3.1.2. Свойства векторов состояний

Математические свойства векторов состояний $|\psi\rangle$ таковы: эти величины должны образовывать комплексное векторное пространство, обладающее внутренним (скалярным) произведением, что предполагает возможность двух операций:

1. Умножение на скаляр. Если $|\psi\rangle$ – вектор состояния, c – любое комплексное число, то имеется и вектор $c|\psi\rangle$.

2. Сложение. Если $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ – любые два вектора состояний, то имеется и вектор состояния $|\psi_1\rangle+|\psi_2\rangle$.

Операции 1 и 2 подчиняются следующим правилам:

1) $|\psi_1\rangle+|\psi_2\rangle=|\psi_2\rangle+|\psi_1\rangle$ (коммутативность сложения);
2) $\left(|\psi_1\rangle+|\psi_2\rangle\right)+|\psi_3\rangle=|\psi_1\rangle+\left(|\psi_2\rangle+|\psi_3\rangle\right)$ (ассоциативность сложения);
3) $c\left(|\psi_1\rangle+|\psi_2\rangle\right)=c|\psi_2\rangle+c|\psi_1\rangle$ (дистрибутивность умножения вектора на скаляр относительно сложения векторов);
4) $\left(c_1+c_2\right)|\psi\rangle=c_1|\psi\rangle+c_2|\psi\rangle$ (дистрибутивность умножения вектора на скаляр относительно сложения скаляров);
5) $c_1\left(c_2|\psi\rangle\right)=\left(c_1c_2\right)|\psi\rangle$ (ассоциативность умножения на скаляр);
6) если $c=0$, то произведение $c|\psi\rangle$ – это всегда один и тот же объект, называемый нулевым вектором, который обозначается 0.

Множество $\mathscr{L}$ всех векторов состояний, с учётом нулевого вектора, называется *пространством состояний*.

Предполагая в свойстве 1, что векторы $c|\psi\rangle$, где c – любое комплексное число, и $|\psi\rangle$ описывают одно и то же физическое состояние произвольной квантовой системы, мы видим, что нулевой вектор не описывает физическое состояние системы, иначе бы он описывал любое состояние, являясь результатом умножения на ноль любого вектора. Если волновая функция (вектор состояния) равна нулю, то не существует никакой вероятности обнаружить микрочастицу в какой-либо точке пространства – следовательно, нет и частицы.

Свойство 2, говорящее о том, что сложение состояний всегда возможно, отражено в принципе суперпозиции, п. 2.3. Сумма $|\psi_1\rangle+|\psi_2\rangle$ описывает состояние квантовой системы, в котором она может вести себя так, как если бы описывалась вектором состояния $|\psi_1\rangle$ и так, как если бы описывалась вектором состояния $|\psi_2\rangle$.

Используя комплексные коэффициенты c_1 и c_2 можно образовать вектор $c_1|\psi_1\rangle+c_2|\psi_2\rangle$, в котором относительная вероятность пребывания системы в состоянии $|\psi_1\rangle$ или $|\psi_2\rangle$ определяется отношением коэффициентов c_1 и c_2. Для вычисления этих величин необходимо ввести понятие скалярного произведения.

Для любых двух векторов состояний $|\varphi\rangle$ и $|\psi\rangle$ существует комплексное число $\langle\varphi|\psi\rangle$, называемое их *внутренним*, или *скалярным*, *произведением*, которое удовлетворяет трём условиям:

1) если $|\psi\rangle=c_1|\psi_1\rangle+c_2|\psi_2\rangle$, то $\langle\varphi|\psi\rangle=c_1\langle\varphi|\psi_1\rangle+c_2\langle\varphi|\psi_2\rangle$;

2) $\langle\psi|\varphi\rangle = \overline{\langle\varphi|\psi\rangle} \equiv \langle\varphi|\psi\rangle^*$ (комплексное сопряжение), т. е., если
$|\varphi\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle$, то $\langle\varphi|\psi\rangle = c_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + c_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle$;
3) для любого $|\psi\rangle$ справедливо неравенство $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$, и если
$\langle\psi|\psi\rangle = 0$, то $|\psi\rangle = 0$.

Пример: скалярное произведение для состояний координаты частицы:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \iiint_V \overline{\varphi(\vec{r})}\psi(\vec{r})\,\mathrm{d}V \equiv \iiint_V \varphi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})\,\mathrm{d}V, \tag{21}$$

интегрирование производится по всему пространству.

Удобно использовать такой вектор $|\psi\rangle$ состояния системы, чтобы он удовлетворял условию $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Такой вектор называется *нормированным*. Состояние не определяется однозначно таким вектором, поскольку $|\psi\rangle$ можно изменить, умножив на комплексное число с единичным модулем $e^{i\varphi}$ («фазовый множитель»): $|\psi\rangle$ и $|e^{i\varphi}\psi\rangle$ определяют одно и то же состояние.

Два вектора состояний $|\varphi\rangle$ и $|\psi\rangle$ называются *ортогональными* друг другу, если $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$.

Система векторов состояний $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots, |\psi_n\rangle$ называется *ортонормированной*, если

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j; \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \tag{22}$$

Система векторов состояний $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots, |\psi_n\rangle$ называется *полной*, если любой вектор $|\psi\rangle$ состояния системы можно выразить в виде

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle + \ldots + c_n|\psi_n\rangle. \tag{23}$$

Определим коэффициенты c_i в этом разложении: умножим слева выражение (23) на $\langle\psi_i|$:

$$\langle\psi_i|\psi\rangle = c_1\langle\psi_i|\psi_1\rangle + \ldots + c_i\langle\psi_i|\psi_i\rangle + \ldots + c_n\langle\psi_i|\psi_n\rangle.$$

Если $|\psi_j\rangle$ – ортогональная система векторов, то все произведения $\langle\psi_i|\psi_j\rangle$, где $i \neq j$, равны нулю, а если система ещё и нормированная на единицу, то $\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1$. Следовательно,

$$\langle\psi_i|\psi\rangle = c_i. \tag{24}$$

Будем считать, что в пространстве состояний $\mathscr{L}$ любой системы существует ортонормированная полная система векторов состояний.

Число элементов в такой системе называется *размерностью* пространства состояний.

В общепринятых дираковских обозначениях вектор состояния $|\psi\rangle$ называют *кет-вектором*, а сопряжённый ему вектор $\langle\psi|$ – *бра-вектором* (вместе эти две половины слова образуют *bracket* – скобка, обозначение скалярного произведения).

Норму волновой функции ψ определяют с помощью скалярного произведения $\langle\psi|\psi\rangle$:

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}. \tag{25}$$

Из любой ненормированной волновой функции (т. е. в случае, когда норма её не равна единице) можно получить нормированную:
$\langle\psi'|\psi'\rangle = \left\langle \frac{\psi}{\|\psi\|} \middle| \frac{\psi}{\|\psi\|} \right\rangle = \frac{1}{\|\psi\|^2}\langle\psi|\psi\rangle = \frac{\langle\psi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = 1$, при условии, что она квадратично-интегрируема, $\int\limits_V |\psi|^2\,\mathrm{d}V < \infty$.

Введём расстояние $\rho(\psi,\varphi)$ между векторами $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ линейного пространства $\mathscr{L}$, обладающее свойствами:

1) $\rho(\psi,\varphi) = \rho(\varphi,\psi)$ (аналогично для нормы, $\|\psi-\varphi\| = \|\varphi-\psi\|$);

2) $\rho(\psi,\psi) = 0$ $\left(\|\psi-\psi\| = 0\right)$;

3) $\rho(\psi,\varphi) \le \rho(\psi,\chi) + \rho(\chi,\varphi)$ $\left(\|\psi-\varphi\| \le \|\psi-\chi\| + \|\chi-\varphi\|\right)$,

из чего можно заключить, что норма разности волновых функций ψ и φ имеет смысл расстояния между векторами $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ в линейном пространстве $\mathscr{L}$, поскольку обладает теми же свойствами,

$$\rho(\psi,\varphi) = \|\psi-\varphi\|. \tag{26}$$

Получаем *метрическое пространство* $\mathscr{L}$ (пространство, в котором определена метрика (расстояние) между любыми точками). Линейное бесконечномерное полное по норме пространство называют *Гильбертовым пространством* (полнота пространства связана со сходимостью фундаментальных последовательностей, которая определяется через норму). Будем рассматривать операторы, действующие в Гильбертовом пространстве.