

Семинар 1. Основы квантовой механики.

8 сентября 2018 года

Формализм бра- и кет-векторов

Обсудим с технической точки зрения, с какими объектами оперирует квантовая механика. Большую часть свойств мы просто постулируем, а затем будем исследовать физические выводы, следующие из построенной теории.

- Состояние *замкнутой* системы полностью описывается **волновой функцией** $|\psi\rangle$ (**вектор состояния, кет-вектор**). Волновая функция представляет собой вектор — элемент **гильбертового пространства** $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Волновые функции, отличающиеся на произвольный комплексный множитель, отвечают одной и той же физической системе.

Гильбертово пространство — это обобщение евклидова пространства на бесконечномерный случай. Напомним, что евклидово пространство — это линейное пространство (над комплексными числами $\mathbb{C}$) с определённым на нём скалярным произведением. Скалярное произведение волновых функций $|\chi\rangle$ и $|\psi\rangle$ обозначается как $\langle\chi|\psi\rangle$. Вектор $\langle\chi| = (|\chi\rangle)^\dagger$ представляет собой эрмитово сопряжение¹ вектора $|\chi\rangle$ и называется **бра-вектор**. Для удобства чаще всего рассматриваются волновые функции, нормированные на единицу, то есть $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Структура гильбертового пространства $\mathcal{H}$ (базис, размерность, и т.п.) определяется исключительно физической постановкой задачи (точно так же, как в классической физике определяется конфигурационное, или фазовое, пространство).

- Произвольной физической величине O (такие величины в квантовой механике называются **наблюдаемыми** (англ. observable); примерами может служить энергия, импульс, координата, и т.п.) соответствует линейный оператор $\hat{O}$, действующий на этом гильбертовом пространстве. Этот оператор должен быть эрмитовым и самосопряжённым²: $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$. Как именно строится это соответствие, зависит от классического смысла величины O — мы обсудим это соответствие на примерах.

Оператор $\hat{O}^\dagger$ называется **эрмитово сопряжённым** к $\hat{O}$, если

$$\forall |\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H} \mapsto \langle\chi|\hat{O}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{O}^\dagger|\chi\rangle^* \equiv \langle\hat{O}^\dagger\chi|\psi\rangle \quad (1)$$

В случае конечномерного пространства, эрмитово сопряжение представляет собой транспонирование и комплексное сопряжение соответствующей матрицы: $\hat{O}^\dagger \equiv (\hat{O}^T)^*$. Объекты вида $\langle\chi|\hat{O}|\psi\rangle$ называются **матричными элементами** оператора $\hat{O}$.

Эрмитовы операторы обладают несколькими замечательными свойствами, которые будут играть ключевую роль в квантовой механике:

- Эрмитовы операторы диагонализуются. Это означает, что всегда существует какой-то базис из собственных векторов $\{|o_n\rangle\}$, в котором оператор имеет диагональный вид³ $\hat{O} = \text{diag}(\{o_n\})$. Собственные числа эрмитового оператора всегда вещественны⁴:

$$\hat{O}|o_n\rangle = o_n|o_n\rangle, \quad o_n \in \mathbb{R} \quad (2)$$

Набор из собственных векторов и собственных значений $\{|o_n\rangle, o_n\}$ представляет собой **спектр** оператора $\hat{O}$. Для простоты мы будем пока считать спектр дискретным (имея под этим в виду, что базис во всяком случае счётный) и невырожденным (одному собственному числу соответствует один собственный вектор).

¹В конечномерном случае это представляет собой комплексное сопряжение и транспонирование

²Понятия *эрмитовости* и *самосопряжённости* часто совпадают, но иногда могут различаться; и иногда это проявляется при решении конкретных задач, смотри сноску 4. На самом деле, достаточно существование *самосопряжённого расширения*. Подробнее можно прочитать в [Галицкий, задача 1.29].

³Обратите внимание, тут приведён удобный и часто применяемый способ обозначать собственные вектора соответствующими им собственными числами. Действительно, если из контекста понятно, о какой наблюдаемой мы сейчас говорим, то (если отсутствует вырождение) задав собственное число, мы можем однозначно понять, и о каком векторе мы говорим. Скажем, если у матрицы $\hat{O}$ есть собственное число 5, то соответствующий этому числу собственный вектор мы будем обозначать просто $|5\rangle$.

⁴Это свойство в дальнейшем будет соответствовать тому, что физические величины — энергия, координата, импульс — тоже вещественны

- Собственные вектора, соответствующие различным собственным числам, ортогональны. Эти собственные вектора можно выбрать ортонормированными, и они образуют **полный набор**⁵. Два последних утверждения выражаются в соотношениях ортогональности и полноты, соответственно:

$$\langle o_n | o_m \rangle = \delta_{nm}, \quad \sum_n |o_n\rangle \langle o_n| \equiv \hat{\mathbb{I}} \quad (3)$$

Заметим, что $\hat{\mathbb{P}}(o_n) = |o_n\rangle \langle o_n|$ представляет собой проектор на собственный вектор $|o_n\rangle$, и он тоже представляет собой эрмитов оператор — наблюдаемую.

Измерение

Одно из ключевых понятий в квантовой механике — это процесс **измерения**. Дальше в курсе мы будем более подробно обсуждать, чему соответствует этот процесс физически. Сейчас же нам достаточно будет знать только несколько его свойств:

- Измерение можно считать мгновенным процессом.
- Измерение является **случайным** процессом. Результатом измерения величины $\hat{O}$ может оказаться только какое-то из её собственных значений o_n .
- Если в результате измерения было получено конкретное значение o_n , то волновая функция мгновенно заменяется на $|o_n\rangle$. Этот процесс носит название **редукции фон Неймана**.

О случайности Случайность является одним из ключевых фундаментальных свойств квантовой механики. В классической физике случайность возникает, как правило, в результате *незнания* каких-то свойств системы — к примеру, при описании систем с очень большим количеством степеней свободы. В квантовой механике случайность принципиальна и заложена на фундаментальном уровне.

- В физике нет смысла говорить о случайности, если нет **ансамбля** — большого количества одинаковых систем и экспериментов. По этой причине важно понимать, что в квантовой механике мы всегда работаем с ансамблями. Утверждение о том, что данная конкретная система описывается конкретной волновой функцией $|\psi\rangle$, в общем-то, не несёт смысла.
- В результате усреднения измерений по такому ансамблю (имея в виду приготовление большого количества одинаковых систем и проведения над ними измерения), мы получим **среднее значение** наблюдаемой $\hat{O}$:

$$\langle O \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \quad (4)$$

Предположим теперь, что мы интересуемся не только средним значением, но и всей функцией распределения — скажем, хотим узнать, с какой вероятностью мы можем получить данное конкретное собственное число o_n ? Для этого мы можем придумать специальную наблюдаемую, которая равна единице для состояния $|o_n\rangle$, и нулю для всех остальных векторов. С такой наблюдаемой мы уже сталкивались выше — это проектор $\hat{\mathbb{P}}(o_n) = |o_n\rangle \langle o_n|$. Таким образом, вероятность того или иного исхода даётся:

$$P(O = o_n) = \langle \psi | \hat{\mathbb{P}}_n | \psi \rangle = |\langle o_n | \psi \rangle|^2 \quad (5)$$

- Волновую функцию можно разложить по базису собственных векторов нашей наблюдаемой. Пользуясь свойством полноты (3), мы можем записать:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |o_n\rangle = \sum_n |o_n\rangle \langle o_n | \psi \rangle \quad (6)$$

Коэффициенты разложения $c_n = \langle o_n | \psi \rangle$ называют **амплитудами вероятности**. Таким образом, $|c_n|^2$ дают вероятность, что при измерении величины $\hat{O}$ будет получено значение o_n . Последнее утверждение часто выносится в качестве отдельного постулата.

- Набор этих коэффициентов, очевидным образом, полностью характеризует волновую функцию. О наборе величин c_n в таком случае говорят как о волновой функции в **O-представлении**⁶.

⁵Для конечномерных операторов это следует из курса линейной алгебры. Для бесконечномерных операторов это утверждение нетривиально, и математики при определённых условиях умеют это доказывать. Мы же примем на веру, что в «хороших» случаях всё работает «как надо».

⁶О следует заменить на конкретную физическую величину; если говорить о квантовой механике одной частицы, то чаще всего говорят об координатном представлении. Стоит отметить, что выбор представления, в котором приходится работать, диктуется исключительно вопросом удобства решения конкретной задачи. Заранее никакое из представлений не является выделенным!

Уравнение Шрёдингера

- Временная эволюция задаётся с помощью самосопряжённого оператора $\hat{H}$, называемого **гамильтонианом**, и задаётся **нестационарным уравнением Шрёдингера** (УШ):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (7)$$

То, что это уравнение должно быть уравнением первого порядка (в отличие от, например, классической механики — уравнение Ньютона представляет собой уравнение второго порядка), связано с первым постулатом — если бы уравнение было, скажем, второго порядка, то для него необходимо было бы задать $|\psi(t_0)\rangle$ и $|\partial\psi/\partial t(t_0)\rangle$. Линейность этого уравнения выражает собой **принцип суперпозиции**. Самосопряжённость оператора $\hat{H}$ гарантирует сохранение нормировки волновой функции, $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \text{const}$. Наконец, самосопряжённость также означает, что $\hat{H}$ соответствует какая-то наблюдаемая; как мы увидим дальше, эта наблюдаемая — энергия.

В случае, когда гамильтониан явно не зависит от времени, решение уравнения Шрёдингера можно записать в виде матричной экспоненты (или же ее обобщения на бесконечномерный случай)⁷. Сделаем это, введя **оператор эволюции** во времени $\hat{U}_t$ (функцию от оператора можно понимать, как ряд):

$$\hat{U}_t = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right). \quad (8)$$

Тогда $|\psi(t)\rangle = \hat{U}_t |\psi(0)\rangle$ для любого начального состояния $|\psi(0)\rangle$. Из эрмитовости гамильтониана следует **унитарность** эволюции во времени:

$$U_t^\dagger U_t = \mathbb{I}. \quad (9)$$

Легко видеть, что унитарность эволюции обеспечивает сохранение скалярного произведения состояний: $\langle\psi(t)|\chi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\chi(0)\rangle$ для любой пары $|\psi\rangle, |\chi\rangle$. В частности, из нее следует сохранение нормировки $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle$. Можно заметить, что редукция фон Неймана не является унитарной операцией.

О редукции фон Неймана⁸ Попытки увязать мгновенное изменение волновой функции с принципом причинности часто вызывают определённые затруднения и приводят к различным парадоксам. На самом деле, никакого парадокса тут нет.

Во-первых, для понимания процесса редукции, полезно привести аналогичный пример из классической механики. Предположим, что мы описываем сложное движение какой-то классической частицы — например, в результате диффузии. В таком случае для описания состояния частицы мы применяем классическую функцию распределения, $P(x, t)$. Предположим теперь, что в какой-то момент t_0 мы пронаблюдали нашу частицу в какой-то конкретной точке пространства, x_0 . Очевидно, что для дальнейшего описания движения нашей частицы нам необходимо модифицировать функцию распределения, чтобы она учитывала это новое знание — $P(x, t_0) = \delta(x - x_0)$. Хотя модификация эта происходит мгновенно, но никакого парадокса тут нет — ведь функция распределения не является объективной реальностью, а отражает лишь степень нашего **знания** о системе.

В квантовой механике в процессе измерения есть как объективная, так и субъективная составляющие. Объективная часть заключается в том, что измерение — это акт взаимодействия с измеряющим прибором. Это взаимодействие в любом случае влияет на систему (в отличие от классической механики, где часто влиянием измеряющего прибора можно пренебречь) — это приводит к процессам **дефазировки** и **декогеренции**. Разумеется, как и любое другое взаимодействие, оно удовлетворяет принципу причинности⁹.

В результате такого взаимодействия уже невозможно описывать систему на языке волновых функций (поскольку наша квантомеханическая система уже не замкнута), и для этого применяется аппарат **матрицы плотности**, с которым мы ознакомимся позже. Субъективная составляющая заключается в появлении нового знания о системе — результата измерения. Поэтому, например, в квантовой механике осмысленной является постановка вопроса, в котором измерение проводится, а результат измерения остаётся неизвестен или не интересен. В таком случае субъективная составляющая вовсе отсутствует.

В этом смысле редукция фон Неймана отражает как объективную составляющую — дефазировку и декогеренцию — и субъективную составляющую — появление нового знания о системе. Последнее же полностью аналогично вышеописанному классическому процессу «коллапса функции распределения».

Во-вторых, продолжая классическую аналогию — можно учесть знание о том, что частица была обнаружена в точке x_0 вовсе не модифицируя функции распределения. Несколько даже более привычный способ — это использовать понятие **условной вероятности**. Для описания движения частицы при $t > t_0$ нужно задавать не просто вопрос «какая вероятность, что частица будет

⁷В случае наличия явной зависимости гамильтониана от времени $\hat{H} = \hat{H}(t)$ решение можно записать в виде так называемой Т-упорядоченной экспоненты $U_t = T \exp\left(-i/\hbar \int_0^t dt H(t)\right)$. Она получается разбиением интервала времени на бесконечно маленькие кусочки и взятием произведением обычных матричных экспонент на каждом таком кусочке.

⁸Ниже написание является бредом сумасшедшего автора и отражает его взгляд на так называемые вопросы «интерпретации квантовой механики». Этот взгляд может не совпадать со взглядами, изложенными в учебниках, других книжках, Википедии и других источниках информации.

⁹Тут стоит сделать замечание, что, вообще говоря, в этом курсе мы занимаемся нерелятивистской квантовой механикой, которая, как и нерелятивистская классическая механика, о скорости света ничего «не знает». Это утверждение относится к «правильной», релятивистской квантовой механике — квантовой теории поля.

обнаружена в точке x в момент времени t » (величина $P(x, t)$), но добавлять также «при условии, что в момент времени t_0 она была обнаружена в точке x_0 » (величина $P(x, t|x_0, t_0)$). В таком случае, «редукции» функции распределения можно полностью избежать. Минус этого подхода заключается в том, что в результате описание получается несколько более громоздким, если количество таких измерений, и, соответственно, условий, растёт.

В этом же смысле можно работать с квантовой механикой, совершенно не прибегая к понятию редукции фон Неймана. Просто необходимо придумывать чуть более сложные наблюдаемые, которые учитывают результаты измерений и отвечают условным вероятностям. Такой способ попросту является более громоздким, требует введения новых сущностей (матрицы плотности) и им, как правило, никто не пользуется.

Энергетическое представление Особое значение для решения задач квантовой механики имеет базис собственных функций оператора энергии — функций, которые удовлетворяют **стационарному уравнению Шрёдингера**:

$$\hat{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle \quad (10)$$

Временная эволюция собственных состояний гамильтониана тривиальна, сводится к «накручиванию фазы»:

$$|\psi_E(t)\rangle = \hat{U}_t |\psi_E\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi_E\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\psi_E\rangle \quad (11)$$

Это, в свою очередь, означает, что система, будучи приготовленной в таком физическом состоянии, в нём и останется — ведь системы, отличающиеся на множитель, физически неотличимы. Поэтому такие состояния называют **стационарными состояниями**.

Если мы умеем находить все стационарные состояния — а их набор образует базис! — то мы, в действительности, умеем решать УШ. Действительно, пусть мы решаем УШ с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |\psi\rangle$. Разложим вектор состояния по базису стационарных состояний (следуя терминологии, изложенной выше — перейдём в *энергетическое представление*) $|n\rangle$ ($\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$) :

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle. \quad (12)$$

Линейность уравнения Шрёдингера позволяет записать результат эволюции во времени как линейную комбинацию про-эволюционированных компонент с теми же коэффициентами:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}_t |\psi\rangle = \sum_n \psi_n \hat{U}_t |n\rangle = \sum_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle. \quad (13)$$

Таким образом, мы научились полностью решать нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle n|\psi\rangle \quad (14)$$

Пример двухуровневой системы. Молекула аммиака¹⁰ NH_3 .

Будем рассматривать молекулу аммиака (представляющую собой неправильный тетраэдр с тремя молекулами водорода H в основании, и молекулой азота N в вершине) забыв на время о её поступательном или вращательном движении. Эта молекула допускает два различных состояния, которые получаются друг из друга операцией зеркального отражения молекулы относительно плоскости атомов водорода; мы будем их называть $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, и они будут образовывать базис нашего гильбертова пространства для данной задачи.

Из симметрии задачи естественно, что энергия этих состояний одинакова: $E_0 = \langle \uparrow | \hat{H} | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \hat{H} | \downarrow \rangle$; в силу эрмитовости гамильтониана, общий его вид — следующий:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -\Delta \\ -\Delta^* & E_0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

(для удобства тут и ниже мы будем считать $\Delta \in \mathbb{R}$ и $\Delta > 0$, этого всегда можно добиться, переобозначив $|\uparrow\rangle \rightarrow e^{i\varphi} |\uparrow\rangle$ ¹¹). Собственные числа дают спектр возможных значений энергии:

$$E_1 = E_0 - \Delta \Rightarrow |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad (16)$$

$$E_2 = E_0 + \Delta \Rightarrow |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \quad (17)$$

¹⁰Эта классическая задача обсуждается в не менее классической книге [ФЛФ, глава 7 «Аммиачный мазер»].

¹¹На самом здесь скрывается содержательное утверждение, которое эквивалентно тому, что состоянием с минимальной энергией является именно комбинация (16). Возможно, мы обсудим это утверждение в дальнейшем.

Будем решать следующую задачу. В начальный момент времени система была приготовлена в состоянии $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$. Мы интересуемся вероятностью обнаружить её через время t в каждом из состояний $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$. Следуя логике из абзаца «энергетическое представление», нам нужно разложить начальное условие по стационарным состояниям:

$$|\psi(0)\rangle = |1\rangle \cdot \langle 1|\psi(0)\rangle + |2\rangle \cdot \langle 2|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle). \quad (18)$$

Значит, дальнейшая эволюция следующая:

$$|\psi(t)\rangle = \psi_1(t) |1\rangle + \psi_2(t) |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-iE_1 t/\hbar} |1\rangle + e^{-iE_2 t/\hbar} |2\rangle). \quad (19)$$

Наконец, чтобы найти искомые вероятности, нам необходимо вернуться к базису $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2} \left(e^{-iE_1 t/\hbar} + e^{-iE_2 t/\hbar} \right) |\uparrow\rangle + \frac{1}{2} \left(e^{-iE_1 t/\hbar} - e^{-iE_2 t/\hbar} \right) |\downarrow\rangle = e^{-iE_0 t/\hbar} \cdot (\cos(\Delta t/\hbar) |\uparrow\rangle + i \sin(\Delta t/\hbar) |\downarrow\rangle) \quad (20)$$

что даёт нам искомые вероятности:

$$P_\uparrow(t) = \cos^2(\Delta t/\hbar), \quad P_\downarrow(t) = \sin^2(\Delta t/\hbar) \quad (21)$$

Таким образом, за счёт существования оффдиагонального матричного элемента Δ , «перемешивающего» состояния $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, возникает **туннелирование** между этими двумя состояниями в виде когерентных осцилляций (величина Δ в этой связи носит название **туннельного матричного элемента**). Это явление носит название **осцилляций Раби**.

Матрицы Паули Двухуровневая система – это простейшая система с нетривиальным гильбертовым пространством и гамильтонианом. Поэтому они постоянно возникают в теоретической физике во множестве разных контекстов, зачастую в виде приближений каких-то более сложных систем. Имеется стандартный базис в пространстве эрмитовых матриц, состоящий из единичной матрицы и **матриц Паули**

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Легко видеть, что любой гамильтониан 2×2 раскладывается по единичной матрице и матрицам Паули:

$$\hat{H} = c \cdot \hat{\mathbb{I}} + b_x \hat{\sigma}^x + b_y \hat{\sigma}^y + b_z \hat{\sigma}^z = c + (\mathbf{b}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}), \quad (23)$$

где в последнем выражении под c подразумевается $c \cdot \hat{\mathbb{I}}$.

Простейший пример двухуровневой системы — спин $1/2$ в нерелятивистской квантовой механике. В этом случае $\mathbf{b}$ имеет смысл магнитного поля (с точностью до множителя).

Гильбертово пространство объединения подсистем

Если имеется две подсистемы с гильбертовыми пространствами $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$, то вся система описывается гильбертовым пространством $\mathcal{H}$, которое является тензорным произведением $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2. \quad (24)$$

Эти слова означают, что если имеются базисы $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots\}$ в $\mathcal{H}_1$ и $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots\}$ в $\mathcal{H}_2$, то базис в $\mathcal{H}$ можно задать, как множество попарных произведений $\{|\psi_1\rangle |\varphi_1\rangle, |\psi_1\rangle |\varphi_2\rangle, |\psi_2\rangle |\varphi_1\rangle, |\psi_2\rangle |\varphi_2\rangle, \dots\}$, размерности пространств при этом перемножаются. Тензорное произведение операторов $\mathcal{O}_1 \mathcal{O}_2$ (где каждый действует в своем подпространстве) определяется действием на базисные элементы: $\mathcal{O}_1 \mathcal{O}_2 (|\psi_1\rangle |\varphi_1\rangle) = \mathcal{O}_1 |\psi_1\rangle \mathcal{O}_2 |\varphi_1\rangle$.

Элементы полного гильбертова пространства $\mathcal{H}$, которые представимы в виде $|\psi\rangle |\varphi\rangle$ (где $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ не обязательно элементы базиса) называют **разложимыми**. Остальные являются квантомеханически **запутанными**.

Пример Рассмотрим два спина $1/2$ в состоянии $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2)$. Оператор $\sigma_{x1} \sigma_{z2}$ действует на $|\psi\rangle$ так

$$\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^z |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\sigma}_1^x |\uparrow\rangle_1 \hat{\sigma}_2^z |\uparrow\rangle_2 + \hat{\sigma}_1^x |\downarrow\rangle_1 \hat{\sigma}_2^z |\downarrow\rangle_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1 (-|\downarrow\rangle_2)). \quad (25)$$

Видно, что очень удобно работать в обозначениях матриц Паули, не выписывая явно матрицу 4×4 (или больше). Но иногда (например, для расчетов в Wolfram Mathematica) бывает нужно это все же сделать. Если базис для одного спина был таким $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, то теперь рассмотрим базис $\{|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2, |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2\}$. Чтобы построить матрицу отвечающую разложимому оператору $\mathcal{O}_1 \mathcal{O}_2$ нужно элементы $\mathcal{O}_1$ сделать блоками 2×2 , домноженными на $\mathcal{O}_2$. Это утверждение легче понять на примерах:

$$\hat{\sigma}_1^x \equiv \hat{\sigma}_1^x \hat{\mathbb{I}}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2^z \equiv \hat{\mathbb{I}}_1 \hat{\sigma}_2^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Мысленный эксперимент Greenberger-Horne-Zeilinger-Mermin

Данный мысленный эксперимент был предложен как улучшение эксперимента Белла по опровержению *локального реализма* — различных альтернативных теорий, включая теории скрытых параметров, утверждающих, что квантовая механика неверна, а заложенная в ней случайность является результатом незнания (возможно — принципиального) каких-то скрытых свойств системы. Другими словами ни одна сколь угодно сложная классическая теория не способна дать предсказание для эксперимента GHZM, совпадающее с предсказанием квантовой механики. В отличие от эксперимента Белла, который носит вероятностный характер, этот эксперимент однозначно опровергает локальный реализм.

Рассмотрим трехспиновое состояние

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_3 - |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 |\downarrow\rangle_3). \quad (27)$$

и эрмитовы операторы $\hat{O}_1$ — $\hat{O}_4$ следующего вида:

$$\hat{O}_1 = \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^y \hat{\sigma}_3^y \Rightarrow \hat{O}_1 |\psi\rangle = +1 |\psi\rangle, \quad (28)$$

$$\hat{O}_2 = \hat{\sigma}_1^y \hat{\sigma}_2^x \hat{\sigma}_3^y \Rightarrow \hat{O}_2 |\psi\rangle = +1 |\psi\rangle, \quad (29)$$

$$\hat{O}_3 = \hat{\sigma}_1^y \hat{\sigma}_2^y \hat{\sigma}_3^x \Rightarrow \hat{O}_3 |\psi\rangle = +1 |\psi\rangle, \quad (30)$$

$$\hat{O}_4 = \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \hat{\sigma}_3^x \Rightarrow \hat{O}_4 |\psi\rangle = -1 |\psi\rangle. \quad (31)$$

Как видно, $|\psi\rangle$ является собственным вектором для всех операторов и при измерении $\hat{O}_1$ — $\hat{O}_3$ всегда будет получаться «+1», а при измерении $\hat{O}_4$ «−1».

Представим, как бы выглядел этот эксперимент с точки зрения классической физики. Пусть у нас имеется лаборатория, которая приготавливает *неизвестно что*. Эта лаборатория одновременно отправляет три части *неизвестно чего* трём различным экспериментаторам (назовём их в целях конспирации 1, 2, 3), которые расположены на достаточно большом расстоянии друг от друга (так что их эксперименты не могут быть связаны причинной связью). У экспериментаторов имеются *чёрные ящики*, на которых имеется дополнительный переключатель, с помощью которого они имеют возможность выбрать одну из двух величин (назовём их X и Y), которые они измеряют. Экспериментаторы выбирают положение этого переключателя случайным образом (с помощью броска монеты), а затем проводят *акт измерения*, в результате которого каждый ящик выдаёт им одно из двух чисел — +1 или -1.

Проводится миллион таких экспериментов, и их результаты отправляются обратно в лабораторию, где все данные приводятся в некоторую сводную таблицу для дальнейшего анализа.

Таблица 1: Пример результата эксперимента

№	Величина 1	Результат 1	Величина 2	Результат 2	Величина 3	Результат 3
1	X	+1	Y	-1	Y	-1
2	X	-1	X	-1	X	-1
3	Y	-1	Y	+1	Y	+1
4	X	+1	Y	-1	X	+1
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

Поскольку выбор величины был случаен, то примерно в 1/8 (125000 шт.) строк набор величин будет (X, Y, Y) , и примерно столько же — (Y, X, Y) , (Y, Y, X) . Неожиданно для себя, в лаборатории обнаруживают, что если в таких строках все три таких результата перемножить, то *всегда* получается значение $X_1 Y_2 Y_3 = Y_1 X_2 Y_3 = Y_1 Y_2 X_3 = +1$.

Теперь необходимо внимательно следить за логикой. В лаборатории предполагают, что обе величины X и Y в момент измерения объективно имели какие-то фиксированные значения. Эти значения могли определяться какими-то внутренними (*скрытыми*) параметрами или степенями свободы систем; может быть, на них влияла экспериментальная установка; но так или иначе, они были *определены*.¹² В лаборатории заранее не могли знать, какие из величин X или Y будет измерять каждый из экспериментаторов. Значит, заключают в лаборатории, в *неизвестно что* были специально заложены корреляции, гарантирующие нужный результат.

¹²То есть могут прилетать разные *неизвестно что*, но предполагается, что они берутся из какого-то распределения, которое никоим образом не зависит от того, X или Y будут измерять экспериментаторы.

Рассуждая дальше, они приходят к выводу — если *в каждом конкретном эксперименте* эти величины равны «+1», то, видимо, и их произведение — величина $(X_1 Y_2 Y_3)(Y_1 X_2 Y_3)(Y_1 Y_2 X_3) = X_1 X_2 X_3$ (поскольку $Y_i = \pm 1$, то $Y_i^2 = 1$) тоже непременно должна принимать значение +1. Таким образом лаборатория приходит к выводу о том, что если заглянуть в строчки, где экспериментаторы измеряли (X, X, X) , то там будет стоять тоже +1. Каково же их удивление, когда они во всех таких строках действительно видят совпадающие значения, но не «+1», а «-1»!

Список литературы

[Галицкий] Галицкий В.М., «Задачи по квантовой механике. Часть 1», 3-е изд. (2001)

[ФЛФ] Фейнман, Лейтон, Сэндс, Фейнмановские лекции по физике, тома 8-9 «Квантовая механика»