<u>Девять формулировок квантовой механики</u>

Д. Стайер и др. (США)

Перевод М.Х. Шульмана (shulman@dol.ru)

Nine formulations of quantum mechanics

Am. J. Phys. **70** (3), March 2002   http://ojps.aip.org/ajp/

Daniel F. Styer (Dan.Styer@oberlin.edu), Miranda S. Balkin, Kathryn M. Becker, Matthew R. Burns, Christopher E. Dudley, Scott T. Forth, Jeremy S. Gaumer, Mark A. Kramer, David C. Oertel, Leonard H. Park, Marie T. Rinkoski, Clait T. Smith, and Timothy D. Wotherspoon

Department of Physics, Oberlin College, Oberlin, Ohio 44074

Received 18 July 2001; accepted 29 November 2001

[DOI: 10.1119/1.1445404]

Приводится обзор девяти формулировок нерелятивистской квантовой механики. Это следующие подходы: использование волновой функции, матричная (операторная) форма, интегралы по траекториям, фазовое пространство, матрица плотности, вторичное квантование, вариационный, волна-пилот, формализм Гамильтона-Якоби. Упоминаются также многомировая и трансакционная интерпретации. Хотя разные формулировки сильно отличаются в математическом и концептуальном отношении, все они дают идентичные предсказания для всех экспериментальных результатов.

I. ПОЧЕМУ ВАЖНЫ РАЗЛИЧНЫЕ ФОРМУЛИРОВКИ?

Курсы классической механики для начинающих студентов уделяют некоторое время различным формулировкам классической механики – нютоновой, лагранжевой, гамильтоновой, принципу наименьшего действия и так далее (см. Приложение А). Но не аналогичные курсы квантовые механики! Действительно, даже в полных курсах выделяется формулировка, связанная с фолновой функцией в ущерб всем остальным вариантам. Легко видеть, почему дело обстоит именно так – изучение даже единственной формулировки квантовой механики является достаточно трудным делом – однако студенты все же должны удивляться, почему так важно изучать разные формулировки классической механики, но не квантовой. В данной статье приводится обзор девяти различных формулировок квантовой механики. Она представляет собой весенний проект 2001 г., предлагаемый в Оберлинском Колледже (Физика 412, ‘‘Прикладная квантовая механика’’).

Почему следует уделять внимание различным формулировкам механики, хотя каждая из них, в конце концов, дает одинаковые предсказания для результатов эксперимента? Для этого имеются, по меньшей мере, три основания. Во-первых, некоторые задачи оказываются трудными в рамках одной формулировки и легкими – в другой. Например, лагранжева формулировка классической механики допускает обобщенные координаты, которые часто удобнее использовать, чем ньютонову формулировку. Во-вторых, различные формулировки предполагают различные подходы[1]. Например, ньютонов формализм и принцип наименьшего действия дают очень различные картины того, ‘что происходит на самом деле’’ в классической механике. В третьих, разные формулировки с разной степенью легкости допускают обобщение на новые ситуации. Например, лагранжева формулировка легко обобщается с классической механики консервативных систем на релятивистскую механику консервативных систем, в то время как ньютонова формулировка легко обобщается с классической механики консервативных систем на классическую механику диссипативных систем. Как писал известный химик E. Bright Wilson[2]:

> ‘’Я часто обращался к нему [к J. H. Van Vleck] за помощью в вопросах квантовой механики и всегда встречал с его стороны терпение и готовность помочь, иногда с помощью ошеломляющей смеси волновой механики, операторного исчисления и языка матриц, которая часто сбивала с толку неофита, узко ориентированного на применение уравнение Шредингера. Я должен был научиться смотреть на вещи, пользуясь этими разными языками и, разумеется, это не зависело от того, что именно я делал.’’

Любая попытка перечисления формулировок должна проводить различие между ‘’формулировками’’ и ‘’интерпретациями’’ квантовой механики. Здесь мы стремимся только различать математические формулировки, но, разумеется, математика влияет на концептуальную интерпретацию, так что такое различение не вполне четко,[3] и мы понимаем, что другие могут очертить эти границы по-иному. Дополнительное затруднение возникает из-за того, что термин ‘Копенгагенская интерпретация’’ широко используется, но плохо определен: например, один из двух ее основателей – Вернер Гейзенберг – считал, что[4] ‘наблюдение положения представляет собой альтернативу наблюдению импульса как неизвестной и неопределяемой величины’’, в то время как другой – Нильс Бор[5] – ‘’особенно предупреждал против высказываний, часто употребляемых в физической литературе, таких, как ‘искажение явления за счет наблюдения’. ’’

II. КАТАЛОГ ФОРМУЛИРОВОК

A. Матричная формулировка (Гейзенберг)

Матричная формулировка квантовой механики, развитая Вернером Гейзенбергом в июне 1925 году, была первой из открытых. Формулировка на основе волновой функции, которая сегодня имеет наибольшее хождение, была установлена Эрвином Шредингером примерно шестью годами позже.

В матричной формулировке каждая механическая наблюдаемая (такая, как положение, импульс или энергия) математически представляется матрицей (известной также, как ‘’оператор’’). Для системы с N базисными состояниями (где в большинстве случаев $N = \infty$) это соответствует N x N квадратной эрмитовой матрице. Некоторое квантовое состояние $|\psi\rangle$ математически представляется $N \times 1$ матричным столбцом.

Связь с экспериментом. Предположим, что измеряемая величина $\mathcal{A}$ представлена оператором $\hat{A}$. Тогда для любой функции $f(x)$ математическое ожидание для измерения $f(\mathcal{A})$ в состоянии $|\psi\rangle$ есть внутреннее произведение

$$\langle \psi | f(\hat{A}) | \psi \rangle. \tag{1}$$

Поскольку вышеуказанное утверждение относится к $f(\mathcal{A})$ скорее, нежели к отдельно взятой $\mathcal{A}$, оно может быть использовано для нахождения неопределенностей [связанных с $f(\mathcal{A})=\mathcal{A}^2$] в той же мере, что и величин ожиданий. Действительно, можно даже сформировать собственные значения спектра, как то[6]: рассмотрим набор действительных значений $a_1, a_2, a_3, \ldots,$ и образуем неотрицательную функцию

$$g(x) \equiv (x-a_1)^2(x-a_2)^2(x-a_3)^2 \cdots . \tag{2}$$

Тогда набор $a_1, a_2, a_3, \ldots,$ образует собственные значения $\mathcal{A}$ тогда и только тогда, когда

$$\langle \psi | g(\hat{A}) | \psi \rangle = 0 \quad \text{для всех состояний } |\psi\rangle \tag{3}$$

Эта матричная формулировка придает очень большое значение операторам, откуда очень естественно вытекает проблема их собственных функций и значений. Данная формулировка менее естественно позволяет находить их для зависимых от времени величин или при рассмотрении требований к тождественным частицам. Такие задачи естественнее решаются с помощью формализма вторичного квантования, который обсуждается ниже.

Эволюция во времени. Оператор, соответствующий наблюдаемой механической энергии, называется гамильтонианом и обозначается через $\hat{H}$. Любой оператор $\hat{A}(t)$ эволюционирует во времени по закону

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{A}(t), \hat{H}] + \frac{\partial A}{\partial t}. \tag{4}$$

Сами состояния со временем не изменяются.

Приложения. Во многих приложенях (вероятно, в большинстве) формулировка на основе волновой функции оказывается более прозрачной, чем матричная формулировка. Исключение составляет простой гармонический осциллятор, где большая часть задач легче и понятнее решаются с помощью техники разложения операторов (с операторами рождения и уничтожения), чем через манипуляции с эрмитовыми полиномиальными выражениями. Сходная матричная техника неоценима при обсуждении углового момента.

Более общие методы факторизации (описанные в книге Green, см. ссылку ниже) могут позволить решать более общие задачи, но при этом часто цена усложнения по сравнению с формализмом волновой функции дает преимущество более экономичному подходу.

Рекомендуемая литература. Наиболее современные руководства по квантовой механике являются сплавом формулировки на основе волновой функции с матричным формализмом, но с акцентом на волновой функции. Из руководств с упором на матричную формулировку мы рекомендуем

1. H. S. Green, *Matrix Mechanics* (P. Noordhoff, Ltd., Groningen, The Netherlands, 1965).
2. T. F. Jordan, *Quantum Mechanics in Simple Matrix Form* (Wiley, New York, 1986).

История. Матричная формулировка квантовой механики была открыта первой. Научные публикации в этой области:

3. W. Heisenberg, "Über die quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen," ("Quantum-theoretical reinterpretation of kinematic and mechanical relations"), Z. Phys. **33**, 879–893 (1925).
4. M. Born and P. Jordan, "Zur Quantenmechanik," ("On quantum mechanics"), Z. Phys. **34**, 858–888 (1925).
5. M. Born, W. Heisenberg, and P. Jordan, "Zur Quantenmechanik II," Z. Phys. **35**, 557–615 (1926).

Переводы этих трех статей (как и других) на английский язык приведены в

6. B. L. van der Waerden, *Sources of Quantum Mechanics* (North-Holland, Amsterdam, 1967).

Принцип неопределенности появился два года спустя после формального развития теории

7. W. Heisenberg, "Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik," ("The physical content of quantum kinematics and mechanics"), Z. Phys. **43**, 172–198 (1927) [English translation in J. A. Wheeler and W. H. Zurek, editors, *Quantum Theory and Measurement* (Princeton University Press, Princeton, NJ, 1983), pp. 62–84].

B. Формулировка на основе волновой функции (Шредингер)

В сравнении с матричным формализмом формулировка квантовой механики на основе волновой функции переносит фокус с понятия "измеряемой величины" на понятие "состояния". Состояние системы с двумя частицами (без учета спина) математически представляется комплексной функцией в шестимерном конфигурационном пространстве, а именно

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t). \tag{5}$$

В качестве альтернативы и с той же степенью легитимности можно использовать математическое представление в шестимерном пространстве импульсов:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^6}}\int_{-\infty}^{+\infty}d^3x_1\times\int_{-\infty}^{+\infty}d^3x_2 e^{-i(\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{x}_1+\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{x}_2)/\hbar}\psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,t). \quad (6)$$

Шредингер предложил эту формулировку в надежде придать квантовой механике “конгениальную” и “интуитивную” форму[7]— он был сильно обескуражен, когда обнаружил, что его волновые функции оказались функциями в конфигурационном пространстве и фактически не существуют в обычном трехмерном пространстве[8]. Волновая функция должна рассматриваться как математический инструмент для вычисления результатов наблюдения, но не как физическая сущность, существующая в пространстве типа футбольного мяча, молекулы азота или хотя бы электрического поля (см. также Приложение В).

Эволюция во времени. Волновая функция в конфигурационном пространстве изменяется во времени по закону

$$\frac{\partial\psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,t)}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2\psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,t)-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2\psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,t)+V(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,t)\right], \quad (7)$$

где массы частиц равны m_1 и m_2, и где $V(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ – классическая функция потенциальной энергии. Равным образом волновая функция в пространстве импульсов изменяется во времени по закону

$$\frac{\partial\tilde{\psi}(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,t)}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{p_1^2}{2m_1}\tilde{\psi}(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,t)+\frac{p_2^2}{2m_2}\tilde{\psi}(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,t)+\int_{-\infty}^{\infty}d^3p_1'\int_{-\infty}^{\infty}d^3p_2'\tilde{V}(\mathbf{p}_1',\mathbf{p}_2')\times\tilde{\psi}(\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_1',\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_2',t)\right], \quad (8)$$

где Фурье-преобразование функции потенциальной энергии равно

$$\tilde{V}(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^6}\int_{-\infty}^{+\infty}d^3x_1\int_{-\infty}^{+\infty}d^3x_2 e^{i(\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{x}_1+\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{x}_2)/\hbar}V(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2). \quad (9)$$

После акта измерения соответствующей величины волновая функция “коллапсирует” к определенной собственной функции оператора, отвечающего этой величине.

Собственные значения энергии. Большинство состояний не имеют определенной энергии. Состояния с собственными значениями удовлетворяют[9] уравнению

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2+V(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,t)\right]\eta_n(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)=E_n\eta_n(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2). \quad (10)$$

Спектр энергии может быть как дискретным (“квантованным”), так и непрерывным, в зависимости от функции потенциальной энергии $V(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,t)$ и собственного значения энергии E_n.

Тождественные частицы. Если две частицы тождественны, то их общая волновая функция является симметричной или антисимметричной при перестановке индексов

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = \pm\, \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, t), \tag{11}$$

в зависимости от того, являются ли частицы бозонами или фермионами.

Рекомендуемая литература. Большинство руководств по квантовой механике делают упор на формализм волновой функции. В число наиболее замечательных учебников входят следующие:

8. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, translated by J. B. Sykes and J. S. Bell, 3rd ed. (Pergamon, New York, 1977).
9. A. Messiah, *Quantum Mechanics* (North-Holland, New York, 1961).
10. D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prentice–Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1995).
11. R. W. Robinett, *Quantum Mechanics: Classical Results, Modern Systems, and Visualized Examples* (Oxford University Press, New York, 1997).

История. Шредингер сначала привел уравнение (10) для собственных значений волновой функции в конфигурационном пространстве в работе

12. E. Schrödinger, “Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung),” (“Quantization as a problem of paper values (part I)”), Annalen der Physik **79**, 361–376 (1926).

Он привел зависящее от времени уравнение (7) (которое он назвал “истинная волновая функция - true wave equation”) пятью месяцами позже в работе

13. E. Schrödinger, “Quantisierung als Eigenwertproblem (Vierte Mitteilung),” (“Quantization as a problem of proper values (part IV)”), Annalen der Physik **81**, 109–139 (1926).

Английский перевод опубликован в

14. E. Schrödinger, *Collected Papers on Wave Mechanics* (Chelsea, New York, 1978).

C. Интегралы по путям (Фейнман)

Формализм интегралов по путям (называемый также формализмом сумм по историям) снова перемещает фокус — с “состояния” на “вероятность перехода”.

Предположим, например, что одиночная частица расположена в точке $\mathbf{x}_i$ в момент времени t_i, и мы хотим найти вероятность того, что она окажется в точке $\mathbf{x}_f$ в момент времени t_f. Эта вероятность вычисляется следующим образом:

• Составляется перечень всех классических путей из начального состояния в конечное.

• Вычисляется классическое действие $S = \int$(Лагранжиан)dt для каждого пути.
• Каждому пути сопоставляется ‘‘амплитуда перехода’’, пропорциональная $e^{iS/\hbar}$. (Коэффициент пропорциональности выбирается так, чтобы соблюсти правильную нормировку).
• Суммируются амплитуды по всем путям (поскольку имеется континуум путей, эта ‘‘сумма’’ фактически представляет собой ‘‘интеграл по путям’’).
• Получившаяся сумма и является амплитудой перехода, а квадрат ее магнитуды есть вероятность перехода.

Для различных задач – таких, как эволюция частицы от одного момента времени до другого, или для начального состояния без определенного положения и импульса – используются модификации этой процедуры.

Приложения. Формализм интегралов по путям редко оказывается простым способом решения задач в нерелятивистской квантовой механике. С другой стороны, он имеет бесчисленное число применений в других областях физики и химии, в частности, в квантовой и классической теории поля и в статистической механике. Например, он является мощным инструментом при моделировании квантовых систем методом Монте-Карло:

15. M. H. Kalos and P. A. Whitlock, *Monte Carlo Methods* (Wiley, New York, 1986), Chap. 8.

Кроме того, многие предпочитают этот формализм в силу того, что его математический аппарат ближе к сути эксперимента: основное внимание уделяется расчету вероятностей перехода, а не определению ненаблюдаемой волновой функции. По этим причинам следует изучить:

16. E. F. Taylor, S. Vokos, J. M. O'Meara, and N. S. Thornber, “Teaching Feynman's sum over paths quantum theory,” Comput. Phys. **12**, 190–199 (1998).

Тождественные частицы. Процедура интегрирования по путям очевидным образом обобщает поведение ансамбля неидентичных частиц или идентичных бозонов. (Термин ‘‘путь’’ теперь обозначает траектории некоторого числа частиц, рассматриваемых вместе.) Однако она *не* должна обобщать столь же просто поведение идентичных фермионов, поскольку иначе оказалось бы, что бозоны и фермионы ведут себя одинаково!

Фактически процедура для идентичных фермионов требует одного дополнительного шага. При перечислении классических путей из начальной ситуации в момент времени t_i в конечную ситуацию в момент времени t_f (как на рис. 1) следует заметить, что некоторые из путей частиц меняют эти частицы местами по сравнению с другими путями. (На рис. 1 частицы меняются местами на диаграммах III и IV, но не на диаграммах I и II.) Сопоставление амплитуды для пути фермиона осуществляется точно так же, как описано выше, только дополнительно амплитуда, связанная с перестановкой частиц, перед суммированием умножается на -1. (Это правило представляет собой принцип Паули: будем мысленно сближать две частицы к конечному моменту времени t_f. Когда разделение исчезнет, амплитуда, связанная с путем I, сблизится с амплитудой, связанной с путем III. Аналогичным образом, любой другой прямой путь сблизится с путем, где частицы заменяются местами. Благодаря множителю

–1 амплитуды при суммировании взаимно уничтожатся. Таким образом, два фермиона не могут двигаться так, чтобы оказаться в одной точке.)

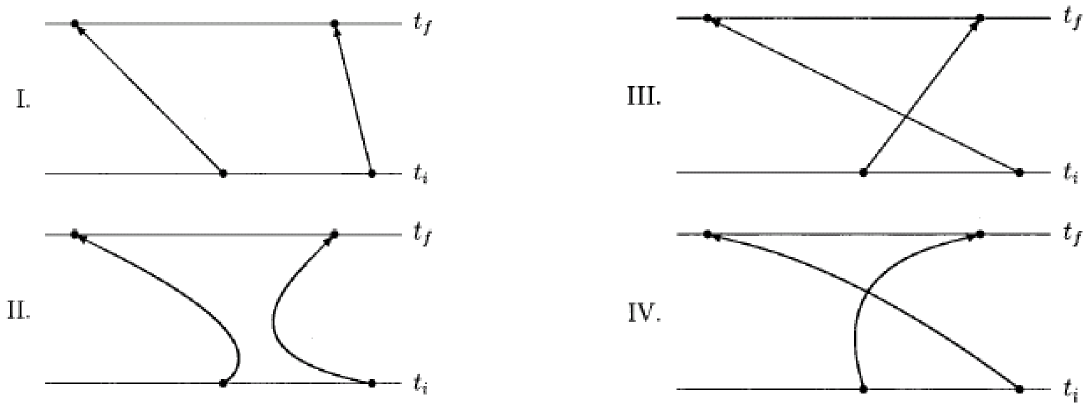

Рисунок 1. Если две частицы являются идентичными фермионами, то амплитуды путей, при которых частицы меняются местами, как на диаграммах III и IV, должны перед суммированием умножаться на -1.

Это уточнение знака не составляет проблемы для людей, но оказывается существенным препятствием – известным как “проблема знака фермиона” – для компьютеров. Эта важная и актуальная проблема при квантовом моделировании методом Монте-Карло обсуждается, например, в

17. N. Makri, “Feynman path integration in quantum dynamics,” Comput. Phys. Commun. **63**, 389–414 (1991).

18. S. Chandrasekharan and U.-J. Wiese, “Meron-cluster solution of fermion sign problems,” Phys. Rev. Lett. **83**, 3116–3119 (1999).

Рекомендуемая литература.

19. R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965).

20. D. F. Styer, “Additions and corrections to Feynman and Hibbs,” http://www.oberlin.edu/physics/dstyer/TeachQM/Supplements.html.

21. L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York, 1981).

История. Эта формулировка была развита в

22. R. P. Feynman, “Space–time approach to non-relativistic quantum mechanics,” Rev. Mod. Phys. **20**, 367–387 (1948).

D. Формулировка на основе концепции фазового пространства (Вигнер)

Для одиночной частицы в одномерном случае функция распределения Вигнера в фазовом пространстве равна

$$W(x,p,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x-\tfrac{1}{2}y,t)\times\psi(x+\tfrac{1}{2}y,t)e^{-ipy/\hbar}\,dy. \qquad (12)$$

Эта функция имеет определенное число полезных свойств:
• Она чисто действительная, но может быть как положительной, так и отрицательной.
• Интеграл по импульсам дает плотность вероятности по координате:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W(x,p,t)dp=|\psi(x,t)|^2. \qquad (13)$$

• Интеграл по координате дает плотность вероятности по импульсу:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W(x,p,t)dx=|\tilde{\psi}(p,t)|^2. \qquad (14)$$

• Если волновую функцию ψ умножить на постоянный фазовый множитель, функция Вигнера не изменяется.
• При заданной $W(x,p,t)$ можно найти волновую функцию с помощью двушаговой процедуры. Во-первых, вычисляем Фурье-преобразование

$$\tilde{W}(x,y,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} W(x,p,t)e^{ipy/\hbar}\,dp \ =\frac{1}{2\pi\hbar}\psi^*(x-\tfrac{1}{2}y,t)\,\psi(x+\tfrac{1}{2}y,t). \qquad (15)$$

Во-вторых, выберем произвольную точку x_0, где $\tilde{W}(x_0,0,t)$не исчезает, и находим

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\tilde{W}(x_0,0,t)}}\tilde{W}(\tfrac{1}{2}(x+x_0),x-x_0,t). \qquad (16)$$

Функция Вигнера не является плотностью вероятности в фазовом пространстве – согласно принципу неопределенности Гейзенберга, такой объект не может существовать. Однако она еще обладает некоторыми сходными свойствами, в связи с чем термин ‘‘функция распределения’’ является уместным.

Эволюция во времени.

$$\frac{\partial W(x,p,t)}{\partial t}=-\frac{p}{m}\frac{\partial W(x,p,t)}{\partial x}-\int_{-\infty}^{+\infty} K(x,p')W(x,p+p',t)\,dp', \qquad (17)$$

где ядро $K(x,p)$ равно

$$K(x,p)=\frac{1}{2\pi\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty}[V(x-\tfrac{1}{2}y)-V(x+\tfrac{1}{2}y)]\sin(py/\hbar)\,dy. \qquad (18)$$

Тождественные частицы. Если волновая функция является симметричной *или* антисимметричной относительно перестановки, то функция Вигнера является симметричной:

$$W(x_1,p_1,x_2,p_2)=W(x_2,p_2,x_1,p_1). \qquad (19)$$

Это, разумеется, не означает, что бозоны и фермионы ведут себя одинаково в этой формулировке: волновая функция, определенная уравнением (16), дает правильную симметрию относительно перестановки. Это означает, что тип симметрии относительно перестановки труднее определить в формализме фазового пространства, нежели в формулировке, основанной на волновой функции.

Приложения. Для системы с *N* состояниями (где *N* может быть равно ∞), волновая функция определяется *N* комплексными числами с некоторой неоднозначностью в выборе фазы, то есть $2N-1$ действительными числами. Для этой же системы функция Вигнера требует N^2 действительных чисел. Очевидно, функция Вигнера *не* является наиболее экономичным способом представления информации о квантовом состоянии. Функция Вигнера полезна, когда требуемую информацию легче извлечь из избыточной формы Вигнера, чем из экономичного представления волновой функции. (Например, плотность импульса получается из функции Вигнера с помощью простого интегрирования по координате. Плотность импульса получается из волновой функции в конфигурационном пространстве путем возведения в квадрат преобразования Фурье.)

В эту категорию попадает некоторое число задач, в частности, из квантовой оптики. См., например:

23. D. Leibfried, T. Pfau, and C. Monroe, "Shadows and mirrors: Reconstructing quantum states of atom motion," Phys. Today **51**, 22–28 (1998).

24. Y. S. Kim and W. W. Zachary, editors, *The Physics of Phase Space* (Springer-Verlag, Berlin, 1987).

Рекомендуемая литература.

25. Y. S. Kim and E. P. Wigner, "Canonical transformation in quantum mechanics," Am. J. Phys. **58**, 439–448 (1990).

26. M. Hillary, R. F. O'Connell, M. O. Scully, and E. P. Wigner, "Distribution functions in physics: Fundamentals," Phys. Rep. **106**, 121–167 (1984).

История. Формализм фазового пространства был впервые опубликован в

27. E. P. Wigner, "On the quantum correction for thermodynamic equilibrium," Phys. Rev. **40**, 749–759 (1932).

E. Формализм матрицы плотности

Матрица плотности, отвечающая чистому состоянию $|\psi\rangle$, является внешним произведением

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|. \qquad (20)$$

При данной матрице плотности $\hat{\rho}$ квантовое состояние $|\psi\rangle$ может быть найдено следующим образом. Сначала выбираем произвольное состояние $|\phi\rangle$.

(Ненормированная) кет-скобка $|\psi\rangle$ будет равна $\hat{\rho}|\phi\rangle$ (до тех пор, пока эта величина существует).

Матрица плотности имеет более естественное, но реже употребляемое название "оператор плотности". Как и для любого квантовомеханического оператора, данный оператор не зависит от базиса, как бы матричные элементы $\rho_{ij}=\langle i|\hat{\rho}|j\rangle$ ни зависели от выбранного базиса.

Формулировка, основанная на матрице плотности, является мощным средством статистического описания. Например, если точное состояние системы не известно, но известно, что она находится в одном из трех состояний – состояние $|\psi\rangle$ с вероятностью p_ψ, состояние $|\phi\rangle$ с вероятностью p_ϕ и состояние $|\chi\rangle$ с вероятностью p_χ – то говорят, что система находятся в "смешанном состоянии" (в отличие от "чистого состояния"). Смешанное состояние *не может* быть представлено выражением вида

$$c_\psi|\psi\rangle+c_\phi|\phi\rangle+c_\chi|\chi\rangle,$$

которое представляет чистое состояние, являющееся суперпозицией трех исходных состояний. Напротив, смешанное состояние представляется матрицей плотности

$$p_\psi|\psi\rangle\langle\psi|+p_\phi|\phi\rangle\langle\phi|+p_\chi|\chi\rangle\langle\chi|. \qquad (21)$$

Все последующие результаты этого раздела справедливы как для чистых, так и для смешанных состояний.

Связь с экспериментом. Матрица плотности всегда является эрмитовой. Если измеряемая величина $\mathcal{A}$ представлена оператором $\hat{A}$, то величина математического ожидания при измерении $f(\mathcal{A})$ есть след

$$\mathrm{tr}\{f(\hat{A})\hat{\rho}\}. \qquad (22)$$

Эволюция во времени. Матрица плотности эволюционирует со временем в соответствии с уравнением

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt}=+\frac{i}{\hbar}[\hat{\rho}(t),\hat{H}], \qquad (23)$$

где $\hat{H}$ - оператор Гамильтона. (Заметим, что эта формула отличается знаком от уравнения эволюции в матричной формулировке.)

Тождественные частицы. Матрица плотности, подобно функции распределения Вигнера в фазовом пространстве, остается неизменной при перестановке координат тождественных частиц, будь то бозоны или фермионы. Как и в случае распределения Вигнера, это не означает, что симметричные и антисимметричные волновые функции ведут себя одинаково; это просто означает, что различные типы поведения скрыты в матрице плотности и не просматриваются непосредственно.

Приложения. Для системы с *N* состояниями (где *N* может равняться ∞), волновая функция чистого состояния характеризуется *N* комплексными числами с точностью до общего фазового множителя, то есть $2N-1$ действительными числами. Для той же самой системы матрица плотности требует задания *N* действительных диагональных элементов плюс $N(N-1)/2$ комплексных элементов, расположенных выше диагонали, для полного набора из N^2 действительных чисел.

Таким образом, матрица плотности *не* является самым экономным способом задания информации о чистом квантовом состоянии. Тем не менее, непосредственная доступность этой информации через операцию взятия следа плюс возможность работать и со смешанными состояниями делает формализм матрицы плотности важным в некоторых областях физики. В частности, формула

$$\frac{\mathrm{tr}\{\hat{A}e^{-\hat{H}/kT}\}}{\mathrm{tr}\{e^{-\hat{H}/kT}\}} \tag{24}$$

является чем-то вроде мантры в квантовой статистической механике.

Рекомендуемая литература.

28. U. Fano, "Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques," Rev. Mod. Phys. **29**, 74–93 (1957).

29. K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications*, 2nd ed. (Plenum, New York, 1996).

История. Матрица плотности появилась в следующей работе:

30. J. von Neumann, "Wahrscheinlichkeitstheoretischer Aufbau der Quantenmechanik," ("Probability theoretical arrangement of quantum mechanics"), Nachr. Ges. Wiss. Goettingen, 245–272 (1927), reprinted in *Collected Works* (Pergamon, London, 1961), Vol. 1, pp. 208–235.

F. Формализм вторичного квантования

Этот формализм использует операторы, которые рождают и уничтожают частицы. Он был развит в связи с квантовой теорией поля, где подобные операции соответствуют физическим явлениям (например, электрон и позитрон взаимно уничтожаются, порождая фотон). Однако данная формулировка имеет гораздо более широкую сферу применения и, в частности, существенна в теории многих частиц, где системы, состоящие из большого (но постоянного) числа тождественных частиц, должны описываться простым и надежным образом.

Неудачное наименование этой формулировки связано с исторической случайностью – с точки зрения нерелятивистской квантовой механики лучше было бы использовать название "формулировка с числом занятых состояний".

Оператор $a_\psi^\dagger$ в формализме вторичного квантования "создает" частицу в квантовом состоянии $|\psi\rangle$. Одночастичное состояние возникает при действии оператора $a_\psi^\dagger$ на состояние, в котором нет частиц, так называемое "состояние вакуума” $|0\rangle$. Таким образом мы имеем различные выражения для одного и того же состояния:

$$|\psi\rangle, \quad \psi(x), \quad \tilde{\psi}(p), \quad a_{\psi}^{\dagger}|0\rangle. \qquad (25)$$

Итак, когда рассматриваются одночастичные системы, формулировка вторичного квантования эквивалентна формулировке на основе волновой функции, хотя и кажется несколько более громоздкой.

А как обстоит дело с многочастичными системами? Предположим, что $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ и $|\chi\rangle$ являются ортонормированными одночастичными состояниями. Тогда состояние с двумя тождественными частицами возникает путем создания двух частиц из вакуума: например, $a_{\phi}^{\dagger}a_{\psi}^{\dagger}|0\rangle$. Если это бозоны, то

$$a_{\phi}^{\dagger}a_{\psi}^{\dagger}|0\rangle = a_{\psi}^{\dagger}a_{\phi}^{\dagger}|0\rangle, \qquad (26)$$

в то время как для фермионов

$$a_{\phi}^{\dagger}a_{\psi}^{\dagger}|0\rangle = -a_{\psi}^{\dagger}a_{\phi}^{\dagger}|0\rangle. \qquad (27)$$

Это иллюстрирует общее правило, что операторы рождения бозонов коммутируют:

$$[a_{\phi}^{\dagger}, a_{\psi}^{\dagger}] = 0, \qquad (28)$$

тогда как операторы рождения фермионов антикоммутируют:

$$\{a_{\phi}^{\dagger}, a_{\psi}^{\dagger}\} = 0. \qquad (29)$$

(Антикоммутатор расшифровывается как $\{\hat{A},\hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$). Преимущества записи в терминах вторичного квантования для многочастичных систем здесь оказываются очевидными. Большинство физиков согласны с тем, что из двух эквивалентных форм

$$a_{\phi}^{\dagger}a_{\psi}^{\dagger}|0\rangle \quad \text{и} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(x_1)\phi(x_2) \pm \psi(x_2)\phi(x_1)], \qquad (30)$$

легче работать с левой. И почти все физики сойдутся в том, что легче работать с

$$a_{\chi}^{\dagger}a_{\phi}^{\dagger}a_{\psi}^{\dagger}|0\rangle \qquad (31)$$

чем с эквивалентным выражением

$$\begin{aligned}(1/\sqrt{3!})[&+\psi(x_1)\phi(x_2)\chi(x_3) \pm \psi(x_1)\phi(x_3)\chi(x_2) \\ &+\psi(x_3)\phi(x_1)\chi(x_2) \pm \psi(x_3)\phi(x_2)\chi(x_1) \\ &+\psi(x_2)\phi(x_3)\chi(x_1) \pm \psi(x_2)\phi(x_1)\chi(x_3)]. \qquad (32)\end{aligned}$$

Существеннейшим преимуществом формализма вторичного квантования является то, что он не сводится просто к компактности записи. Формулировка на основе волновой функции позволяет вам – действительно, она как бы *приглашает* вас – записать выражение типа

$$\psi(x_1)\phi(x_2),$$

симметричное или антисимметричное относительно перестановки, то есть выражение, которые не соответствуют никакому квантовому состоянию с тождественными частицами. Формулировка на основе волновой функции не содержит прямого предупреждения, что данное выражение есть приглашение в тупик. Напротив, в формализме вторичного квантования невозможно даже записать одно из вышеприведенных выражений – симметрия (или антисимметрия) автоматически (благодаря коммутации или антикоммутации) приводит к операторам рождения, так что в этом формализме можно записать только правильные выражения.

По этой причине формулировка вторичного квантования активно используется в теории многих частиц.

Рекомендуемая литература.

31. H. J. Lipkin, *Quantum Mechanics: New Approaches to Selected Topics* (North-Holland, Amsterdam, 1986), Chap. 5.
32. V. Ambegaokar, "Second quantization," in *Superconductivity*, edited by R. D. Parks (Marcel Dekker, New York, 1969), pp. 1359–1366.
33. W. E. Lawrence, "Algebraic identities relating first- and second-quantized operators," Am. J. Phys. **68**, 167–170 (2000).

Широкое обсуждение приложений имеется в

34. G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, 3rd ed. (Kluwer Academic, New York, 2000).

История. Метод вторичного квантования был развит Дираком для фотонов, затем дополнен Йорданом и Клейном для массивных бозонов и Йорданом и Вигнером для фермионов:

35. P. A. M. Dirac, "The quantum theory of the emission and absorption of radiation," Proc. R. Soc. London, Ser. A **114**, 243–265 (1927).
36. P. Jordan and O. Klein, "Zum Mehrkörperproblem der Quantentheorie," ("On the many-body problem in quantum theory"), Z. Phys. **45**, 751–765 (1927).
37. P. Jordan and E. Wigner, "Über das Paulische Äquivalenzverbot," ("On the Pauli valence line prohibition"), Z. Phys. **47**, 631–651 (1928).

Статьи Дирака и Йордана-Вигнера воспроизведены в

38. J. Schwinger, editor, *Selected Papers on Quantum Electrodynamics* (Dover, New York, 1958).

G. Вариационная формулировка

“Вариационная формулировка” не конкурирует с более широко известным “вариационным методом”, который устанавливает границу для основного энергетического состояния. Вместо этого вариационная формулировка дает полную картину, описывающую любое состояние - не обязательно именно основное – и полностью характеризует его эволюцию – не обязательно только его энергию. Это близко к принципу Гамильтона в классической механике.

Центральным объектом этой формулировки остается волновая функция $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$, но правило, определяющее эволюцию во времени, уже не является уравнением Шредингера. (Мы снова рассматриваем нерелятивистскую двухчастичную систему без учета спина.) Из всех возможных нормированных волновых функций $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ истинной волновой функцией будет та, которая минимизирует “интеграл действия” по времени и пространству, именно

$$\int dt \int d^3x_1 \int d^3x_2 \, \mathcal{L}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t), \qquad (33)$$

где “плотность лагранжиана” равна

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = \hbar \, \mathrm{Im}\left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\} + \frac{\hbar^2}{2m_1} \boldsymbol{\nabla}_1 \psi^* \cdot \boldsymbol{\nabla}_1 \psi + \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2 \psi^* \cdot \nabla_2 \psi + V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \psi^* \psi, \qquad (34)$$

а $\mathrm{Im}\{z\}$ обозначает мнимую часть *z*. Несложно показать, что этот критерий минимизации в действительности эквивалентен описывающему эволюцию во времени уравнению Шредингера (7).

Приложения. С практической стороны эта формулировка непосредственно связана с неоценимым вариационным методом, позволяющим определить основные энергетические основания. (Применяя этот принцип к классу не зависящих от времени пробных волновых функций, мжно подобрать нужную.) С теоретической стороны мы должны отметить, что вариационная полевая техника часто порождает формулировки физического закона, которые в явном виде обладают лоренцевой инвариантностью. Эта ее особенность, часто используемая в области электричества и магнетизма, обсуждается в

39. J. Schwinger, L. L. DeRaad, Jr., K. A. Milton, and W. Tsai, *Classical Electrodynamics* (Perseus Books, Reading, MA, 1998), especially Chaps. 8 and 9,

в общей теории относительности (“формулировка Гильберта”) – в

40. C. W. Misner, K. S. Thorne, and J. A. Wheeler, *Gravitation* (Freeman, San Francisco, 1973), Chap. 21,

а в квантовой теории поля – в

41. C. Itzykson and J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory* (McGraw-Hill, New York, 1980).

В силу указанных обстоятельств подобные вариационные формулировки теперь являются предпочтительным инструментом исследования при расширении физики в новые области, например, в теории суперсимметричных струне или мембран:

42. E. Witten, "Reflections on the fate of spacetime," Phys. Today **49**, 24–30 (April 1996).

43. E. Witten, "Duality, spacetime and quantum mechanics," Phys. Today **50**, 28–33 (May 1997).

Однако эти особенности не играют прямой роли для обсуждаемой здесь формулировки, которая

(i) является собственно нерелятивистской и
(ii) предусматривает интегрирование по времени и конфигурационному пространству, а не по физическому пространству и времени.

Рекомендуемая литература.

44. P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York, 1953), pp. 314–316 and 341–344.

[Внимание! В этой книге плотность лагранжиана определяется со знаком, противоположным знаку в (34), так что интеграл действия Морса и Фешбаха максимизируется, а не минимизируется правильной волновой функцией.]

История. Данная формулировка впервые была дана в:

45. P. Jordan and O. Klein, "Zum Mehrkörperproblem der Quantentheorie," ("On the many-body problem in quantum theory"), Z. Phys. **45**, 751–765 (1927).

(В этой же статье было введено вторичное квантование для массивных бозонов!)

H. Формализм волны-пилота (де Бройль, Бом)

Мы вводим формулировку с волной-пилотом на примере электрона и протона (без учета спина). В классической механике такая система представлена математически двумя точками, движущимися по траекториям в трехмерном физическом пространстве. В формулировке на основе волновой функции эта же система представлена математически комплексной волновой функцией, эволюционирующей в шестимерном конфигурационном пространстве. В формулировке с волной-пилотом эта система представлена математически *одновременно* как парой точек в физическом пространстве, так и волновой функцией в конфигурационном пространстве. Эта волновая функция именуется "волной-пилотом" и (как и функция классической потенциальной энергии) несет информацию о движении обеих точек.

Наиболее часто цитируемая версия формализма волны-пилотадана Бомом (см. также, однако, версию Дюрра, Голдстейна и Занхи, упомянутую ниже). В версии Бома волновая функция записывается с помощью (действительных) функций магнитуды и фазы:

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) e^{iS(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)/\hbar}. \tag{35}$$

Если определить зависящий от состояния ‘‘квантовый потенциал’’

$$Q(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\nabla_1^2 R}{R} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\nabla_2^2 R}{R}, \tag{36}$$

то волна-пилот эволюционирует во времени согласно

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{(\nabla_1 S)^2}{2m_1} - \frac{(\nabla_2 S)^2}{2m_2} - V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) - Q(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) \tag{37}$$

и

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{m_1}\nabla_1 \cdot (P\,\nabla_1 S) + \frac{1}{m_2}\nabla_2 \cdot (P\nabla_2 S) = 0, \tag{38}$$

где

$$P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = R^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t). \tag{39}$$

Первое уравнение подобно уравнению Гамильтона-Якоби; второе аналогично уравнению непрерывности, в котором *P* соответствует плотности вероятности. Две точечные частицы движутся с ускорениями

$$m_1\frac{d\mathbf{v}_1}{dt} = -\nabla_1 V - \nabla_1 Q \quad \text{и} \quad m_2\frac{d\mathbf{v}_2}{dt} = -\nabla_2 V - \nabla_2 Q. \tag{40}$$

Иными словами, сила определяется не только градиентом классического потенциала, но также и градиентом квантового потенциала. Начальные положения точечных частиц не определены: для ансамбля систем плотность вероятности начальных положений дается функцией $P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, 0)$. Таким образом, обе частицы, одна из которых соответствует протону, а другая – электрону, обладают определенным положением и определенным импульсом; однако начальная неопределенность для ансамбля и квантовый потенциал работают вместе, обеспечивая для любого набора измерений ансамбля одинаково приготовленных систем выполнение соотношения неопределенностей $\Delta x\,\Delta p \geqslant \hbar/2$.

Квантовый потенциал $Q(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ в конфигурационном пространстве при изменении волновой функции изменяется мгновенно, и этот механизм отвечает за нелокальные корреляции, столь характерные для квантовой механики. Человеком же эти мгновенные изменения скорее воспринимаются как сверхсветовой обмен информацией.

Приложения. Для формализма волны-пилота необходимо использовать и траектории, и волновые функции, так что повышенная вычислительная сложность этого формализма не является неожиданностью в большинстве задач. На примере двухщелевой интерференции, часто выступающей в качестве характерной физической задачи, связанной с формулировкой на основе волновой функции, показывается необходимость вычислительного *ухищрения* в формализме волны-пилота:

46. C. Philippidis, C. Dewdney, and B. J. Hiley, "Quantum interference and the quantum potential," Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis., B **52**, 15–28 (1979).

Напротив, формализм волны-пилота является эффективным в ширящихся обсуждениях общих вопросов квантовой механики. Например, эпохальная теорема Джона Белла, рассматривающая связь между локальностью и квантовой теорией, была навеяна формализмом волны-пилота[10]. Многие глубокие обозреватели находят формализм волны-пилота интуитивно законченным. Например:

47. J. S. Bell, "Six possible worlds of quantum mechanics," in *Possible Worlds in Humanities, Arts and Sciences: Proceedings of Nobel Symposium 65*, 11–15 August 1986, edited by S. Allén (Walter de Gruyter, Berlin, 1989), pp. 359–373. Reprinted in J. S. Bell, *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1987), Chap. 20, pp. 181–195.
48. H. P. Stapp, "Review of 'The Undivided Universe' by Bohm and Hiley," Am. J. Phys. **62**, 958–960 (1994).

Рекомендуемая литература.

49. D. Bohm, B. J. Hiley, and P. N. Kaloyerou, "An ontological basis for the quantum theory," Phys. Rep. **144**, 321–375 (1987).
50. D. Bohm and B. J. Hiley, *The Undivided Universe: An Ontological Interpretation of Quantum Theory* (Routledge, London, 1993).
51. D. Dürr, S. Goldstein, and N. Zanghí, "Quantum equilibrium and the origin of absolute uncertainty," J. Stat. Phys. **67**, 843–907 (1992).

История. Первоначальные основы этого подхода предложил Луи де Бройль, он обсуждался, например, на Сольвеевском конгрессе в 1927 году. Но существенное развитие этих идей началось с работы

52. D. Bohm, "A suggested interpretation of the quantum theory in terms of 'hidden' variables, I and II," Phys. Rev. **35**, 166–179 and 180–193 (1952).

I. Формализм Гамильтона-Якоби

Классический формализм Гамильтона-Якоби систематически определяет изменения переменной, так что результирующие уравнения движения легко интегрируются. В частности, если эти результаты представлены в виде нового набора переменных – так называемых переменных ‘‘действие-угол’’, можно найти период повторяющегося движения без фактического описания движения самого по себе.

Классическая теория Гамильтона-Якоби внесла важный вклад в развитие квантовой механики. (‘‘Теория преобразования’’ Дирака делает подобный акцент на стратегических изменениях переменной, а версия Вильсона-Зоммерфельда старой квантовой теории опирается на переменные угол-действие.) Но только в

1983 году Роберт Ликок и Майкл Пэджетт осуществили достаточно объемный анализ роли полного формализма Гамильтона-Якоби в квантовой механике.

Центральным объектом этого формализма является функция действия $S(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ такая, что

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = \exp[iS(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)/\hbar]. \qquad (41)$$

[Внимание: эта функция может быть комплексной...это не та же самая функция *S*, что в формализме волны-пилота, определенная уравнением (35).] Эта функция из принципа Гамильтона удовлетворяет квантовому уравнению Гамильтона-Якоби,

$$\frac{\partial S}{\partial t} = i\frac{\hbar}{2m_1}\nabla_1^2 S - \frac{1}{2m_1}\nabla_1 S \cdot \nabla_1 S + i\frac{\hbar}{2m_2}\nabla_2^2 S - \frac{1}{2m_2}\nabla_2 S \cdot \nabla_2 S - V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2). \qquad (42)$$

[Внимание: наименование ‘‘квантовое уравнение Гамильтона-якоби’’ как к этому уравнению, так и к уравнение (37) волны-пилота.]

Если результирующее изменение переменных представлено в виде действие-угол, то этот формализм позволяет найти собственные значения энергии без нахождения собственных функций.

Рекомендуемая литература.

53. R. A. Leacock and M. J. Padgett, “Hamilton–Jacobi/action-angle quantum mechanics,” Phys. Rev. D **28**, 2491–2502 (1983).
54. R. S. Bhalla, A. K. Kapoor, and P. K. Panigrahi, “Quantum Hamilton–Jacobi formalism and the bound state spectra,” Am. J. Phys. **65**, 1187–1194 (1997).
55. J.-H. Kim and H.-W. Lee, “Canonical transformations and the Hamilton–Jacobi theory in quantum mechanics,” Can. J. Phys. **77**, 411–425 (1999).

J. Подведение итогов и заключение

Мы обсудили девять различных формулировок квантовой механики. Узнали мы что-нибудь в ходе этого процесса? Наиболее глубокие уроки уже известны из классической механики и, на самом деле, из повседневной жизни: ‘‘Магического билета не существует.’’

Каждая из этих формулировок может сделать определенные приложения более легкими, а некоторые стороны теории – более прозрачными, но ни одна формулировка не создает ‘‘королевской дороги к квантовой механике’’. Квантовая механика кажется странной на наш классический взгляд, так что нам приходится прибегать к математике, как к надежному проводнику, когда интуиция нам отказывает.

Различные формулировки квантовой механики могут видоизменять эти странности, но они не могут устранить их.

Матричная формулировка, открытая первой, полезна при решении задач о гармоническом осцилляторе и угловом моменте, но другие задачи ей практически не по силам. Вечно популярная *формулировка на основе волновой функции* повсеместно используется при решении задач, но оставляет концептуальную неудовлетворенность в том отношении, что волновая функция есть скорее математический инструмент, чем физическая сущность. *Формализм интегралов по путям* является физически привлекательным и легко приводит к обобщениям за пределами нерелятивистской квантовой механики, но в большинстве стандартных приложений оказывается трудоемким. *Формализм фазового пространства* полезен при рассмотрении классического предела. *Формализм матрицы плотности* с легкостью может работать со смешанными состояниями, так что он имеет особое применение в статистической механике. Это же справедливо для *формализма вторичного квантования*, который, в частности, важен для систем с большим числом тождественных частиц. *Вариационная формулировка* редко является наилучшим инструментом для приложений, но имеет важное значение при расширении квантовой механики на новые области. *Формализм волны-пилота* имеет определенные концептуальные преимущества. И, наконец, *формализм Гамильтона-Якоби* обещает быть подходящим при решении неподдающихся задач о связанных состояниях. На самом деле нам повезло жить во Вселенной, где природа так щедра.

III. Дополнительные темы

В этом разделе рассматриваются две интерпретации квантовой механики, которые в некотором смысле аналогичны рассматривавшимся формулировкам, а затем кратко обсуждаются различные иные аспекты.

A. Многомировая интерпретация (Эверетт)

Многомировая интерпретация близка к граничному случаю между ‘‘формулировкой’’ и ‘‘трактовкой’’ – действительно, ее основатель Хьюго Эверетт назвал ее ‘‘формулировкой относительного состояния’’, между тем она стала широко известной под именем “многомировой интерпретации”, которое ввел Брайс деВитт.

В этой интерпретации нет таких вещей, как ‘‘коллапс волновой функции’’. В то же самое время основной вопрос ‘‘Что происходит в мире?’’ заменяется на вопрос ‘‘Что происходит на конкретной линии мировой истории?’’. Такая смена точки зрения лучше всего демонстрируется на примере: предположим, ученая дама не может решить, следует ли ей выйти замуж или разорвать отношения с женихом. Чтобы определиться, она посылает одиночный фотон с круговой поляризацией в поляризационную решетку. Если фотон проходит (приобретая линейную поляризацию) через поляроид, его зарегистрирует фотодетектор, вследствие чего прозвенит звонок, и дама выйдет замуж. В противном случае она продолжит жизнь в одиночестве. В версии квантовой механики Бора вопрос звучит так: ‘‘Что происходит?’’, а ответ состоит в том, что ученая дама имеет 50%-шанс выйти замуж и 50%-шанс разорвать отношения. В версии Эверетта это неверный вопрос: существует одна историческая линия, где фотон проходит, звонок звенит и свадьба происходит. Но существует и другая историческая линия, где фотон поглощается, царит тишина и отношения обрываются.

Каждая историческая линия существует наравне с другой. Чтобы определить, какая историческая линия принадлежит *нашей* жизни, мы просто должны выяснить семейный статус ученой дамы. Если она замужем, значит, мы живем на той линии, где фотон пролетел и звонок зазвенел. В противном случае, мы живем на другой исторической линии. Вопрос ‘‘Что происходит?’’ плохо задан – вместо этого следует спросить ‘‘Что происходит на конкретной исторической линии?’’ (так же, как плохо заданным является вопрос ‘‘Как далеко находится Чикаго’’, правильно было бы спросить ‘‘Как далеко находится Чикаго от Сан-Франциско?’’).

В формулировке относительного состояния волновая функция никогда не коллапсирует – она случайным образом продолжает ветвиться и ветвиться. Каждая ветвь существует, и ни одна из ветвей не лучше и не хуже других. (В многомировой версии чаще говорят о сосуществовании ветвящихся вселенных, чем о многих исторических линиях). Если суммировать, формулировка относительного состояния делает акцент *корреляциях*, избегая понятия *коллапса*.

Приложения. Формулировка относительного состояния в математическом отношении эквивалентна формулировке на основе волновой функции, так что не имеется практических оснований предпочесть одну другой. С другой стороны, концептуальная ориентация формулировки относительного состояния порождает точку зрения, покоящуюся на иных основаниях. Например, Дэвид Дойч в статье 1985 года, внесшей огромный вклад в области квантовых вычислений, выразил мнение, что ‘‘интуитивное объяснение этих свойств ставит чрезвычайные ограничения на все иные интерпретации квантовой механики, отличающиеся от интерпретации Эверетта’’.

56. D. Deutsch, ‘‘Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer,’’ Proc. R. Soc. London, Ser. A **400**, 97–117 (1985).

Рекомендуемая литература.

57. H. Everett III, ‘‘ ‘Relative state’ formulation of quantum mechanics,’’ Rev. Mod. Phys. **29**, 454–462 (1957).
58. B. S. DeWitt and N. Graham, in *The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, NJ, 1973).
59. Y. Ben-Dov, ‘‘Everett's theory and the ‘many-worlds’ interpretation,’’ Am. J. Phys. **58**, 829–832 (1990).
60. B. S. DeWitt, ‘‘Quantum mechanics and reality,’’ Phys. Today **23**, 30–35 (September 1970).
61. L. E. Ballentine, P. Pearle, E. H. Walker, M. Sachs, T. Koga, J. Gerver, and B. DeWitt, ‘‘Quantum mechanics debate,’’ Phys. Today **24**, 36–44 (April 1971).

B. Трансакционная интерпретация (Крамер)

Эта интерпретация (или формулировка) адекватна и существенна, но ее трудно описать вкратце, так что многие из тех, кто знакомились с ней быстро, рассматривали ее просто как занимательную. Если наше описание оставит у вас чувство неудовлетворенности, мы сразу советуем вам обратиться к рекомендуемой литературе.

В трансакциональной интерпретации источники и детекторы, скажем, электронов оба испускают запаздывающие волны (движущиеся вперед во времени) и опережающие волны (движущиеся назад во времени). С электроном, движущимся от источника к детектору, связана некоторая ‘‘пригласительная волна’’ (отвечающая ψ) от источника и некоторая ‘‘подтверждающая волна’’ (отвечающая ψ^*) от детектора, которые интерферируют и формируют ‘‘рукопожатие* сквозь пространство-время’’[11]. Деструктивная интерференция

* ‘‘Рукопожатие (handshake)’’ - стандартный термин интерфейсного протокола, обозначающий процедуру установления связи между отправителем и получателем сообщения (Примеч. пер.)

между этими двумя волнами обеспечивает, что электрон не может достичь детектора до того, как он вылетит из источника.

Приложения. Согласно Джону Крамеру[12], “трансакциональная интерпретация ... не дает предсказаний, отличающихся от конвенциональной квантовой механики [то есть от формулировки на основе волновой функции] ... Мы находим ее более полезной в качестве руководства для принятия решения, какие квантово-механические вычисления следует выполнить, чем непосредственно в качестве средства для выполнения этих вычислений ... Главная польза от трансакциональной интерпретации состоит [как бы] в том, что она предлагает концептуальную модель, которая предлагает пользователю путь к ясной визуализации сложных квантовых процессов и быстрому анализу кажущихся ‘парадоксальными’ ситуаций ... Она представляется важной с точки зрения развития интуитивных представлений о квантовых явлениях, которые и по сей день остаются загадочными”.

Тождественные частицы. Дискуссии о трансакциональной интерпретации обычно выходят за рамки квантовой механики одиночной частицы. Уже применительно к двухчастичной системе для нас остается неясным, имеют ли место два “рукопожатия сквозь физическое пространство-время” или одно “рукопожатие сквозь конфигурационное пространство-время”. Следовательно, мы не можем описать, как трансакциональная формулировка проводит различие между бозонами и фермионами.

Рекомендуемая литература.

62. J. G. Cramer, “The transactional interpretation of quantum mechanics,” Rev. Mod. Phys. **58**, 647–687 (1986).

63. J. G. Cramer, “An overview of the transactional interpretation of quantum mechanics,” Int. J. Theor. Phys. **27**, 227–236 (1988).

История. Эта интерпретация впервые была изложена в

64. J. G. Cramer, “Generalized absorber theory and the Einstein–Podolsky–Rosen paradox,” Phys. Rev. D **22**, 362–376 (1980).

C. Разное

Большинство физиков, интересующихся различными формулировками, заинтересуются также теорией плотности функционала, теорией декогеренции, интерпретацией в терминах совместных историй и возможностью непрерывной спонтанной локализации, поэтому вкратце коснемся здесь и этих тем.

Теория функционала плотности (density functional theory, Hohenberg и Kohn) является мощным квантово-теоретическим инструментом, но это не формулировка... она работает только с основным состоянием (хотя, возможно, только это состояние и представляет интерес для многих задач химии и физики конденсированного вещества).

65. R. G. Parr and W. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules* (Oxford University Press, New York, 1989).

С момента рождения квантовой механики все осознавали важность правильного перехода к классическому пределу. Знаменитая теорема Эренфеста и аналогичные результаты гарантируют, что некоторые квантовые состояния ведут себя почти классически. Но этого не вполне достаточно: столь же верно, что поведение других квантовых состояний далеко от классического. Почему же мы никогда не встречаем такие состояния в повседневной жизни? Этот факт пытаются объяснить с помощью феномена *декогеренции*. Лучше всего об этом прочитать в двух следующих обзорах

66. W. H. Zurek, "Decoherence and the transition from quantum to classical," Phys. Today **44**, 36–44 (October 1991).
67. S. Haroche, "Entanglement, decoherence and the quantum/classical boundary," Phys. Today **51**, 36–42 (July 1998).

Интерпретация на основе совместных историй (Robert Griffiths) также не является формулировкой, но оказывается интересной точкой зрения. Смотри

68. R. B. Griffiths and R. Omnès, "Consistent histories and quantum measurements," Phys. Today **52**, 26–31 (August 1999).

Идея *непрерывной спонтанной локализации* опирается на понятия коллапса волновой функции и классического предела, модифицируя уравнение Шредингера таким образом, что расширенные квантовые состояния естественным образом коллапсируют как бы под действием собственного веса. Существуют некоторые такие схемы, наиболее обещающая из которых приведена в

69. G. C. Ghirardi, A. Rimini, and T. Weber, "Unified dynamics for microscopic and macroscopic systems," Phys. Rev. D **34**, 470–491 (1986).

Наконец, можно ознакомиться также с широкими по охвату тем обзорами

70. S. Goldstein, "Quantum theory without observers," Phys. Today **51**, 42–46 (March 1998) and *ibid.* 38–42 (April 1998).
71. F. Laloë, "Do we really understand quantum mechanics? Strange correlations, paradoxes, and theorems," Am. J. Phys. **69**, 655–701 (2001).

ПРИЛОЖЕНИЕ А: ФОРМУЛИРОВКИ КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Известные нам формулировки классической механики составляют следующий перечень:

- ньютонова формулировка
- лагранжева формулировка
- гамильтонова формулировка
- принцип Гамильтона (который Фейнман и Ландау назвали "принципом наименьшего действия")
- принцип наименьшего действия Мопертюи (связанный также с именами Эйлера, Лагранжа и Якоби)
- принцип наименьшего ограничения (Гаусс)

- принцип наименьшей кривизны (Герц)
- формулировка Гиббса - Аппеля
- скобки Пуассона
- скобки Лагранжа
- формулировка Лиувилля
- формулировка Гамильтона - Якоби

Эти формулировки в той или иной степени обсуждаются в любом курсе классической механики. Подробные определения даются в монографии

72. E. T. Whittaker, *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies*, 4th ed. (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1937).

ПРИЛОЖЕНИЕ В: КАЛИБРОВОЧНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Волновая функция занимает настолько центральное место в большинстве дискуссий по проблемам квантовой механики, что легко попасть в ловушку, думая о ней скорее как о физическом объекте, нежели как о математическом инструменте. Каждому, попавшему в эту ловушку, предложим следующий аргумент. Рассмотрим одиночную частицу с зарядом *q*, движущуюся в электромагнитном поле, которое описывается скалярным потенциалом $\phi(\mathbf{x},t)$ и вектор-потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{x},t)$. Тогда уравнение Шредингера в конфигурационном пространстве имеет вид

$$\frac{\partial\psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x},t)\right)^2 + q\,\phi(\mathbf{x},t)\right]\psi(\mathbf{x},t). \qquad \text{(B1)}$$

С другой стороны, мы можем точно описать эту систему, используя калибровочное преобразование потенциалов:

$$\mathbf{A}'(\mathbf{x},t) = \mathbf{A}(\mathbf{x},t) + \boldsymbol{\nabla}\chi(\mathbf{x},t), \qquad \text{(B2)}$$

$$\phi'(\mathbf{x},t) = \phi(\mathbf{x},t) - \frac{1}{c}\frac{\partial\chi(\mathbf{x},t)}{\partial t}. \qquad \text{(B3)}$$

Легко показать, что волновая функция, полученная с помощью этих новых потенциалов, будет связана с исходной волновой функцией соотношением

$$\psi'(\mathbf{x},t) = e^{iq\chi(\mathbf{x},t)/\hbar c}\psi(\mathbf{x},t). \qquad \text{(B4)}$$

Это калибровочное преобразование никак не изменяет систему, и экспериментальные результаты не будут зависеть от выбранной калибровки. Однако волновая функция значительно изменилась. (Действительно, плотность вероятности не может измениться и не изменяется при калибровочном преобразовании, и общий фазовый множитель – который отвечает за все интерференционные эффекты – может выбираться произвольно.)

БЛАГОДАРНОСТИ

Профессор Martin Jones (Oberlin College Philosophy Department) представил наш материал в гостевой лекции, что повлияло на структуру раздела III (A). Два рецензента сделали существенные замечания и исправили несколько ошибочных знаков в формулах рукописи.

Примечания

[1]Для наших классических органов чувств квантовомеханические явления – интерференция, запутывание, нелокальность, корреляции и т.д. – кажутся загадочными. Различные формулировки преподносят эту загадочность по разному, но ни одна из них не устраняет ее, потому что эта загадочность обусловлена фактами, а не формализмом.

[2]E. B. Wilson, "Some personal scientific reminiscences," *International Journal of Quantum Chemistry: Quantum Chemistry Symposium*, Proceedings of the International Symposium held at Flagler Beach, Florida, 10−20 March 1980, Vol. 14, pp. 17−29, 1980 (see p. 21). Wilson co-authored one of the very earliest quantum mechanics textbooks, namely L. Pauling and E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1935).

[3]C. A. Fuchs and A. Peres, "Quantum theory needs no 'interpretation'," Phys. Today **53**, 70−71 (March 2000); D. Styer, "Quantum theory—interpretation, formulation, inspiration [letter]," *ibid.* **53**, 11 (September 2000); C. A. Fuchs and A. Peres, "Reply," *ibid.* **53**, 14,90 (September 2000).

[4]W. Heisenberg, *The Physical Principles of the Quantum Theory*, translated by Carl Eckart and F. C. Hoyt (University of Chicago Press, Chicago, 1930), p. 20.

[5]N. Bohr, "Discussion with Einstein on epistemological problems in atomic physics," in *Albert Einstein, Philosopher−Scientist*, edited by P. A. Schilpp (Library of Living Philosophers, Evanston, IL, 1949), p. 237. Reprinted in N. Bohr, *Atomic Physics and Human Knowledge* (Wiley, New York, 1958), pp. 63−64.

[6]N. David Mermin, unpublished lectures given at Cornell University.

[7] Шредингер использовал оба термина в своей первой статье 1926 года (ссылка 12 в тексте). В переводе (ссылка 14 в тексте) слово "конгениальный (congenial)" появляется на с. 10, а слово "интуитивный (intuitive)" – на с. 9. Последнее соответствует немецкому *anschaulich*, которое переводилось в разных случаях как "intuitive," "pictorial" или "visualizable."

[8]См., например, A. Pais, *Inward Bound* (Clarendon, Oxford, UK, 1986), p. 256.

[9]Мы обозначаем произвольно волновые функции как $\psi(\mathbf{x},t)$ или $\phi(\mathbf{x})$, а собственные функции энергии – как $\eta(\mathbf{x})$, потому что греческая буква η подразумевает ‘‘э’’ (как в ‘‘собственной функции энергии’’ и как в ‘‘эта’’). Это замечательное соглашение было установлено D. T. Gillespie, in *A Quantum Mechanics Primer* (International Textbook Company, Scranton, PA, 1970).

[10]J. Bernstein, *Quantum Profiles* (Princeton University Press, Princeton, NJ, 1991), pp. 72–77.

[11]Cramer, Ref. 63 in the text, p. 661.

[12]Cramer, Ref. 63 in the text, p. 663.