Принцип определённости

Д. А. Арбатский*

Июнь 2005 г.

Аннотация

Вводится понятие квантового угла. Квантовый угол оказывается метрикой на множестве физических состояний квантовой системы. Изучается его кинематика и динамика. Формулируется и доказывается принцип *определённости* для квантовых систем. Принцип определённости оказывается тесно связанным с принципом неопределённости Гейзенберга (представляет, в определённом смысле, обратную точку зрения). При этом принцип определённости позволяет дать строгие формулировки для более широкого класса задач (удаётся строго истолковать и обосновать аналогичные неравенства для пар величин типа время - энергия, угол - момент импульса и т. п.).

Квантовый угол и принцип определённости

Понятие квантового угла. Как известно, множество состояний любой квантовой системы образует комплексное гильбертово пространство. Мы будем обозначать его $\mathcal{H}$.

Элементы пространства $\mathcal{H}$ будем обозначать как $a, b \ldots \in \mathcal{H}$.

Скалярное произведение в $\mathcal{H}$ будем записывать как $\langle a|b\rangle$. Оно линейно по второму аргументу и антилинейно по первому.

Норму вектора a будем обозначать как $\|a\| = \langle a|a\rangle^{1/2}$.

Рассмотрим два ненулевых вектора $a, b \in \mathcal{H}$. Определим между ними *квантовый угол* формулой:

$$\angle(a,b) = \arccos \frac{\big|\langle a|b\rangle\big|}{\|a\|\,\|b\|} \ .$$

В соответствии с неравенством Коши-Буняковского-Шварца, под знаком $\arccos$ стоит величина, не превосходящая единицы. Следовательно, квантовый угол является вещественным числом:

$$\angle(a,b) \in \mathbb{R} \ , \qquad 0 \leqslant \angle(a,b) \leqslant \frac{\pi}{2} \ .$$

Для упрощения формул далее мы будем всегда работать с нормированными векторами: $\|a\| = 1$, $\|b\| = 1$. В этом случае формула для угла записывается просто как:

$$\angle(a,b) = \arccos\big|\langle a|b\rangle\big| \ .$$

Геометрия квантового угла. Рассмотрим два крайних случая: $\angle(a,b) = 0$ и $\angle(a,b) = \pi/2$.

В соответствии с равенством Парсеваля, первый случай имеет место, когда векторы отличаются лишь фазовым множителем:

$$\angle(a,b) = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad a \parallel b \ .$$

С физической точки зрения, можно сказать, что соответствующие квантовые состояния *одинаковы*.

Второй случай имеет место, когда векторы ортогональны:

$$\angle(a,b) = \frac{\pi}{2} \qquad \Longleftrightarrow \qquad a \perp b \ .$$

*http://daarb.narod.ru/ , http://wave.front.ru/

В этом случае можно сказать, что соответствующие квантовые состояния *полностью различны.*

Имея в виду эту физическую терминологию, употребляемую в рассмотренных крайних случаях, введём также следующее определение. Будем говорить, что состояния, описываемые векторами a и b, *отличаются несущественно*, если $\angle(a,b) < 1$; также будем говорить, что состояния *отличаются существенно*, если $\angle(a,b) \geqslant 1$.

Т е о р е м а. *Для любых трёх векторов $a, b, c \in \mathcal{H}$ имеет место неравенство („неравенство треугольника“):*

$$\angle(a,c) \leqslant \angle(a,b) + \angle(b,c) \ .$$

Чтобы доказать эту теорему, заметим сначала, что, поскольку неравенство доказывается для трёх векторов, можно ограничиться случаем, когда гильбертово пространство $\mathcal{H}$ трёхмерно: $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$.

Домножая векторы a, b и c на подходящие множители и выбирая ортонормированный базис в $\mathcal{H}$ надлежащим образом, можно добиться того, чтобы компоненты этих векторов приняли вид:

$$a = (\ 1 \quad 0 \quad 0\ )\ , \qquad b = (\ b_1 \quad z \quad b_3\ )\ , \qquad c = (\ c_1 \quad c_2 \quad 0\ )\ ,$$

где $c_1, c_2, b_1, b_3 \in [0;1]$ — вещественные неотрицательные числа, а $z \in \mathbb{C}$ комплексно.

Введём также вспомогательный вектор b':

$$b' = (\ b_1 \quad |z| \quad b_3\ )\ .$$

Имеем:

$$\angle(b',c) = \arccos\big(b_1c_1 + |z|\,c_2\big) \leqslant \arccos|\,b_1c_1 + zc_2\,| = \angle(b,c)\ .$$

Поскольку три вектора a, b' и c имеют вещественные координаты и единичные длины, для них неравенство треугольника — это хорошо известное неравенство треугольника на сфере в вещественном трёхмерном евклидовом пространстве:

$$\angle(a,c) \leqslant \angle(a,b') + \angle(b',c)\ .$$

Комбинируя приведённые неравенства, получаем:

$$\angle(a,c) \leqslant \angle(a,b') + \angle(b',c) = \angle(a,b) + \angle(b',c) \leqslant \angle(a,b) + \angle(b,c) \qquad \blacksquare$$

Резюмируя сказанное выше, можно сказать, что квантовый угол $\angle$, рассматриваемый как функция на множестве пар физических квантовых состояний (рассматриваемых с точностью до фазового множителя), является *метрикой.*

Т е о р е м а. *Метрическое пространство физических квантовых состояний с метрикой $\angle$ полно.*

Доказательство этой теоремы не сложно, но требует значительной технической работы. Поэтому мы его здесь опустим.

Кинематика квантового угла. Пусть теперь вектор r зависит от вещественного параметра t: $t \in \mathbb{R}$, $r(t) \in \mathcal{H}$, $\|\,r(t)\,\| = 1$.

Определим *квантовую скорость* $v(t)$ равенством:

$$v(t) = \dot{r}(t) = \lim_{\delta t \to 0} \frac{r(t+\delta t) - r(t)}{\delta t}\ .$$

Определим также *квантовую угловую скорость* $\omega(t)$ равенством:

$$\omega(t) = \lim_{\delta t \to 0} \frac{\angle\big(\,r(t+\delta t)\,,\,r(t)\,\big)}{|\,\delta t\,|}\ .$$

Чтобы выразить $\omega(t)$ через $v(t)$, разложим $v(t)$ на две ортогональные составляющие:

$$v_\parallel(t) = r(t)\,\langle r(t)|v(t)\rangle\ , \qquad v_\perp(t) = v(t) - v_\parallel(t)\ .$$

Т е о р е м а. *Квантовая угловая скорость равна норме ортогональной составляющей квантовой скорости:*

$$\omega(t) = \| \, v_\perp(t) \, \| \ .$$

Чтобы доказать эту теорему, используем равенство Парсеваля для замены $\arccos$ на $\arcsin$:

$$\angle\big(\, r(t+\delta t)\,,\, r(t)\,\big) \ = \ \arccos \big|\, \langle\, r(t+\delta t) \,|\, r(t)\,\rangle\,\big| \ =$$

$$= \ \arcsin \big\|\, r(t+\delta t) - r(t)\,\langle\, r(t)\,|\, r(t+\delta t)\,\rangle\,\big\| \ =$$

$$= \ \arcsin \big\|\, r(t+\delta t) \ - \ r(t) \ - \ r(t)\,\langle\, r(t)\,|\, r(t+\delta t) - r(t)\,\rangle\,\big\| \ =$$

$$= \ \arcsin \big\|\, v(t)\,\delta t \ + \ o(\delta t) \ - \ r(t)\,\langle\, r(t)\,|\, v(t)\,\delta t + o(\delta t)\,\rangle\,\big\| \ =$$

$$= \ \arcsin \Big\|\, \big(v(t) \ - \ r(t)\,\langle\, r(t)\,|\, v(t)\,\rangle\big)\,\delta t \ + \ o(\delta t)\,\Big\| \ =$$

$$= \ \arcsin \big\|\, v_\perp(t)\,\delta t \ + \ o(\delta t)\,\big\| \ = \ \arcsin\,\big(\, \|v_\perp(t)\|\,|\delta t| \ + \ o(\delta t)\,\big) \ =$$

$$= \ \|v_\perp(t)\|\,|\delta t| \ + \ o(\delta t) \qquad \blacksquare$$

Т е о р е м а. *Для квантового угла справедлива оценка:*

$$\angle\big(\, r(t_2)\,,\, r(t_1)\,\big) \ \leqslant \ \left|\, \int_{t_1}^{t_2} \omega(t)\,dt \,\right| \quad . \tag{1}$$

Для доказательства воспользуемся неравенством треугольника:

$$\Big|\, \angle\big(\, r(t+\delta t)\,,\, r(t_1)\,\big) - \angle\big(\, r(t)\,,\, r(t_1)\,\big)\,\Big| \ \leqslant \ \angle\big(\, r(t+\delta t)\,,\, r(t)\,\big) \ .$$

Поделив на $|\delta t|$ и переходя к пределу $\delta t \to 0$, получаем:

$$\left|\, \frac{d}{dt}\,\angle\big(\, r(t)\,,\, r(t_1)\,\big)\,\right| \ \leqslant \ \omega(t) \ .$$

Интегрируя от t_1 до t_2 , получаем доказываемое неравенство. $\blacksquare$

В действительности, оценка (1) является наилучшей. Именно, справедлива следующая

Т е о р е м а. *Квантовый угол между двумя векторами* r_1 *и* r_2 *может быть задан формулой:*

$$\angle\,(\, r_2\,,\, r_1\,) \ = \ \min \ \left|\, \int_{t_1}^{t_2} \omega(t)\,dt \,\right| \quad ,$$

где минимум берётся среди всех кривых $r(t)$ *с концами в* r_1 *и* r_2 *:* $r(t_1) = r_1$ *,* $r(t_2) = r_2$ *.*

Для доказательства теоремы подкрутим фазу r_2 , $r_2 \to r_2' = e^{i\alpha} r_2$, так, чтобы $\langle r_2' | r_1 \rangle$ было вещественно и $\langle r_2' | r_1 \rangle \in [0,1]$.

Далее, рассмотрим линейную оболочку r_2' и r_1 , $\mathcal{L}(r_2', r_1)$. В ней можно выбрать ортонормированный базис так, чтобы

$$r_1 = (\ 1 \quad 0\ )\ , \qquad r_2' = (\ a \quad b\ )\ ,$$

где $a, b \in [0,1]$ — вещественные неотрицательные числа.

Рассматривая далее r_2' и r_1 как вещественные векторы на евклидовой плоскости, замечаем, что между ними можно провести дугу, на которой оценочный интеграл как раз равняется квантовому углу. $\blacksquare$

Динамика квантового угла. Пусть теперь мы имеем сильно непрерывную однопараметрическую унитарную группу $U(\delta s) = e^{-\,i\,\delta s\,A/\hbar}$, где $A = A^*$ — самосопряжённый оператор в пространстве состояний $\mathcal{H}$ (он называется инфинитезимальным генератором $U(\delta s)$); $\delta s \in \mathbb{R}$ — параметр группы; $\hbar \in \mathbb{R}$ — постоянная Планка.

И пусть теперь зависимость вектора состояния от параметра δs задаётся формулой:

$$r(\delta s) \ = \ |\, \delta s\,\rangle \ = \ U(\delta s)\,\rangle \ = \ e^{-\,i\,\delta s\,A/\hbar}\,\rangle \ .$$

Здесь $|\,\delta s\,\rangle \in \mathcal{H}$ — другое обозначение вектора состояния при параметре, равном δs ; $\rangle \in \mathcal{H}$ — фиксированный кет-вектор состояния.

Будем полагать, что функция $r(\delta s)$ дифференцируема. Тогда квантовая скорость выражается формулой:

$$v(\delta s) \,=\, \tfrac{1}{i\hbar}\, A\, e^{-\,i\,\delta s\, A/\hbar}\,\rangle \,=\, \tfrac{1}{i\hbar}\, A\,|\,\delta s\,\rangle \ .$$

Среднее значение оператора A не зависит от параметра:

$$\overline{A} \,=\, \langle\, \delta s\,|\,A\,|\,\delta s\,\rangle \,=\, \langle\, e^{+\,i\,\delta s\,A/\hbar}\, A\, e^{-\,i\,\delta s\,A/\hbar}\,\rangle \,=\, \langle\, A\, e^{+\,i\,\delta s\,A/\hbar}\, e^{-\,i\,\delta s\,A/\hbar}\,\rangle \,=\, \langle\, A\,\rangle \ .$$

Поэтому составляющие квантовой скорости могут быть просто записаны как:

$$v_{\|}(\delta s) \,=\, |\,\delta s\,\rangle\,\langle\,\delta s\,|\,\tfrac{1}{i\hbar}\,A\,|\,\delta s\,\rangle \,=\, \tfrac{1}{i\hbar}\,\overline{A}\,|\,\delta s\,\rangle$$

$$v_{\perp}(\delta s) \,=\, \tfrac{1}{i\hbar}\,\left(A - \overline{A}\right)\,|\,\delta s\,\rangle \ .$$

Квантовая угловая скорость оказывается также независящей от времени:

$$\omega(\delta s) \,=\, \|\, v_{\perp}(\delta s)\,\| \,=\, \tfrac{1}{\hbar}\,\langle\,\delta s\,|\,\left(A - \overline{A}\right)^2\,|\,\delta s\,\rangle^{1/2} \,=\, \tfrac{1}{\hbar}\,\langle\, e^{+\,i\,\delta s\,A/\hbar}\,\left(A - \overline{A}\right)^2\, e^{-\,i\,\delta s\,A/\hbar}\,\rangle^{1/2} \,=$$

$$=\, \tfrac{1}{\hbar}\,\langle\,\left(A - \overline{A}\right)^2\, e^{+\,i\,\delta s\,A/\hbar}\, e^{-\,i\,\delta s\,A/\hbar}\,\rangle^{1/2} \,=\, \tfrac{1}{\hbar}\,\langle\,\left(A - \overline{A}\right)^2\,\rangle^{1/2} \,=\, \tfrac{1}{\hbar}\,\Delta_{\rangle} A \ .$$

Здесь $\Delta_{\rangle} A$ является сокращённым обозначением для среднеквадратичного отклонения A в состоянии $\rangle$.

Рассмотрим теперь, как ведёт себя в данном случае квантовый угол $\angle(\,|\,\delta s\,\rangle\,,\,\rangle\,)$. Применяя для него оценку (1), имеем:

$$\angle(\,|\,\delta s\,\rangle\,,\,\rangle\,) \,\leqslant\, \left|\, \int_0^{\delta s} \omega(\sigma)\, d\sigma \,\right| \,=\, \tfrac{1}{\hbar}\,|\delta s|\,\Delta_{\rangle} A \ .$$

Из этого неравенства вытекает

Т е о р е м а. *Чтобы под действием сильно непрерывной однопараметрической унитарной группы* $U(\delta s) = e^{-\,i\,\delta s\,A/\hbar}$ *начальный вектор состояния* $\rangle$ *изменился существенно, необходимо, чтобы выполнялось неравенство:*

$$\boxed{\;|\delta s|\,\Delta_{\rangle} A \geqslant \hbar\;} \qquad (2)$$

На примере шрёдингеровской частицы мы увидим, что эта теорема оказывается тесно связанной с принципом неопределённости Гейзенберга, но имеет иной смысл. Имея в виду эту связь, можно назвать эту теорему *принципом определённости.*

Неравенство, выражающее принцип определённости, можно записать ещё следующим образом:

$$\boxed{\;\Delta_{\rangle}(\delta s A) \geqslant \hbar\;} \qquad (3)$$

В таком виде оно естественно переносится на случай, когда δs и A являются матрицами.

Примеры

Одномерная шрёдингеровская частица. Рассмотрим одномерную шрёдингеровскую частицу, координата которой задаётся переменной x . Её вектор состояния может быть записан с помощью волновой функции $\psi(x)$. В её пространстве состояний действует группа сдвигов по формуле:

$$U(\delta x)\,\psi(x) = \psi(x - \delta x) \ .$$

Эта группа может быть записана в виде:

$$U(\delta x) = e^{-\,i\,\delta x\,P/\hbar} \ , \qquad P = -\,i\hbar\frac{d}{dx} \ .$$

При этом P является оператором импульса.

Применяя принцип определённости в форме (2), получаем:

$$|\delta x|\, \Delta_{\psi(x)} P \geqslant \hbar \; .$$

Если в качестве $\psi(x)$ взять хорошо локализованный пакет дебройлевских волн, обращающийся в нуль вне некоторого интервала l, то из этого неравенства, в частности, вытекает, что $l \geqslant \hbar/\Delta_{\psi(x)} P$: ведь при смещении пакета на расстояние l изменение квантового угла должно оказаться больше 1 (а именно — $\pi/2$).

Таким образом, принцип неопределённости Гейзенберга, понимаемый в качественном смысле, вытекает из принципа определённости.

Если же понимать принцип неопределённости Гейзенберга в количественном смысле, в соответствии с неравенством Паули-Вейля

$$\Delta_{\psi(x)} X \, \Delta_{\psi(x)} P \; \geqslant \; \frac{\hbar}{2} \quad , \tag{4}$$

то непосредственной математической связи между этими принципами нет.

При этом, с физической точки зрения, принцип неопределённости Гейзенберга и принцип определённости являются как бы двумя точками зрения на размытость волнового пакета. Принцип неопределённости Гейзенберга говорит, что волновой пакет является протяжённым, поскольку *классическое* состояние частицы является *плохо определённым*. Принцип же определённости утверждает, что волновой пакет является протяжённым, поскольку *квантовое* состояние является *хорошо определённым*.

На трёхмерный случай принцип определённости без труда обобщается в форме (3):

$$\Delta_{\psi(x)} \, (\, \delta x_i \, P_i \,) \geqslant \hbar \; ,$$

где по i предполагается суммирование.

Шрёдингеровская частица на окружности. Рассмотрим теперь плоскость с декартовыми координатами x и y . Пусть на этой плоскости задана окружность $x^2 + y^2 = 1$. На этой окружности в качестве одномерной координаты можно использовать полярный угол φ , рассматриваемый с точностью до 2π .

Вектор состояния шрёдингеровской частицы на этой окружности может быть записан с помощью волновой функции $\psi(\varphi)$. При этом $\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)$.

В пространстве состояний при этом естественно определено действие группы вращений:

$$U(\delta\varphi)\, \psi(\varphi) = \psi(\varphi - \delta\varphi) \; .$$

Эта группа может быть записана в виде:

$$U(\delta\varphi) = e^{-\, i \, \delta\varphi \, J/\hbar} \; , \qquad J = -\, i\hbar \frac{d}{d\varphi} \; .$$

При этом J является оператором момента импульса.

Применение принципа определённости не вызывает каких-либо трудностей:

$$|\delta\varphi|\, \Delta_{\psi(\varphi)} J \geqslant \hbar \; .$$

Что же касается применения принципа неопределённости, то перенесение неравенства (4) на этот случай невозможно[1].

В трёхмерном случае принцип определённости также легко даёт:

$$\Delta_{\psi(x,y,z)} \, (\, \delta\varphi_i \, J_i \,) \geqslant \hbar \; .$$

[1] О предпринимавшихся попытках предложить неравенство, аналогичное (4), см. [1].

Система с гамильтонианом, не зависящим от времени. Пусть теперь имеется квантовая система с гамильтонианом H, не зависящим от времени. При этом на пространстве состояний оказывается определённым действие группы временных сдвигов:

$$U(\delta t)\,\rangle = e^{-\,i\,\delta t\,(-H)/\hbar}\rangle\ .$$

Принцип определённости в этом случае сразу даёт:

$$|\delta t|\,\Delta_{\rangle} H \geqslant \hbar\ .$$

Если эту формулу применить, например, к оценке времени жизни квазистационарного распадающегося состояния, то она утверждает, что характерное время жизни у него не менее чем постоянная Планка, поделённая на ширину соответствующего уровня энергии. При этом всем терминам можно придать точный математический смысл.

Что же касается попыток сформулировать принцип неопределённости Гейзенберга для величин время - энергия, то с того времени, как Бор провозгласил такой принцип (в качественном смысле), для уточнения его смысла было проведено столько исследований и дискуссий, что по ним можно было бы написать отдельный обзор. Насколько мне известно, строгой формулировки принципа неопределённости для этого случая получить так и не удалось[2].

Релятивистские системы. Рассмотрим теперь произвольную релятивистскую квантовую систему. На её пространстве состояний действует группа Пуанкаре. Примером такой системы может служить любое РКК-квантованное поле[3] [3, 4]. И ограничимся здесь обсуждением случая, когда поле оказывается квантованным в обычном гильбертовом пространстве.

В этом случае применение принципа определённости не сталкивается с какими-либо трудностями:

$$\Delta_{\rangle}\,(\,-\,\delta x_\mu\,P_\mu\,+\,\tfrac{1}{2}\,\delta\omega_{\mu\nu}\,J_{\mu\nu}\,) \geqslant \hbar\ ,$$

где P_μ — векторный оператор энергии-импульса, $J_{\mu\nu}$ — тензорный оператор четырёхмерного момента импульса, δx_μ и $\delta\omega_{\mu\nu}$ — стандартные логарифмические координаты группы Пуанкаре.

Что же касается применения принципа неопределённости Гейзенберга, то оно вряд ли возможно. В предыдущем пункте мы видели, что для величин время - энергия это вызывало большие трудности.

В связи с этим, уже из соображений релятивистской инвариантности ясно, что даже для координат и импульсов дело не должно обстоять просто. И это действительно так, поскольку известно, что все попытки вводить понятие координат (как самосопряжённых операторов на пространстве состояний) для релятивистских систем носят довольно искусственный характер[4].

Список литературы

[1] А. С. Давыдов „*Квантовая механика*“, изд. 2-е, М.: Наука (1973).

[2] J. Baez “The time-energy uncertainty relation” (2000), http://math.ucr.edu/home/baez/uncertainty.html .

[3] Д. А. Арбатский „О квантовании электромагнитного поля“ (2002),
http://daarb.narod.ru/qed-rus.html , http://wave.front.ru/qed-rus.html , arXiv:math-ph/0402003 .
[анг.: D. A. Arbatsky “On quantization of electromagnetic field” (2002),
http://daarb.narod.ru/qed-eng.html , http://wave.front.ru/qed-eng.html , arXiv:math-ph/0402003 .]

[4] Д. А. Арбатский „Что такое „релятивистское каноническое квантование“?“ (2005),
http://daarb.narod.ru/wircq-rus.html , http://wave.front.ru/wircq-rus.html , arXiv:math-ph/0503029 .
[анг.: D. A. Arbatsky “What is “relativistic canonical quantization”?” (2005),
http://daarb.narod.ru/wircq-eng.html , http://wave.front.ru/wircq-eng.html , arXiv:math-ph/0503029 .]

[5] T. D. Newton, E. P. Wigner “Localized states for elementary systems”, Rev. Mod. Phys. **21**(3), 400-406 (1949).
[рус.: „Локализованные состояния элементарных систем“, в сб. [6], стр. 277.]

[2] См. также обсуждение этого вопроса Дж. Баезом [2].
[3] Все другие известные мне примеры либо вытекают из указанного, либо математически несостоятельны.
[4] Для некоторых же систем оказывается, что ввести хорошие операторы координат и вовсе невозможно [5].

[6] Е. Вигнер *„Этюды о симметрии“*, М.: Мир (1971). [анг.: E. P. Wigner *“Symmetries and reflections”*, Bloomington-London: Indiana univ. press (1970).]