, P_3 \rangle = \delta_{P'_3 P_3} \frac{1}{V^{3/2}} \tilde{W}(q) \tilde{\varphi}(P'_2 - q). \quad (8)$$

Здесь \tilde{W} и $\tilde{\varphi}$ есть компоненты Фурье от $W(x)$ и $\varphi(x)$ соответственно, а $q = P_1 - P'_1$ есть передача импульса от частицы n_1 к частице n_2 . Произведение $\tilde{W}(q) \tilde{\varphi}(P'_2 - q)$ обозначим сокращенно через $f(q, P'_2)$. Существенно, что амплитуда $f(q, P'_2)$ не зависит от объема V , в котором разыгрывается изучаемый процесс.

Вероятность перехода, изображаемого диаграммой рис.8а, рассчитанная на одну секунду, равна:

$$P(p_1' p_2' p_3' | p_1 A p_3) = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\Delta E) \delta_{p_3' p_3} \frac{1}{V^3} |f(q, p_1')|^2, \quad (9)$$

причем

$$\Delta E = E_1' + E_2' + E_3' - E_1 - \epsilon_A - E_3. \quad (10)$$

Умножим теперь эту вероятность на число частиц $dN(p_1')$ в малом интервале в окрестности импульса p_1' , далее - на $dN(p_2')$, число тех же частиц в окрестности импульса p_2' , а также на число N_B частиц B и на число состояний в окрестности импульса p_1 $V d\Omega(p_1)$. Тогда получим дифференциальную скорость реакции I , рассчитанную на 1 см^3 :

$$dR_I = \frac{2\pi}{\hbar} |f(q, p_1')|^2 \delta(\Delta E) dn(p_1') dn(p_2') n_B \cdot d\Omega(p_1), \quad (11)$$

где n_1, n_2, n_B - плотности частиц.

Вычислим теперь скорость прямого процесса $A + n_1 \rightarrow B + n_1' + n_2'$ (процесса ионизации, или "деления"), описываемого диаграммой рис.8б. Сечение для этого процесса будет равно:

$$d\sigma = \frac{2\pi}{\hbar} |f(q, p_2')|^2 \delta(\Delta E) \frac{1}{V^3} \cdot V d\Omega(p_1') \cdot V d\Omega(p_2') / \frac{v(p_1)}{V}, \quad (12)$$

где $v(p_1)$ - скорость частицы n_1 . Умножая это сечение на поток частиц $v(p_1)/V$, на полное число атомов $A - N_A$ и на число падающих электронов (нейтронов) $dn(p_1)$, получим для скорости этой реакции:

$$dR_{II} = \frac{2\pi}{h} |f(p_1, p_2')|^2 \delta(\Delta E) d\Omega(p_1') d\Omega(p_2') dn(p_1) n_A \quad (13)$$

Заметим, что $d\Omega(p) = d^3p / (2\pi\hbar)^3$.

Допустим теперь, что электронный газ (или газ нейтронный) имеет максвелловское распределение для температуры $\theta = kT$.

Тогда

$$dn(p, \theta) = n e^{-p^2/p_\theta^2} d\Omega(\theta, p), \quad (14)$$

где n - полная плотность частиц, а $p_\theta^2 = 2m\theta$,

$$d\Omega(\theta, p) = N(p_\theta) d\Omega(p); \quad N(p_\theta) = 1/\pi^{3/2} \lambda_\theta^3;$$

$$\lambda_\theta = \frac{2\pi\hbar}{p_\theta}$$

есть длина волны частицы с импульсом p_θ . Учитывая это распределение, получим для полных скоростей реакций:

$$R_I = \frac{2\pi}{h} n^2 n_B \int |f|^2 \delta(\Delta E) N_\theta^2 \quad (15)$$

$$e^{-p\{-p_1'^2 + p_2'^2\}/p_\theta^2} d\Omega(p_1') d\Omega(p_2') d\Omega(p_1)$$

$$R_{II} = \frac{2\pi}{h} n n_A \int |f|^2 \delta(\Delta E) N_\theta e^{-p_1^2/p_\theta^2} \quad (16)$$

$$d\Omega(p_1) d\Omega(p_1') d\Omega(p_2')$$

В силу равенства $\frac{P_1^2}{2m} + \epsilon_A = \frac{P_1'^2 + P_2'^2}{2m}$ условие равновесия

$$R_I = R_{II} \quad \text{приводит к соотношению}$$

$$n \cdot n_A = n^2 \cdot n_B e^{-\epsilon_A / \Theta} \quad (17)$$

В этой формуле n - плотность электронов (или нейтронов), n_A - плотность атомов (ядер) A , n_B - плотность ионов (или "осколков") B . Из сравнения формул (15) и (16) следует, что скорость реакции (I) - реакции рекомбинации (или "синтеза") пропорциональна $n^2 n_B$, а скорость реакции II - реакции ионизации (или "деления") пропорциональна $n n_A$. В самом начале процесса, когда в среду влетает лишь один электрон (или один нейтрон), скорость реакции I пропорциональна $\frac{1}{\sqrt{2}} n_B$, а скорость прямой реакции ионизации (или "деления") пропорциональна $\frac{1}{\sqrt{v}} n_A$, причем $n_B \ll n_A$.

В силу этих соотношений реакция в рассматриваемом случае будет идти односторонне, нарастая лавинообразно. Равновесное соотношение (17), характерное для всей системы, помещенной в термостат температуры Θ , будет вообще недостижимо из-за утечки частиц из конечной системы. Таким образом, одна микро-частица, попавшая в неустойчивую среду, может вызвать необратимый процесс, носящий характер взрыва или искры.

Работа фотопластинки или пузырьковой камеры

Рассмотрим два атома, А и В, погруженных в некоторую среду или даже укрепленных в ней. В этом обстоятельстве будет находить отражение макроскопический характер рассматриваемого измерительного устройства. Ради упрощения расчетов мы не будем рассматривать движение самих атомов; ограничимся предположением, что координаты их центров тяжести Q_A и Q_B сосредоточены Q_A около $Q_1 \pm \Delta Q_1$, Q_B - около $Q_2 \pm \Delta Q_2$. Размеры областей $\Delta Q_1, \Delta Q_2 \ll |Q_A - Q_B|$. Координаты электрона атома А пусть будут γ_1 , координаты электрона в атоме В будут γ_2 ; координату электрона, влетающего в среду, обозначим через x .

Прибор предназначается для измерения положения влетающего в среду электрона. Гамильтониан нашей системы (атомы А, В и три электрона) будет:

$$\hat{H} = \hat{H}^0(x) + \hat{H}^0(\gamma_1 - Q_1) + \hat{H}^0(\gamma_2 - Q_2) + W(x - \gamma_1) + W(x - \gamma_2). \quad (*) \quad (I)$$

Волновая функция системы при $t \leq 0$ до начала взаимодействия есть

$$\psi_0(x, \gamma_1, \gamma_2) = e^{ikx} \varphi_0(\gamma_1 - Q_1) \varphi_0(\gamma_2 - Q_2). \quad (2)$$

k - импульс налетающего электрона; φ_0 - волновая функция электрона, находящегося в атоме А или В. Волновую функцию для $t \rightarrow \infty$ обозначим

x) Взаимодействие атомных электронов рассматривать не нужно.

$$\Psi(x, y_1, y_2) = \Psi_0(x, y_1, y_2) + u(x, y_1, y_2), \quad (3)$$

где $u(x, y_1, y_2)$ - волна, возникающая в результате взаимодействия. Разложим ее по собственным функциям связанных состояний в атоме $\varphi_n(y-Q)$: x)

$$u(x, y_1, y_2) = \sum_{n,m} \varphi_n(y_1-Q_1) \varphi_m(y_2-Q_2) u_{nm}(x). \quad (4)$$

Исходя из гамильтониана (I), обычными методами получим уравнение для рассеянной волны:

$$\nabla^2 u_{nm}(x) + k_{nm}^2 u_{nm}(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ W_{n0}(x-Q_1) + W_{m0}(x-Q_2) \right\} e^{ikx}, \quad (5)$$

где

$$W_{n0}(x-Q_1) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(y_1-Q_1) W(x-y_1) \varphi_0(y_1-Q_1) dy_1, \quad (6)$$

и тот же смысл имеет величина $W_{m0}(x-Q_2)$

для атома В, $k_{nm}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [k^2 - \epsilon_n - \epsilon_m]$; ϵ_n и ϵ_m - энергия возбуждения n -го и m -го уровней атомов А и В.

Из (5) методом функции Грина получим:

$$u_{nm}(x) = - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{i\vec{k}_{nm}(\vec{x}-\vec{x}')} }{|\vec{x}-\vec{x}'|} e^{i\vec{k}\vec{x}'} \left\{ W_{n0}(x'-Q_1) + W_{m0}(x'-Q_2) \right\} d^3x' = \quad (7)$$

$$= e^{i\vec{k}\vec{Q}_1} f_n(k, x-Q_1) + e^{i\vec{k}\vec{Q}_2} f_m(k, x-Q_2).$$

x) Непрерывный спектр мы рассматривать не будем.

Первая из этих волн изображает рассеяние на атоме А и возможно: его возбуждение (если $\eta \neq 0$), при этом атом В не участвует в процессе. Вторая волна означает то же рассеяние, происходящее на атоме В. Первая из этих волн сосредоточена около $x = Q_1$, вторая — около $x = Q_2$. В силу предполагаемого большого расстояния $|Q_1 - Q_2| \gg a$ (a — размер атома) произведение $f_n f_m^*$ мало. Далее следует отметить, что сами положения атомов А и В случайны в пределах ΔQ_1 и ΔQ_2 , поэтому случайны и фазы $(\vec{k} \cdot \vec{Q}_1)$ и $(\vec{k} \cdot \vec{Q}_2)$. В силу этого обстоятельства $f_n f_m^* \cong 0$.

Таким образом, рассмотренное устройство нарушает интерференцию состояний с различными возможными позициями электрона (около Q_1 или около Q_2) и, следовательно, служит анализатором состояния электрона (x) по "спектру" его координат ($-\infty < x < +\infty$).

Возбужденный атом, скажем А, может передать свою энергию возбуждения соседним с ним атомам среды, что поведет к нагреванию окрестности А, в частности, к локальному вскипанию жидкости в случае пузырьковой камеры.

Подобное же возбуждение в случае фотопластинки послужит инициатором цепных химических реакций в чувствительном зерне фотоэмульсии.

В обоих примерах возникают необратимые процессы, которые исполняют роль детектора.

ДОПОЛНЕНИЕ I

Вычисление средних в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$

Формула (III. 10) для среднего \bar{L} величины L получается на основании формул (III. I) и (III. 2) из общей формулы

$$\bar{L} = \int \rho(q, p) L(q, p) \frac{dq dp}{2\pi\hbar} \quad (I)$$

при условии нормировки

$$\int \rho(q, p) dq dp = 1 \quad (2)$$

следующим образом. Подставим в (I) выражение

$$\rho(q, p) = \int \rho(q, \xi) e^{i p \xi / \hbar} d\xi, \quad (3)$$

$$L(q, p) = \int L^*(q, \xi') e^{-i p \xi' / \hbar} d\xi'. \quad (3I)$$

Тогда

$$\bar{L}(q, p) = \int d\xi d\xi' e^{i \frac{p \xi'}{\hbar} - i \frac{p \xi}{\hbar}} L^*(q, \xi') \rho(q, \xi).$$

$$\begin{aligned} \frac{dq dp}{2\pi\hbar} &= \int d\xi dq d\xi' \delta(\xi' - \xi) L^*(q, \xi') \rho(q, \xi) = \\ &= \int d\xi dq L^*(q, \xi) \rho(q, \xi). \end{aligned} \quad (4)$$

Заменяя обозначения $\rho(q, \xi) \equiv \rho(q, q')$, $L^*(q, \xi) \equiv L^*(q, q')$, получаем результат

$$\bar{L} = \overline{L(q, p)} = \int \rho(q, q') L^*(q, q') dq dq', \quad (5)$$

приведенный в формуле (Ш.10). С помощью такого же рода преобразований из уравнения (Ш.14) получается уравнение (Ш.15).

ДОПОЛНЕНИЕ II

Операторы \hat{p} и \hat{q}

Рассмотрим некоторую функцию $\Psi(q)$ и применим к ней сперва оператор \hat{q} , а затем оператор \hat{p} , представляющий импульс, сопряженный координате q . Имеем:

$$\hat{q} \Psi(q) = \int q \delta(q - q'') \Psi(q'') dq'' = q \Psi(q) \equiv F(q). \quad (1)$$

Далее,

$$\begin{aligned} \hat{p} \hat{q} \Psi(q) &= \hat{p} F = \int i\hbar \frac{\partial \delta(q'' - q)}{\partial q''} F(q'') dq'' = \\ &= -i\hbar \cdot \frac{\partial F(q)}{\partial q} = -i\hbar \left\{ \Psi(q) + q \frac{\partial \Psi}{\partial q} \right\}. \end{aligned} \quad (2)$$

Выполняя операции в обратном порядке, найдем

$$\hat{q} \hat{p} \Psi(q) = -i\hbar q \frac{\partial \Psi(q)}{\partial q}. \quad (3)$$

Поэтому

$$(\hat{p} \hat{q} - \hat{q} \hat{p}) \Psi(q) = -i\hbar \Psi(q). \quad (4)$$

Следовательно,

$$[\hat{p}, \hat{q}] \Psi = \Psi. \quad (5)$$

Ввиду произвольности функции $\psi(q)$ из (5) получаем:

$$[p, q] = 1. \quad (6)$$

В координатном представлении имеем:

$$\hat{1} = \delta(q - q'). \quad (7)$$

Нетрудно доказать, что если \hat{p} и \hat{q} относятся к разным степеням свободы, то в (6) вместо 1 получим 0.

ДОПОЛНЕНИЕ III

Связь классических и квантовых формул

В лекции III было показано, что нормировка классической плотности в пространстве $\mathcal{R}(q, q')$ гласит:

$$\int \varrho(q, q') dq = 1, \quad (1)$$

а выражение для средней величины \bar{L} имеет вид:

$$\bar{L} = \int \varrho(q, q') L^*(q, q') dq dq'. \quad (2)$$

См. (III.9 и IO). С другой стороны (формула (IV.9)),

$$\text{Sp } \hat{\varrho} = 1. \quad (3)$$

В раскрытом виде этот след есть сумма диагональных элементов $\hat{\varrho}(q, q')|_{q'=q} = \varrho(q, q)$. Для непрерывной переменной, какой является переменная q , след матрицы, по определению, есть интеграл по этой переменной:

$$\text{Sp } \hat{G} \equiv \int \hat{G}(q, q) dq = 1. \quad (4)$$

Поэтому формулы (1) и (3) совпадают. Далее, если в (2) рассматривать $\hat{L}^*(q, q')$ как матричный элемент эрмитовского оператора \hat{L} , то $\hat{L}^*(q, q') = \hat{L}(q', q)$. Поэтому изменение коммутативного закона умножения в (2) на закон умножения матриц позволяет записать (2) в "квантовом" виде:

$$\bar{L} = \int \hat{G}(q, q') \hat{L}(q', q) dq' dq. \quad (5)$$

В соответствии с законом умножения матриц и определением следа матрицы получаем, что формула (2), после изменения закона умножения, переходит в формулу (IV. 10)

$$\bar{L} = \text{Sp}(\hat{G} \hat{L}). \quad (6)$$

Для дальнейшего укажем важное равенство

$$\text{Sp}(\hat{A} \hat{B}) = \text{Sp}(\hat{B} \hat{A}). \quad (7)$$

Действительно,

$$\text{Sp}(\hat{A} \hat{B}) \equiv \sum_n \sum_s A_{ns} B_{sn} = \sum_s \sum_n B_{sn} A_{ns} = \text{Sp}(\hat{B} \hat{A}). \quad (8)$$

То же самое легко доказать для непрерывных матриц, заменяя суммирование по дискретным индексам s, n на интегрирование по непрерывным:

$$\text{Sp}(\hat{A} \hat{B}) = \iint dq dq' A(q, q') B(q', q) = \text{Sp}(\hat{B} \hat{A}). \quad (8^I)$$

Таким же путем доказывається возможность циклической перестановки операторов под знаком S_p :

$$S_p(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = S_p(\hat{C}\hat{A}\hat{B})$$

(9)

и т.п. Заметим, что равенства (7) и (9) предполагают сходимость входящих в них сумм или интегралов.

ДОПОЛНЕНИЕ IV

Инвариантность канонических соотношений и формул для средних

Пусть

$$[\hat{p}_r, \hat{q}_s] = \hat{1} \delta_{rs}. \quad (1)$$

Введем новые переменные посредством унитарного преобразования S :

$$\hat{p}'_r = S \hat{p}_r S^{-1}, \quad (2)$$

$$\hat{q}'_s = S \hat{q}_s S^{-1}. \quad (2^1)$$

Отсюда выведем для обратного преобразования:

$$\hat{p}_r = S^{-1} \hat{p}'_r S, \quad (3)$$

$$\hat{q}_s = S^{-1} \hat{q}'_s S. \quad (3^1)$$

Перемножая (3) и (3¹), учитывая, что $SS^{-1} = 1$, найдем

$$\hat{p}_r \hat{q}'_s = S^{-1} \hat{p}'_r \hat{q}'_s S. \quad (4)$$

$$\hat{Q}_s \hat{P}_r = S^{-1} \hat{Q}_s \hat{P}_r S. \quad (4^I)$$

Поэтому

$$S^{-1} [\hat{P}_r, \hat{Q}_s] S = \hat{1} \delta_{rs}. \quad (5)$$

Умножая (5) слева на S и справа на S^{-1} , замечая, что

$$S \hat{1} S^{-1} \delta_{rs} = \hat{1} \delta_{rs}, \quad (6)$$

получаем

$$[\hat{P}_r, \hat{Q}_s] = \hat{1} \delta_{rs}. \quad (7)$$

Таким образом, переменные \hat{P}_r, \hat{Q}_s образуют систему новых канонически сопряженных переменных.

Обратимся теперь к формулам для средних.

Для преобразованных операторов $\hat{\rho}'$ и \hat{L}' имеем:

$$S_p \hat{\rho}' = S_p (S \hat{\rho} S^{-1}) \quad (8)$$

и

$$\begin{aligned} \bar{L}' &= S_p (\hat{\rho}' \hat{L}') = S_p (S \hat{\rho} S^{-1} S \hat{L} S^{-1}) = \\ &= S_p (\hat{S} (\hat{\rho} \hat{L}) S^{-1}). \end{aligned} \quad (9)$$

Применим теперь циклическую перестановку операторов в формулах (8) и (9), возможность которой доказана в дополнении

III. Получим:

$$\hat{S}_p(\hat{S} \hat{\rho} \hat{S}^{-1}) = S_p(S^{-1} \hat{S} \hat{\rho}) = S_p \hat{\rho} \quad (8I)$$

И из (9):

$$S_p(\hat{S}(\hat{\rho} \hat{L})S^{-1}) = S_p(S^{-1} \hat{S}(\hat{\rho} \hat{L})) = S_p(\hat{\rho} \hat{L}) \quad (9I)$$

Тем самым доказано, что $S_p \hat{\rho}$ и $S_p(\hat{\rho} \hat{L})$ суть инварианты унитарных преобразований.

Ино, что это утверждение может быть распространено на след любого оператора \hat{N} :

$$S_p \hat{N}' = S_p \hat{N} \quad (10)$$

ДОПОЛНЕНИЕ У

О собственных функциях и собственных значениях операторов

Для выводов У-й лекции существенно выражение

$$S_p(\hat{C} \hat{C}^+) = 0. \quad (1)$$

Напишем его в раскрытом виде, ограничившись случаем дискретного спектра операторов \hat{C} и \hat{C}^+ , имеем:

$$S_p(\hat{C} \hat{C}^+) = \sum_{n,s} \hat{C}_{ns} \hat{C}_{sn}^+ = \sum_{n,s} \hat{C}_{ns} \hat{C}_{ns}^* = \sum_{n,s} |\hat{C}_{ns}|^2 \quad (2)$$

Поэтому равенство (1) возможно лишь в том случае, когда все элементы $\hat{C}_{ns} = 0$. Для случая непрерывного спектра доказательство получается, если заменить в (2) суммы на интегралы.

Таким образом, из (2) следует $\hat{C} = \hat{C}^{\dagger} = 0$. Обратимся теперь к доказательству формул (I0) и (II). Сравнение уравнений (8) и (9) показывает, что в уравнение (8) переменная q' входит как произвольный параметр - оператор \hat{L} не действует на эту переменную. Поэтому зависимость $\hat{\rho}$ от переменной q в (9) совпадает с зависимостью от q функции $\psi_{\lambda}(q)$ в (9). Отсюда следует, что матричный элемент $\rho(q, q')$ пропорционален функции $\psi_{\lambda}(q)$. Сравнение уравнений (8^I) и (9^I) показывает, что $\hat{\rho}(q, q')$ пропорционально $\psi_{\lambda}^*(q')$. Следовательно,

$$\hat{\rho}_{\lambda}(q, q') \cong \psi_{\lambda}(q) \psi_{\lambda}^*(q'). \quad (3)$$

Учитывая условие $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, найдем, что множитель пропорциональности в (3) должен равняться 1. Это вытекает из условия нормировки собственных функций (см. формулы У. Г2, Г2^I).

Действительно,

$$\hat{\rho}_{\lambda}^2(q, q') = \int \hat{\rho}_{\lambda}(q, q'') \hat{\rho}_{\lambda}(q'', q') dq'' = \int \psi_{\lambda}(q) \psi_{\lambda}^*(q'').$$

$$\psi_{\lambda}(q'') \psi_{\lambda}^*(q') = \psi_{\lambda}(q) \psi_{\lambda}^*(q') = \hat{\rho}_{\lambda}(q, q'). \quad (4)$$

Докажем теперь формулу (У. Г6). Имеем

$$\begin{aligned} \hat{\rho} \Phi(q) &\equiv \int \hat{\rho}(q, q'') \Phi(q'') dq'' = \int \psi(q) \psi^*(q'') \Phi(q'') dq'' \\ &= \psi(q) \int \psi^*(q'') \Phi(q'') dq'' = \psi(q) \langle \Phi, \psi \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

ДОПОЛНЕНИЕ У1

Соотношение неопределенностей для произвольных величин A и B

Пусть \hat{A} и \hat{B} - два эрмитовых оператора, изображающих динамические величины A и B, а $\hat{\rho}$ есть статоператор

Рассмотрим вспомогательную величину

$$I(\xi) = \text{Sp} \left\{ [\xi \hat{A} \hat{\rho} + i \hat{B} \hat{\rho}] [\xi (A\rho)^+ - i (B\rho)^+] \right\}_I,$$

где ξ — вещественное число. Очевидно, что $I(\xi) \geq 0$.

Раскрывая это выражение, получаем

$$a \xi^2 + b \xi + c \geq 0, \quad (2)$$

где

$$a = \text{Sp} \{ (\hat{A} \hat{\rho}) (\hat{A} \hat{\rho})^+ \} = \text{Sp} (\hat{\rho}^2 \hat{A}^2) = \text{Sp} (\hat{\rho} \hat{A}^2) = \overline{\hat{A}^2} \quad (3)$$

$$b = i \text{Sp} \{ \hat{B} \hat{\rho} (A\rho)^+ - A\rho (B\rho)^+ \} = \\ = i \text{Sp} [\hat{\rho} (\hat{B} \hat{A} - \hat{A} \hat{B})] = \hbar \text{Sp} \{ [\hat{B}, \hat{A}] \hat{\rho} \} = \hbar \overline{[\hat{B}, \hat{A}]} \quad (4)$$

$$c = \text{Sp} [(\hat{B} \hat{\rho}) (B\rho)^+] = \overline{\hat{B}^2}. \quad (5)$$

При выводе (3), (4) и (5) мы воспользовались эрмитовостью операторов \hat{A} и \hat{B} и возможностью циклической перестановки множителей под знаком Sp . Из условия (2) следует, что

$$4ac \geq b^2. \quad (6)$$

Подставляя сюда значения a , c , b , получаем

$$\overline{\hat{A}^2} \overline{\hat{B}^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} |[\hat{A}, \hat{B}]|^2. \quad (7)$$

В частности, если $A = \hat{p} - \bar{p}$, $B = \hat{q} - \bar{q}$, где \bar{p} , \bar{q} суть

средние значения операторов \hat{p} и \hat{q} , то $[\hat{A}, \hat{B}] =$
 $= [\hat{p}, \hat{q}] = 1$ и мы получаем соотношение Гейзенберга

$$\overline{\Delta \hat{p}^2} \overline{\Delta \hat{q}^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

(8)

ДОПОЛНЕНИЕ У1

Вычисления с матрицей $R(q, p)$

Для вывода формул (I3), (I9) и некоторых других, приведенных в УШ лекции, необходимо вычислить матричный элемент произведения двух операторов, \hat{A} и \hat{B} , в новом представлении в пространстве $\mathcal{R}(q, p)$. Обозначим это произведение через $\hat{C} = \hat{A} \hat{B}$. Согласно определению (УШ.3, 10)

$$C(q, p) = \frac{1}{2\pi} \int \hat{C}(q, q'') e^{ip(q''-q)} dq'' \quad (I)$$

где $\hat{C}(q, q'')$ есть матричный элемент оператора \hat{C} , в координатном представлении

$$\hat{C}(q, q'') = \int \hat{A}(q, q''') dq''' \hat{B}(q''', q''). \quad (2)$$

Далее, согласно тому же определению:

$$\hat{A}(q, q''') = \int A(q, p''') e^{-ip'''(q''-q)} dp''', \quad (3)$$

$$\hat{B}(q''', q'') = \int B(q''', p'') e^{-ip''(q''-q''')} dp'' \quad (3)$$

Подставляя эти выражения в(2)и результат - в(1), получаем после интегрирования по q''' , которое приводит к появлению псд

интегралом функции $\delta(p''-p)$, что позволяет выполнить интегрирование и по p'' , следующее выражение:

$$C(q, p) = \int A(q, p+\eta) B(q+\xi, p) e^{-i\xi\eta} d\xi d\eta, \quad (4)$$

где

$$\xi = q''' - q, \quad \eta = p''' - p. \quad (5)$$

Заметим, что во всех этих формулах мы временно положили $\hbar = 1$. Для вычисления $\text{Sp}(\hat{L}\hat{\rho})$ положим $\hat{C} = \hat{L}\hat{\rho}$. Полагая в (2) и (3^I) $q'' = q$, подставляя (3) и (3^I) в (2) и интегрируя $\hat{C}(q, q)$ по q , получим:

$$\begin{aligned} \bar{L} = \text{Sp}(\hat{L}\hat{\rho}) &= \text{Sp} \hat{C} = \int \hat{C}(q, q) dq = \\ &= \int dq dq''' \int L(q, p''') e^{-ip'''(q''-q)} dp''' \int R(q''', p'') e^{-ip''(q-q''')} dp''. \end{aligned} \quad (6)$$

Откуда

$$\bar{L} = \int A(q, p) R(q+\xi, p+\eta) e^{i\xi\eta} d\xi d\eta dq dp.$$

Пользуясь формулой, обратной (3):

$$A(q, p''') = \int A(q, q''') e^{i(p'''q'' - ip'''q)} dq''', \quad (3^{\text{II}})$$

и эрмитовостью элемента $A(q, q''')$, нетрудно показать, что для любого оператора имеет место соотношение

$$A^*(q, p) = \int A(q+\xi, p+\eta) e^{i\xi\eta} d\xi d\eta. \quad (8)$$

Эта формула позволяет выразить в (7) $R(q+\xi, p+\eta)$ через $R^*(q, p)$. Поэтому из (7) и (8) получаем результат

$$\bar{L} = \int R^*(q, p) L(q, p) dq dp, \quad (9)$$

приведенный в лекции (УШ. I3). Из формулы (4) можно получить выражение для скобки Пуассона в пространстве $\mathcal{R}(q, p)$, для этого положим $\hat{C} = \frac{1}{i\hbar} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ и воспользуемся законом умножения (4). Тогда получается:

$$[A, B]_{q,p} = \frac{1}{i\hbar} \int e^{-i\xi\eta/\hbar} d\xi d\eta \{A(q, p+\eta) \cdot$$

$$B(q+\xi, p) - B(q, p+\eta) A(q+\xi, p)\}. \quad (10)$$

Полагая здесь $A(q, p) = H(q, p)$ и $B(q, p) = R(q, p)$, получаем формулу (УШ. I9) той же лекции.

ДОПОЛНЕНИЕ УШ

О сохранении симметрии матрицы плотности

Обратимся к уравнению

$$d\hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] dt \equiv \frac{1}{i\hbar} (\hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H}) dt.$$

Здесь $d\hat{\rho}$ есть приращение матрицы $\hat{\rho}$ за время dt . Пусть

в момент времени t матрица $\hat{\rho}$ симметрична или антисимметрична при перестановке любой пары частиц i, k , в строках или колонках. Подействуем на колонки уравнения (I) оператором этой перестановки $P_{ik}(q')$ (т.е. справа) и рассмотрим сперва поведение члена $\hat{H}\hat{\rho}$; имеем:

$$\hat{H}\hat{\rho}P_{ik}(q') = \pm \hat{H}\hat{\rho}. \quad (2)$$

Подействуем теперь этим же оператором на член $\hat{\rho}\hat{H}$, результат можно записать в виде

$$\hat{\rho}\hat{H}P_{ik}(q') = \hat{\rho}P_{ik}(q'')P_{ik}(q'')\hat{H}P_{ik}(q'); \quad (2^I)$$

так как по внутренним переменным (q'') при перемножении матриц $\hat{\rho}$ и \hat{H} идет интегрирование, то вставленные между $\hat{\rho}$ и \hat{H} операторы $P_{ik}(q'')$ не меняют результата. В силу симметрии оператора \hat{H} при перестановке частиц

$$P_{ik}(q'')\hat{H}P_{ik}(q') = \hat{H}.$$

Поэтому

$$\hat{\rho}\hat{H}P_{ik}(q') = \hat{\rho}P_{ik}(q'')\hat{H} = \pm \hat{\rho}\hat{H}. \quad (3)$$

Отсюда следует, что скобка Пуассона в (I) обладает симметрией оператора $\hat{\rho}$ при перестановке аргументов (q'_i, q'_k) в колонках скобки. Таким же путем доказывается симметрия

или антисимметрия при перестановке аргументов (q_i, q_i') в строках скобки.

В силу этого приращение $d\hat{p}$ оператора $\hat{p}(t)$ за время dt имеет симметрию оператора $\hat{p}(t)$. Таким образом, свойство симметрии или антисимметрии при перестановках частиц в строках и в колонках статоператора \hat{p} сохраняется при движении. Иными словами, операторы $P_{i;k}(q)$ и $P_{i;k}(q')$ являются интегралами движения.

ДОПОЛНЕНИЕ IX

Вычисление интеграла

Интеграл по x , входящий в формулу (XII.18), имеет вид

$$I^{\pm} = \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{\Theta(x')}, \quad (1)$$

где

$$\Theta(x') = \frac{i}{2\hbar\tau} [\mu(x-x')^2 + M(q-x')^2 \pm ikx'] - \frac{x'^2}{a^2}. \quad (2)$$

Представим эту фазу в виде

$$\begin{aligned} \Theta(x') &= -[Ax' + iB]^2 - B^2 + iC \equiv \\ &\equiv -Z^2 - B^2 + iC, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$A = \frac{1}{a^2} - \frac{i}{2\hbar\tau} (\mu + M), \quad (4)$$

$$B^{\pm} = \frac{1}{\hbar\tau} ((\mu x + Mq) \mp k) \frac{1}{2A}, \quad (4^I)$$

$$c = \frac{i}{2\hbar\tau} (\mu x^2 + M Q^2). \quad (4^{\text{II}})$$

Произведенная замена переменных x' на z , $dz = A dx'$, позволяет выполнить интегрирование в (I). Результат гласит:

$$I^{\pm} = \frac{\sqrt{\pi}}{A} e^{-(B^{\pm})^2 + ic}. \quad (5)$$

Пользуясь (4^I), представим $(B^{\pm})^2$ в виде $\text{Re}(B^{\pm})^2 + i \text{Im}(B^{\pm})^2$ и мнимую часть присоединим к фазе ic . Тогда

$$I^{\pm} = \frac{\sqrt{\pi}}{A} e^{-\text{Re}(B^{\pm})^2 + ic'}. \quad (5^{\text{I}})$$

Из (4^I) получаем при $\mu \ll M$ выражение для

$$\text{Re}(B^{\pm})^2 = \frac{[Q \mp v\tau]^2}{a^2}, \quad (6)$$

где $v = \frac{\hbar k}{M}$ есть скорость шарика после рассеяния. Заметим, что более точный знаменатель в (6) есть $a^2 + \frac{4\hbar^2\tau^2}{a^2 M^2}$, который

учитывает распыливание волнового пакета. Это распыливание при большой массе шарика M несущественно. Из (6) видно, что функция $\text{Re}(B^{\pm})^2$ сосредоточивается в области $Q = \pm v\tau$, что отображает движение шарика направо или налево.

ДОПОЛНЕНИЕ X

Матрица плотности для осциллятора, находящегося в тепловом равновесии

Уравнения для величины $Z(x, x')$, пропорциональной мат-

рице плотности в раскрытом виде, гласит:

$$\frac{\partial Z(x, x')}{\partial \beta} + \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} x^2 \right] Z(x, x') = 0. \quad (1)$$

Полагая

$$Z(x, x') = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-A - \Phi(x, x')} \quad (2)$$

и

$$\Phi(x, x') = \frac{1}{2} (Bx^2 - 2Cxx' + Bx'^2) \quad (3)$$

и подставляя (3) в (2), а (2) в (1), получим:

$$-\frac{\partial A}{\partial \beta} - \frac{1}{2} \frac{\partial B}{\partial \beta} x^2 + \frac{\partial C}{\partial \beta} xx' - \frac{1}{2} \frac{\partial B}{\partial \beta} x'^2 - \\ - \frac{1}{2} [Bx^2 + C^2 x'^2 - 2BCxx' - B - x^2] = 0. \quad (4)$$

Откуда, сравнивая коэффициенты при x^2 , xx' и x'^2 найдем систему уравнений:

$$a) \frac{\partial A}{\partial \beta} - \frac{1}{2} B = 0; \quad b) \frac{\partial C}{\partial \beta} + BC = 0; \quad c) \frac{\partial B}{\partial \beta} + B^2 - 1 = 0 \quad (5)$$

и

$$d) \frac{\partial B}{\partial \beta} + C^2 = 0.$$

Уравнение c) интегрируется элементарно и приводит к реше-

нию $B = \operatorname{coth} \beta$. Из уравнения d) определяем коэффициент

$C = \pm 1/\sinh \beta$ и, наконец, из уравнения a) находим квадратурой

$A = \frac{1}{2} \ln(\sinh \beta) + \text{const}$. Граничное условие (XIII.12) определяет выбор знака коэффициента (следует брать знак +), а

условие нормировки (I6) определяет константу для A :
 $\text{const} = \frac{1}{2} \ln 2$. Таким образом,

$$A = \frac{1}{2} \ln(\sinh \beta) + \frac{1}{2} \ln 2 ; B = \cot \text{gh} \beta ;$$

$$C = \text{cosech} \beta . \quad (6)$$

Отсюда

$$a^2 = B - C = \text{tgh} \frac{\beta}{2} . \quad (7)$$

ДОПОЛНЕНИЕ XI

Вычисление средних значений $\langle x^2 \rangle$ и $\langle y^2 \rangle$

Вычисление этих средних сводится к вычислению интегралов (XII.25) и (XIII.25^I). Удобно перейти к полярной системе координат r, φ и вместо z взять переменную $z = \frac{1}{2} r^2$. Типичные интегралы, которые при этом появляются в (25) и (25^I), на основании (26), (27) и (27^I) имеют вид:

$$I_1(M, N) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} e^{-z(M+N \cos \psi)} dz, \quad (I)$$

$$I_2(M, N) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} e^{-z(M+N \cos \psi)} z dz, \quad (2)$$

$$I_3(M, N) = \int_0^{2\pi} \cos \psi d\varphi \int_0^{\infty} e^{-z(M+N \cos \psi)} z dz, \quad (3)$$

$$I_4(M, N) = \int_0^{2\pi} \sin \psi \, d\psi \int_0^{\infty} e^{-z(M+N\cos\psi)} z \, dz = 0. \quad (4)$$

Первый интеграл $I_1(M, N)$ после интегрирования по z сводится к интегралу

$$I_1(M, N) = \int_0^{2\pi} \frac{d\psi}{M+N\cos\psi} = \frac{1}{M} \frac{1}{2} \int_{\delta}^{4\pi+\delta} \frac{d\psi}{1+\varepsilon\cos\psi} = \quad (5)$$

$$= \frac{1}{M} \int_0^{2\pi} \frac{d\psi}{1+\varepsilon\cos\psi} = \frac{2}{M} \frac{\pi}{\sqrt{1-\varepsilon^2}}.$$

Напомним, что угол $\delta = 2\omega t$ и $\varepsilon = |N/M| < 1$ x). Таким образом,

$$I_1(M, N) = \frac{2\pi}{(M^2 - N^2)^{1/2}}. \quad (6)$$

Далее, интеграл $I_2(M, N)$ равен:

$$I_2(M, N) = - \frac{\partial I_1(M, N)}{\partial M} = \frac{2\pi M}{(M^2 - N^2)^{3/2}}; \quad (7)$$

наконец, интеграл $I_3(M, N)$ равен:

$$I_3(M, N) = - \frac{\partial I_1(M, N)}{\partial N} = - \frac{2\pi N}{(M^2 - N^2)^{3/2}}. \quad (7^I)$$

Согласно (25), (25^I) и (27), (27^I) имеем

$$\langle \frac{1}{2} x^2(t) \rangle = \frac{a^2 b}{2\pi} \left\{ I_2(M, N) + I_3(M, N) \cos 2\omega t \right\}. \quad (8)$$

x) См. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. "Наука", М., 1971, стр. 380, формула № 3.613 (I).

Окончательно, полагая, что $M^2 = a^2 + b^2$, $N^2 = a^2 - b^2$,
 получаем:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{2} x^2(t) \right\rangle &= \\ &= \frac{1}{8} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right) + \frac{1}{8} \left(\frac{1}{a^2} - \frac{1}{b^2} \right) \cos 2\omega t \quad (9) \\ \left\langle \frac{1}{2} y^2(t) \right\rangle &= \frac{1}{8} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right) - \frac{1}{8} \left(\frac{1}{a^2} - \frac{1}{b^2} \right) \cdot \cos 2\omega t. \quad (9I) \end{aligned}$$

Эти формулы и приведены в XIII лекции.

Литература

1. Д.И.Блохинцев. Принципиальные вопросы квантовой механики. Изд-во "Наука", 1966.
2. Т.Уиттакер. Аналитическая динамика, ОНТИ, 1937.
3. Дж.Гиббс. Основные принципы статистической механики. Гостехиздат, 1946.
4. Л.Ландау и Е.Лифшиц. Статистическая физика, гл. I, Гостехиздат, 1951.
5. Д.И.Блохинцев и Ч.Брискина. Вестник МГУ, №10, стр. II5 (1942). См. также: Д.Блохинцев, УФН, 122, стр. 745 (1977).
6. В.Гейзенберг. Физические основы квантовой механики. ГТТИ, 1932.
7. Д.И. Блохинцев, УФН, т. 122, стр. 745 (1977).

8. И.фон Нейман. Математические основы квантовой механики. Изд-во "Наука", 1964 .
9. К.В.Никольский. Квантовые процессы. Гостехиздат, 1940 .
10. Д.И.Блохинцев. Физический журнал СССР, т.2, стр.71 (1940).
11. Д.И.Блохинцев и П.Э.Немировский. Физический журнал СССР, т.3, стр.191 (1940).
12. Д.И.Блохинцев. ЖЭТФ, т.10, стр.1263 (1940).
13. А.М.Яглом и И.Яглом. Вероятность и информация. Физматгиз, 1960 .
14. Н.Н.Боголюбов. О некоторых статистических методах в математической физике. Изд-во АН УССР, Киев, 1945 .
15. N.N.Bogalubov. On the stochastic processes in the dynamical systems. Dubna, B17-10514, 1977 .
16. Н.Н.Боголюбов. Проблемы динамической теории в статистической физике, Гостехиздат, 1946 .
17. А.В.Шелест. Препринт ИТФ 67-II, Киев, 1967.
18. E.V.Davies. Quantum theory of open systems. Acad.Press, London, 1976 .
19. A.Uhlmann. Zur Beschreibung irreversibler Quantum prozesse. Sitz.Bericht d.Ak.d.Wiss.d.DDR 14N, Akademie Verlag, 1976 .
20. R.S.Ingarden and A.Kossakowski. On Quantum mechanics of Open systems. Annals of Physics, v.29, N 2 (1975).
21. Д.И.Блохинцев. Основы квантовой механики. "Наука", 1976 .
22. Д.В.Петров. Естественный реактор. УФН, т.123, с. 473 (1977).

О Г Л А В Л Е Н И Е

Стр.

Лекция I	3
Лекция II. Классический ансамбль Гиббса	6
Лекция III. Классическая статистическая механика в пространстве $R(q, q')$	14
Лекция IV. Квантовая механика как обобщение классической статистической механики	19
Лекция V. Теория когерентного ансамбля	28
Лекция VI. Вероятности и квадратичные отклонения ..	37
Лекция VII. Некогерентный ансамбль	43
Лекция VIII. Уравнение движения для статоператора в различных представлениях	49
Лекция IX. Симметрии в системах тождественных частиц	56
Лекция X. Энтропия и информация	61
Лекция XI. Теория открытых систем и процесс измерения	68
Лекция XII. Простейший пример взаимодействия микро-частиц с измерительным прибором	80
Лекция XIII. Термодинамически неустойчивый детектор	87
Лекция XIV. Детектор с цепной реакцией	99
Лекция XV. Работа фотопластинки или пузырьковой камеры	107
Дополнение I	110
Дополнение II	111
Дополнение III	112
Дополнение IV	114
Дополнение V	116
Дополнение VI	117
Дополнение VII	119
Дополнение VIII	121
Дополнение IX	123
Дополнение X	124
Дополнение XI	126
Литература	128