

ФИЗИКА

**Курс лекций для студентов 5 курса
отделения математики (5.2: 507—511, 5.4: 531—533)
механико-математического факультета МГУ**

**Лектор: *Анатолий Викторович Борисов*,
профессор кафедры теоретической физики
физического факультета,
borisov@phys.msu.ru**

**ПРОГРАММА КУРСА «ФИЗИКА. Ч. 2»
для студентов отделения математики
механико-математического факультета**

1. Уравнение Шрёдингера. [С, 2], [Г, 13.3], [Л1, 17], [Ф, 9]
2. Волновая функция. [С, 1, 2, 3], [Г, 13.3], [Л1, 2], [Ф, 11]
3. Наблюдаемые и операторы. [С, 2], [Г, 14.1, 14.2], [Л1, 3], [Ф, 10, 13]
4. Принцип суперпозиции. [С, 3], [Г, 14.1], [Л1, 2], [Ф, 6]
5. Соотношение неопределённостей Гейзенберга. [С, 6], [Г, 14.4], [Л1, 16], [Ф, 7]
6. Изменение наблюдаемых со временем. [С, 6], [Л1, 9], [Ф, 9]
7. Гармонический осциллятор. [С, 7], [Г, 15.5], [Л1, 23], [Ф, 16, 17]
8. Оператор момента импульса. [С, 10], [Г, 16.1], [Л1, 26-28], [Ф, 23-25, 29, 30]
9. Спин. [С, 16], [Г, 18.1], [Л1, 54-56], [Ф, 27, 46]
10. Уравнение Паули. [С, 16], [Г, 18.1], [Л1, 111]
11. Движение в центрально-симметричном поле. [С, 10], [Г, 16.2], [Л1, 32], [Ф, 26, 31]
12. Атом водорода. [С, 12], [Г, 16.4], [Л1, 36], [Ф, 32]
13. Тожественные частицы. Принцип Паули. [С, 24], [Г, 19.1], [Л1, 61], [Ф, 48, 49]
14. Каноническое распределение (распределение Гиббса). [Г, 20.4], [Л2, 28, 31]
15. Термодинамические параметры и потенциалы. [Г, 20.3], [Л2, 9, 12, 13, 15]
16. Идеальный классический газ. Распределение Больцмана. [Л2, 29, 41, 42]
17. Распределение Гиббса с переменным числом частиц. [Г, 20.5], [Л2, 35]
18. Распределение Ферми–Дирака. Идеальный ферми-газ. [Г, 21.1, 21.2], [Л2, 53, 56-58]
19. Распределение Бозе–Эйнштейна. Идеальный бозе-газ. [Г, 21.1, 21.3], [Л2, 54, 56, 62]
20. Распределение Планка. Фотонный газ. [Г, 21.4], [Л2, 63]

Литература

- [С] А. А. Соколов, И. М. Тернов, В. Ч. Жуковский. *Квантовая механика*. М.: Наука, 1979.
- [Г] Д. В. Гальцов. *Теоретическая физика для студентов-математиков*. М.: Изд-во Моск. ун-та, 2003.
- [Л1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. *Квантовая механика*. 6-е изд. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
- [Ф] Л. Д. Фаддеев, О. А. Якубовский. *Лекции по квантовой механике для студентов-математиков*. Л.: Изд-во ЛГУ, 1980.
- [Л2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. *Статистическая физика. Ч. 1*. 5-е изд. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002.

Дополнительная литература

1. Ф. А. Березин, М. А. Шубин. *Уравнение Шрёдингера*. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1983.
2. Л. А. Тахтаджян. *Квантовая механика для математиков*. М.–Ижевск: НИЦ РХД, ИИКИ, 2011.
3. И. А. Квасников. *Термодинамика и статистическая физика. Т. 2. Теория равновесных систем*. М.: УРСС, 2002.
4. З. Флюгге. *Задачи по квантовой механике. Т. 1, 2*. М.: Мир, 1974.
5. Р. Кубо. *Статистическая механика*. 3-е изд. М.: УРСС, 2007.
6. Л. де Бройль. *Избранные научные труды. — Т. 2. Квантовая механика и теория света: работы 1934–1951 годов*. М.: МГУП, 2011. — С. 42–204.
7. А. В. Борисов. *Основы квантовой механики*. М.: Изд-во физич. ф-та МГУ, 1999.

ЗАДАЧИ
по курсу «ФИЗИКА. Ч. 2»
для студентов отделения математики механико-математического факультета

1. Волновая функция свободной частицы при $t = 0$ имеет вид: $\psi(0, x) = A \exp(-x^2/2a^2 + ik_0 x)$.

Используя уравнения эволюции для средних значений наблюдаемых, найти при $t > 0$ средние значения $\langle x \rangle$, $\langle p_x \rangle$, $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$, $\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle$.

2. Найти коэффициент прохождения частицы через потенциальный барьер

$$U(x) = \begin{cases} U_0 > 0, & x \in [0, a]; \\ 0, & x \notin [0, a]. \end{cases}$$

3. Найти спектр энергии частицы в потенциальной яме

$$U(x) = \begin{cases} -U_0 < 0, & |x| < a; \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

4. Найти коэффициент отражения частицы от потенциальной ямы (см. задачу 3).

5. Найти спектр энергии и волновые функции связанных стационарных состояний частицы в поле $U(x) = -g\delta(x)$, $g > 0$. Вычислить средние значения кинетической и потенциальной энергии, произведение дисперсий координаты и импульса.

6. Найти спектр энергии и волновые функции связанных стационарных состояний частицы в поле $U(x) = -g[\delta(x+a) + \delta(x-a)]$, $g > 0$.

7. Гармонический осциллятор при $t = 0$ находился в состоянии $\psi(0, x) = C \exp(-(x-a)^2/2x_0^2 + ik_0 x)$, где $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$, $a > 0$, $k_0 > 0$. Найти при $t > 0$ средние значения $\langle x \rangle$, $\langle p_x \rangle$, $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$, $\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle$.

8. Найти спектр энергии и волновые функции стационарных состояний системы с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \frac{k}{2}(x_1^2 + x_2^2) + \gamma x_1 x_2, \quad |\gamma| < k.$$

Рассмотреть также частные случаи: 1) $m_1 = m_2$, 2) $m_1 \ll m_2$.

9. В состоянии ψ с определенными L^2 и L_z , $\hat{L}^2 \psi = \hbar^2 \ell(\ell+1)\psi$, $\hat{L}_z \psi = \hbar m \psi$, найти средние значения $\langle \hat{L}_x \rangle$, $\langle \hat{L}_y \rangle$, $\langle \hat{L}_x \hat{L}_y \rangle$, $\langle \hat{L}_x^2 \rangle$, $\langle \hat{L}_y^2 \rangle$.

10. В основном состоянии атома водорода найти плотность вероятности различных значений импульса электрона, средние значения его кинетической и потенциальной энергии, среднее расстояние от ядра.

11. Используя уравнение Паули, найти спектр энергии электрона в постоянном однородном магнитном поле $\mathbf{B} = B e_z$, заданном вектор-потенциалом $\mathbf{A} = x B e_y$.

12. Электрон движется в однородном магнитном поле $\mathbf{B}(t) = (B_0 \cos \omega t, B_0 \sin \omega t, B_1)$. При $t = 0$ он находился в состоянии с определенным значением $S_z = \hbar/2$. Найти вероятность переворота спина (перехода в состояние с $S_z = -\hbar/2$) при $t > 0$.

13. Найти теплоемкость системы N независимых частиц, каждая из которых может находиться только на одном из двух уровней энергии $-\varepsilon_0$, ε_0 .

14. Найти теплоемкость системы N независимых осцилляторов частоты ω как функцию температуры T .

15. Квантовая струна эквивалентна системе бесконечного числа независимых осцилляторов с частотами $\omega, 2\omega, 3\omega, \dots$. Найти теплоемкость струны как функцию температуры T .

16. Вычислить большую статистическую сумму для идеального классического газа как функцию температуры T , объема V и химического потенциала μ . Найти уравнение состояния и теплоемкость системы.

17. Найти химический потенциал $\mu(T, L^2/N)$ двумерного ($\varepsilon_p = (p_x^2 + p_y^2)/2m$) идеального квантового газа.

18. Вычислить химический потенциал, давление идеального ультрарелятивистского ферми-газа ($\varepsilon_p = cp$) и средний импульс частицы при $T = 0$ (в объеме V находится N частиц).

19. Вычислить теплоемкость идеального бозе-газа в области температур $|T - T_0|/T_0 \ll 1$.

20. Найти среднее число фотонов, средний импульс фотона, давление и теплоемкость фотонного газа в объеме V при температуре T .

11.02.2021

Профессор  А. В. Борисов

1. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

1.1. Физические предпосылки создания квантовой механики

1⁰. Атомные спектры излучения

Согласно экспериментальным данным, полученным к концу XIX века, частоты спектральных линий данного атома

$$\omega_{n'n} = T(n) - T(n'),$$

где $T(n)$ – функция целого числа (спектральный терм), $n = 1, 2, 3, \dots$.

Это соотношение выражает комбинационный принцип Ритца (W. Ritz). В частности, для спектра излучения атома водорода Бальмер (J. Balmer) в 1885 г. эмпирически нашел простую формулу

$$\omega_{n'n} = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

где R – постоянная Ридберга (J. Rydberg).



Рис. 14.1.3. Бальмеровская серия атома водорода.

рис.14.1.3. Положение линии отмечено цветной линией; сверху — длина волны в ангстремах, снизу — принятое обозначение перехода. Головная линия H_{α} находится в красном диапазоне спектра; обычно она оказывается самой сильной линией серии. Остальные переходы монотонно ослабевают по мере увеличения главного квантового числа верхнего номера. Линия H_{β} расположена в сине-зелёном участке спектра, а остальные — в синей и фиолетовой областях.

В классической теории для периодического движения заряженных частиц частоты излучения кратны основной частоте:

$$\omega_n = n\omega_0, \quad \omega_0 = \frac{2\pi}{\tau},$$

τ – период. Таким образом, эта теория не может объяснить комбинационный принцип.

Само существование атомов не может быть объяснено в классической теории: электрон, вращаясь вокруг ядра, теряет энергию на излучение, и в итоге упадет на ядро!

Lifetime of hydrogen atom in classical electrodynamics

Suppose electron is rotating around nucleus in a circular orbit. For a circular orbit

$$\frac{mv^2}{R} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \Rightarrow \frac{v^2}{R} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m R^2}$$

The kinetic and potential energies are

$$E_{\text{kin}} = \frac{mv^2}{2}, \quad E_{\text{pot}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

so the total energy is

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 R}$$

The period of rotation is

$$T = \frac{2\pi R}{v} = \frac{4\pi^{3/2}}{|e|} \sqrt{\epsilon_0 m R}$$

The rotating electron radiates power

$$P = \mu_0 \frac{e^2 a^2}{6\pi c} \quad - \quad \text{Larmor's formula}$$

Let us suppose that the loss of energy due to radiation over one period is much smaller than the total energy, then one can consider $R = R(t)$ slowly varying function of time.

After one revolution:

The radiated energy is

$$PT = \mu_0 \frac{e^2 a^2}{6\pi c} T = \mu_0 \frac{e^2}{6\pi c} \frac{v^2}{R^4} T$$

The change of $E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$ is

$$E(R(t+T)) - E(R(t)) = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 R(t+T)} + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 R(t)} \simeq \frac{e^2 T}{8\pi\epsilon_0 R^2(t)} \frac{dR(t)}{dt}$$

since $R(t+T) = R(t) + T \frac{dR(t)}{dt}$.

Thus, we get a differential equation

$$\frac{dR(t)}{dt} = -\frac{\mu_0 c e^4}{12\pi^2 m^2 R^2(t)} \Leftrightarrow R^2(t) \frac{dR(t)}{dt} = -\frac{\mu_0 c e^4}{12\pi^2 m^2} dt$$

Integrating this equation we get

$$\int R^2 dR = -\frac{\mu_0 c e^4}{12\pi^2 m^2} \int dt \Rightarrow \frac{R^3}{3} = -\frac{\mu_0 c e^4}{12\pi^2 m^2} t + \text{const}$$

Suppose at $t = 0$ $R = R_0$ (radius of the atom), then $\text{const} = \frac{R_0^3}{3}$ and we get

$$R_0^3 - R^3(t) = -\frac{\mu_0 c e^4}{4\pi^2 m^2} t$$

so the lifetime of the classical hydrogen atom is

$$\tau = \frac{4\pi^2 m^2}{\mu_0^2 c e^4} R_0^3$$

Taking $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$, $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{C}$, $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \frac{\text{N}}{\text{A}^2}$ and estimating $R_0 \simeq \text{Bohr radius} \simeq 5 \times 10^{-11} \text{m}$ we get

$$\tau \simeq 1.3 \times 10^{-11} \text{s}$$

2⁰. Равновесие электромагнитного излучения и вещества

Рассмотрим замкнутый сосуд, нагретый до температуры T . Внутри него находится равновесное электромагнитное излучение: излучаемая и поглощаемая атомами вещества стенок сосуда в единицу времени энергии равны. Спектральная плотность энергии равновесного излучения – универсальная функция частоты и температуры $\rho(\omega, T)$ (не зависит от размеров и формы сосуда и вещества стенок). Из классической теории следует закон Рэлея (J. Rayleigh):

$$\rho \sim \omega^2 T ,$$

т.е. полная плотность (энергия в единице объема)

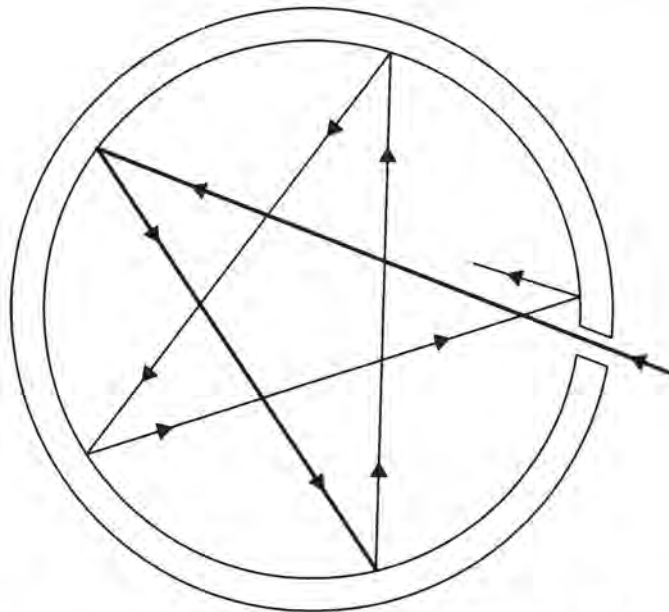


Figure 1.1 A good approximation to a black body. A cavity kept at a constant temperature and having blackened interior walls is connected to the outside by a small hole. To an outside observer, this small hole appears like a black body surface because any radiation incident from the outside on the hole will be almost completely absorbed after multiple reflections on the interior surface of the cavity. Because the cavity is in thermal equilibrium, the radiation inside it can be closely identified with black body radiation, and the hole also emits like a black body.

$$\int_0^{\infty} d\omega \rho(\omega, T) = \infty ,$$

что означает невозможность равновесия в противоречии с экспериментом!

В 1900 г. Планк (M. Planck), анализируя механизм установления равновесия между веществом и излучением, выдвинул **фундаментальную гипотезу квантования**: вещество испускает энергию излучения конечными порциями (квантами), пропорциональными частоте излучения. Коэффициент пропорциональности – **универсальная постоянная** h , имеющая размерность механического действия. В простейшей модели вещества в виде атомных осцилляторов это означает, что энергия E осциллятора частоты ω квантуется по закону

$$E_n = n\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2 \dots$$

Здесь введена постоянная Планка $\hbar = h / 2\pi$ (сам Планк использовал вместо циклической частоты ω линейную частоту $\nu = \omega / 2\pi$, так что $h\nu = \hbar\omega$).

Используя гипотезу квантования (**противоречащую классической физике!**), Планку удалось получить следующую формулу для спектральной плотности энергии равновесного излучения:

$$\rho(\omega, T) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)},$$

где скорость света c и **постоянная Больцмана** k_B (L. Boltzmann) известны из классической физики. Формула Планка прекрасно согласуется с экспериментом, позволяющим определить постоянную Планка (приводим современное значение):

$$\hbar = 1,054571817... \times 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}.$$

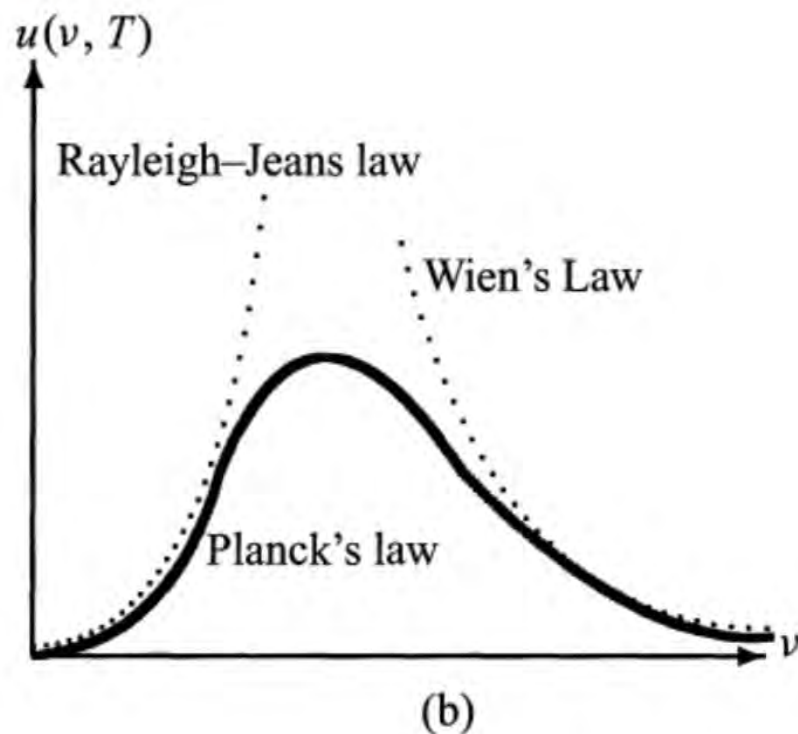
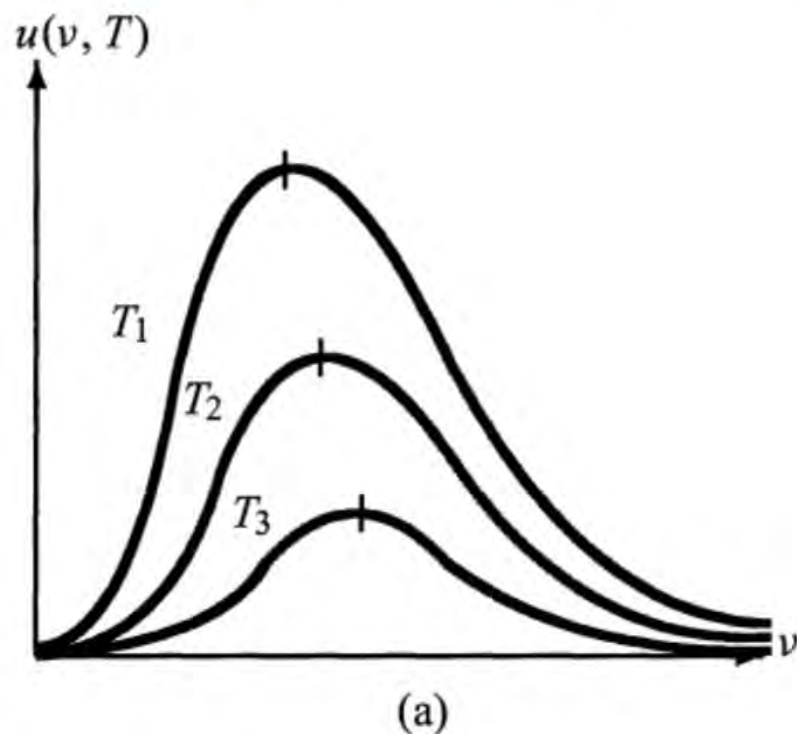


Figure 1.1 (a) Experimental spectral energy density for several temperatures T_1 , T_2 , T_3 , with $T_1 > T_2 > T_3$. (b) The solid curve represents the experimental and the Planck distributions (they match perfectly); the dotted curves correspond to the Rayleigh-Jeans and the Wien distributions.

3⁰. Фотоэффект

Планк приписал квантовые свойства атомным осцилляторам, а не излучению. В 1905 г. А. Эйнштейн (A. Einstein), развивая гипотезу Планка, сделал второй шаг: само электромагнитное излучение состоит из отдельных квантов – частиц, названных позже *фотонами*. Энергия фотона, отвечающего излучению частоты ω , равна

$$\varepsilon = \hbar \omega.$$

Гипотеза Эйнштейна возникла при анализе фотоэффекта, открытого Герцем в 1887 г. (H. Hertz) и подробно исследованного А.Г. Столетовым в 1888–90 г. Эффект состоит в испускании веществом электро-

нов под действием падающего на вещество излучения достаточно высокой частоты. Объяснение законов фотоэффекта следует из выведенного Эйнштейном уравнения:

$$\hbar\omega = \frac{mv^2}{2} + A,$$

т.е. кинетическая энергия электрона – линейная функция частоты (A – работа выхода, характерная для данного вещества) и не зависит от интенсивности излучения, что противоречит классической теории, но подтверждается экспериментом.

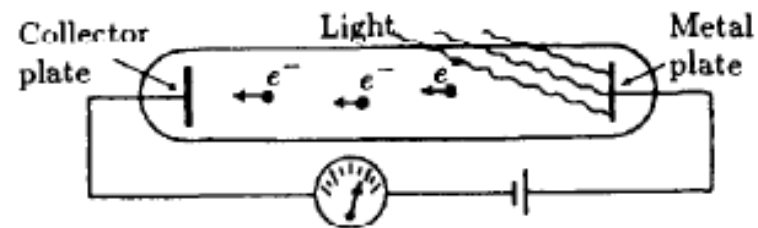
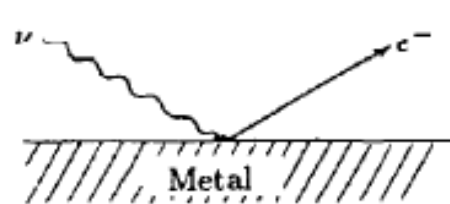


Fig. 1.1. Measurement of the photoelectric effect: light (\rightarrow) shines on a metal thereby liberating electrons (e^-)

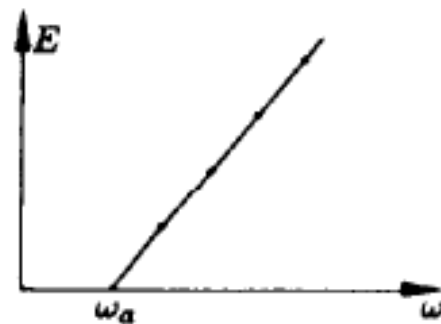


Fig. 1.2. The linear increase of photoelectron energy with frequency ω of the incident light

4⁰. Эффект Комптона

В 1922 г. Комптон (А. Compton) обнаружил увеличение длины волны λ рентгеновского излучения вследствие его рассеяния электронами вещества. Согласно же классической теории длины волн падающего и рассеянного излучения должны совпадать. Теория эффекта была построена Комптоном и независимо Дебаем (Р. Debye) на основе фотонной гипотезы Эйнштейна. Взаимодействие излучения с электроном сводится к упругому столкновению фотона с покоящимся электроном. При этом импульс фотона определяется в виде

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} .$$

Здесь волновой вектор

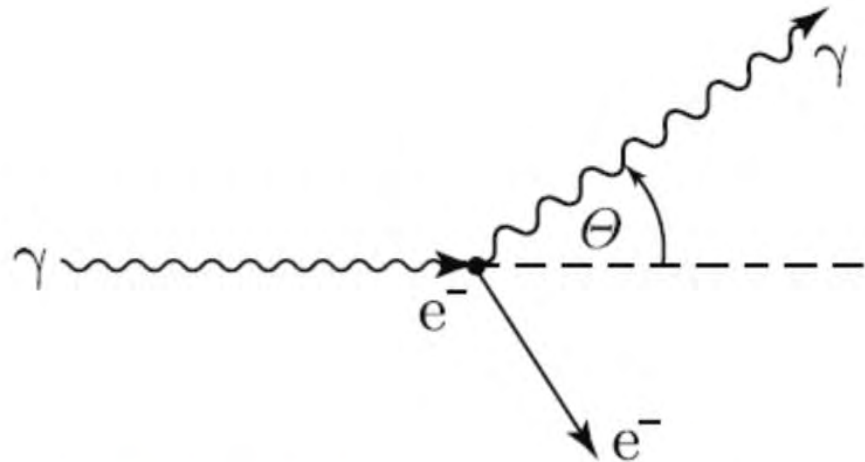
$$\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \mathbf{n},$$

\mathbf{n} – единичный вектор в направлении распространения монохроматической волны, соответствующей фотону. Это определение – следствие того, что величины

$$k^\mu = \left(\frac{\omega}{c}, \mathbf{k} \right) \text{ и } p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right)$$

образуют 4-векторы относительно преобразований Лоренца (см. первую часть курса физики).

Запишем законы сохранения энергии и импульса для указанного процесса столкновения:



The four momentum:

| | Photon | Electron |
|---------|---|--|
| Before: | $\hbar \begin{pmatrix} k \\ \mathbf{k} \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} mc \\ 0 \end{pmatrix}$ |
| After: | $\hbar \begin{pmatrix} k' \\ \mathbf{k}' \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} \sqrt{p'^2 + m^2 c^2} \\ \mathbf{p}' \end{pmatrix}$ |

$$\hbar\omega + mc^2 = \hbar\omega' + E',$$

$$\hbar\mathbf{k} = \hbar\mathbf{k}' + \mathbf{p}',$$

где $E' = \sqrt{m^2c^4 + c^2\mathbf{p}'^2}$ – энергия электрона после столкновения. Отсюда получаем частоту рассеянного фотона:

$$\omega' = \frac{\omega}{1 + \frac{\hbar\omega}{mc^2}(1 - \cos\theta)},$$

где θ – угол между \mathbf{k} и \mathbf{k}' (угол рассеяния). Учитывая связь частоты и длины волны,

$$\lambda = 2\pi c / \omega,$$

находим изменение длины волны при рассеянии:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 4\pi\hat{\lambda}_e \sin^2 \frac{\theta}{2}.$$

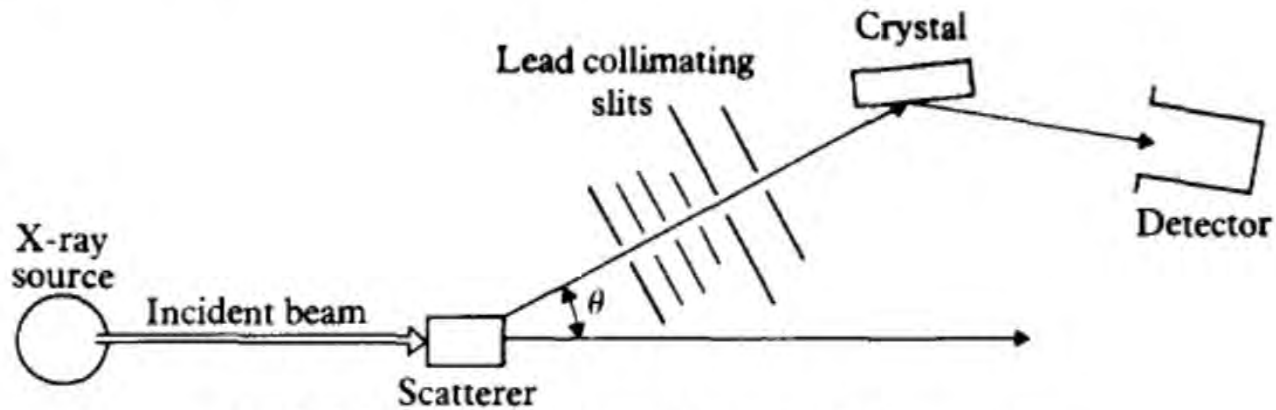
Здесь введена **КОМПТОНОВСКАЯ ДЛИНА ВОЛНЫ ЭЛЕКТРОНА**

$$\hat{\lambda}_e = \frac{\hbar}{mc} = 3,86 \cdot 10^{-11} \text{ см.}$$

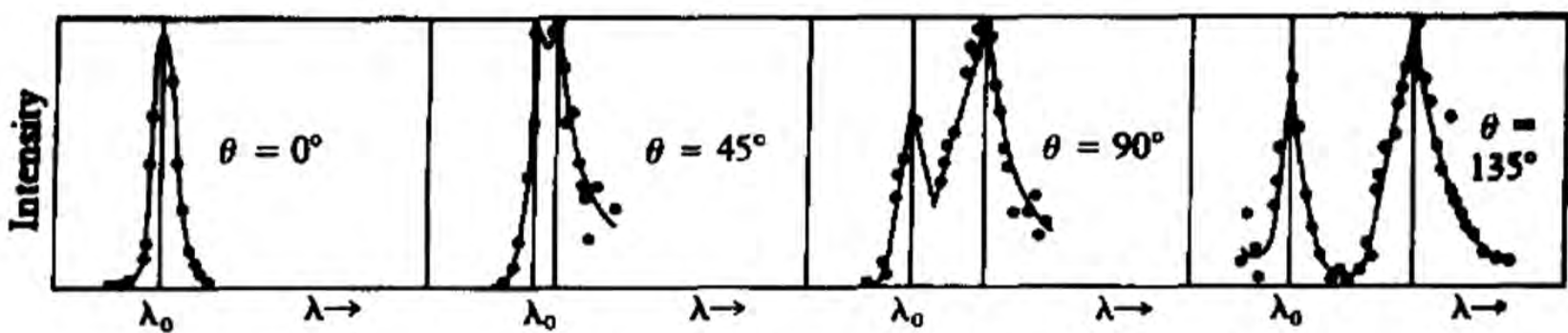
Для рентгеновского излучения ($\lambda \sim 10^{-9}$ см) получаем

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \leq 4\pi \frac{\hat{\lambda}_e}{\lambda} \sim 0,1,$$

т. е. вполне заметный эффект. Для видимого света ($\lambda \sim 10^{-5}$ см) эффект гораздо меньше ($\sim 10^{-5}$). Найденная зависимость изменения длины волны от угла рассеяния прекрасно согласуется с экспериментом.



1.10 Schematic diagram of Compton's apparatus.



1.11 Compton's data for the scattering of X-rays by graphite.

5⁰. Волновые свойства электронов

Итак, электромагнитное излучение обладает как волновыми, так и корпускулярными свойствами (корпускулярно-волновой дуализм). Этот дуализм неразрывно связан с существованием постоянной Планка \hbar – кванта действия. Квантование действия можно получить, обобщив планковское правило квантования энергии осциллятора. Запишем гамильтониан осциллятора – интеграл движения:

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} = E,$$

где q и p – координата и импульс. Отсюда видно, что его фазовая траектория – эллипс с полуосями $a = \sqrt{2mE}$ и $b = \sqrt{2E/m\omega^2}$. Площадь эллипса $\pi ab = 2\pi E / \omega$ равна контурному интегралу по фазовой траектории (в классической механике он называется *переменной действия*):

$$\oint pdq = 2\pi\hbar n,$$

где учтен **планковский постулат квантования энергии**. Мы получили правило квантования произвольной одномерной системы, совершающей периодическое движение. Оно впервые было выведено самим Планком.

В 1913 г. Бор (N. Bohr) применил это правило к атому водорода, рассмотрев движение электрона в кулоновском поле ядра по круговой орбите. Выбрав в качестве координаты азимутальный угол φ , для соответствующего канонического импульса p_φ – интеграла движения – получаем условие квантования:

$$\int_0^{2\pi} p_\varphi d\varphi = 2\pi p_\varphi = 2\pi n\hbar, \text{ или } p_\varphi = n\hbar.$$

Для частицы массы m , движущейся со скоростью v по окружности радиуса r (в плоскости (x, y)), имеем $p_\varphi = mvr$, т.е. p_φ – z -компонента момента импульса, или $\mathbf{L} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v}$. Таким образом, \hbar – *квант момента импульса*.

Учтем уравнение движения электрона с зарядом $-e$ в кулоновском поле ядра с зарядом e ,

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2},$$

и квантование момента: $mvr = n\hbar$. Отсюда находим квантованные значения энергии электрона в атоме водорода:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Так Бор пришел к выводу о существовании дискретного множества *стационарных состояний* атома с энергиями E_n .

Далее он предположил, что излучение атома возникает при его переходе из одного стационарного состояния n в другое n' (с меньшей

энергией). Частота соответствующей спектральной линии определяется правилом, следующим из закона сохранения энергии:

$$\omega_{n'n} = \frac{1}{\hbar} (E_n - E_{n'}).$$

Это и есть знаменитое *правило частот Бора*. В соответствии с гипотезой Эйнштейна при переходе излучается фотон с энергией $\hbar\omega_{n'n}$.

Применив правило частот к атому водорода, Бор получил формулу Бальмера, найдя при этом выражение для постоянной Ридберга через фундаментальные физические постоянные:

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^3}.$$

Вычисленное значение R прекрасно согласуется со значением, полученным из спектроскопических измерений.

Дальнейшее развитие теории Бора потребовало найти методы квантования систем с несколькими степенями свободы. Важный класс таких систем – квазипериодические системы с разделяющимися переменными. В этом случае правила квантования применяются к каждой независимой паре канонических переменных (p_i, q_i) :

$$\oint p_i dq_i = 2\pi\hbar n_i, \quad i = \overline{1, f}.$$

Таким образом, число вводимых квантовых чисел n_i равно числу степеней свободы f . Условия квантования квазипериодических систем были сформулированы независимо Вильсоном и Зоммерфельдом (W. Wilson, A. Sommerfeld) в 1915–16 г. Применение этих условий к эллиптическим электронным орбитам в атоме водорода дало известный результат Бора для энергии стационарных состояний вследствие

специфики кулоновского потенциала (совпадение периодов изменения разделяющихся сферических координат r, θ, φ приводит к зависимости квантованных значений энергии только от суммы целых чисел $n = n_r + n_\theta + n_\varphi$).

Теория Бора–Зоммерфельда оказалась не в состоянии объяснить обнаруженную тонкую структуру атомных спектров и была непоследовательной: она использовала как классические представления, так и чуждые ей квантовые. В частности, электрон считался классической частицей, но из всего множества возможных траекторий отбирались лишь те, которые удовлетворяли условиям квантования.

В 1923 г. Л. де Бройль (L. de Broglie) выдвинул гипотезу, что электрон (и другие микрочастицы) не является классической корпускулой, но должен обладать также и волновыми свойствами. Тем самым де Бройль обобщил понятие эйнштейновского **корпускулярно-волнового дуализма** электромагнитного излучения. Согласно де Бройлю, частице с энергией E и импульсом \mathbf{p} отвечает некоторая монохроматическая волна, частота и волновой вектор которой связаны с характеристиками частицы соотношениями

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}.$$

Они в точности совпадают с соотношениями Эйнштейна для фотона и световой волны.

Следовательно, **дебройлевская длина волны частицы**

$$\lambda = \frac{2\pi \hbar}{p}.$$

Правило квантования для одномерной частицы получает наглядную волновую интерпретацию:

$$\oint \frac{dq}{\lambda} = n,$$

т.е. на длине траектории должно укладываться целое число длин волн (ср. с известным из школьного курса условием образования стоячих волн на струне с закрепленными концами).

Гипотеза де Бройля вскоре получила блестящее экспериментальное подтверждение: в 1927 г. Дэвиссон и Джермер (C. Davisson, L. Germer) наблюдали *дифракцию пучка электронов* на монокристалле

никеля (периодической атомной структуре – аналоге используемой в оптике дифракционной решетке). Для использованных ими нерелятивистских электронов, получивших кинетическую энергию при прохождении разности потенциалов Φ , получаем

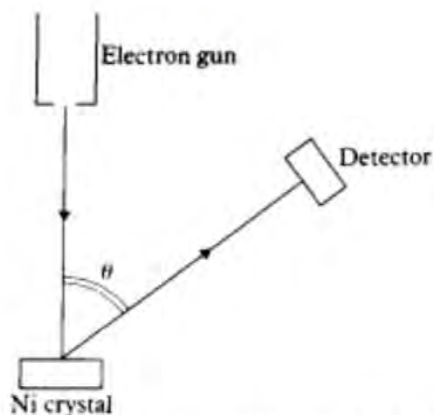
$$\frac{mv^2}{2} = e\Phi, \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}.$$

Отсюда, выражая Φ в вольтах, получим длину электронной волны

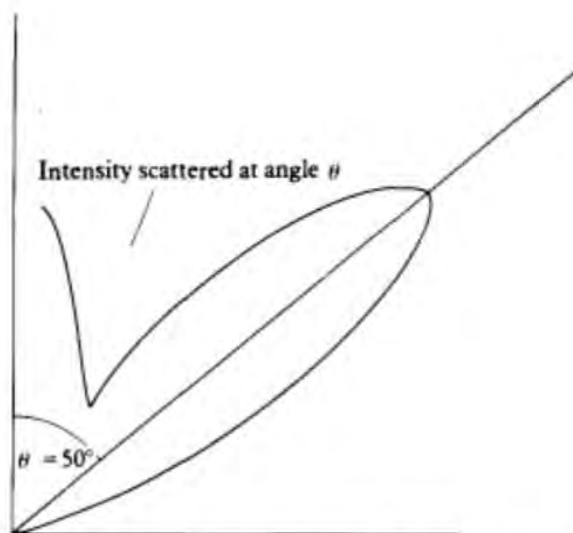
$$\lambda = \frac{1,2 \cdot 10^{-7}}{\sqrt{\Phi}} \text{ см.}$$

При $\Phi = 100$ В находим $\lambda \simeq 10^{-8}$ см, что отвечает длине волны мягкого рентгеновского излучения и среднему межатомному расстоянию в кристаллической решетке. Поэтому при этих условиях дифракция

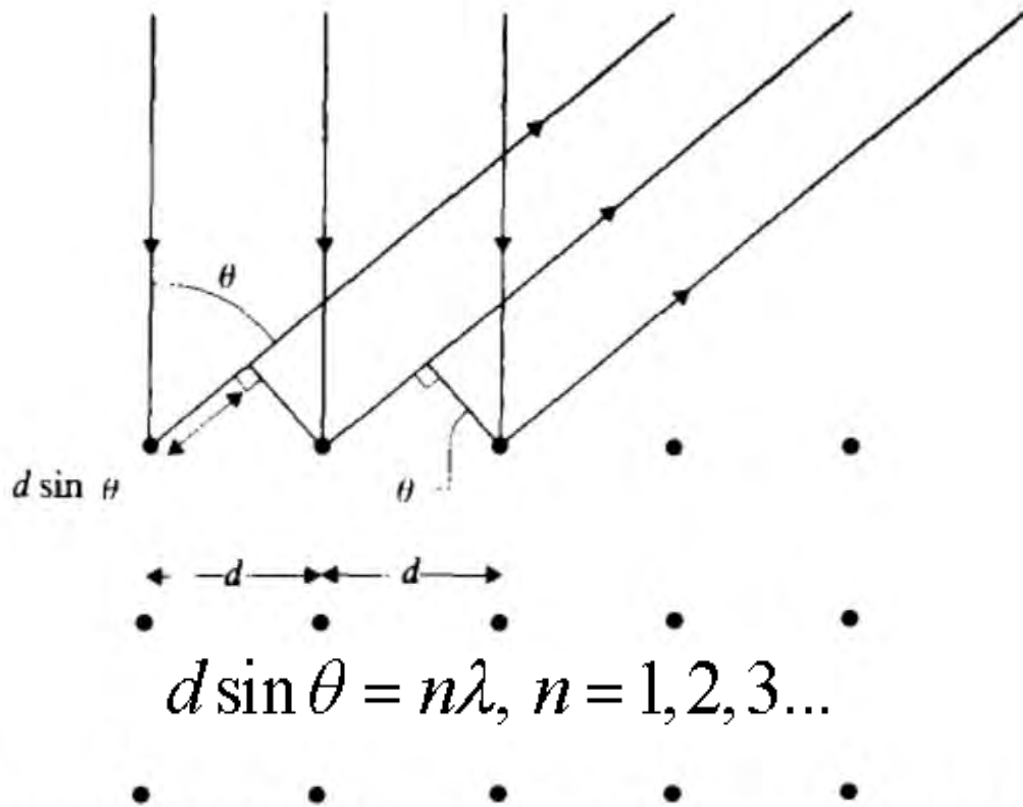
электронов должна быть аналогична открытой еще в 1912 г. дифракции рентгеновских лучей, что и наблюдалось в действительности.



1.25 Schematic diagram of Davisson and Germer's experiment on the diffraction of electrons when scattered by a crystal of nickel.



1.26 Polar diagram of the scattered intensity against angle of scattering for electrons of 54 eV in the Davisson–Germer experiment.



1.27 The Bragg condition. Low energy electrons are only scattered by atoms in the **surface plane**. The difference in path length for scattering angle θ is $d \sin \theta$ which must equal a whole number of wavelengths for constructive interference.

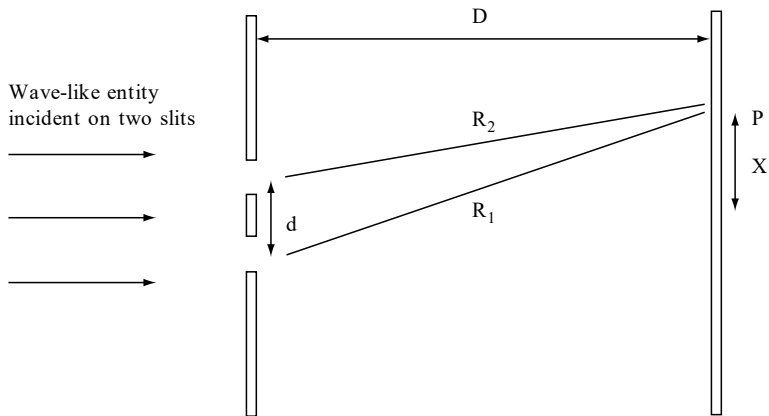


Fig. 1.2 A schematic illustration of a two-slit interference experiment consisting of two slits with separation d and an observation screen at distance D . Equally spaced bright and dark fringes are observed when wave-like disturbances from the two slits interfere constructively and destructively on the screen. Constructive interference occurs at the point P , at a distance x from the centre of the screen, when the path difference $R_1 - R_2$ is an integer number of wavelengths. This path difference is equal to xd/D if $d \ll D$.

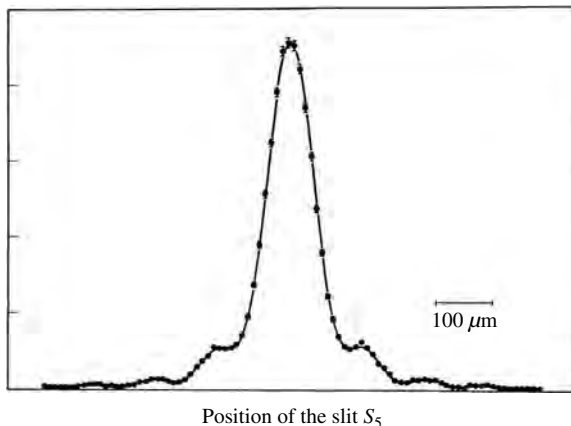


Fig. 1.8. Neutron diffraction by a slit. The full line is the theoretical prediction. From A. Zeilinger *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1067 (1988).

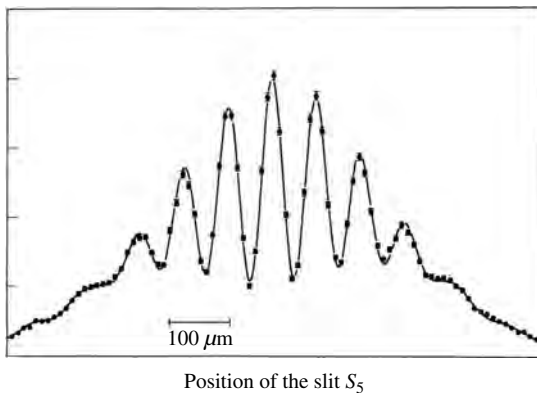


Fig. 1.9. Young's slit experiment using neutrons. The full line is the theoretical prediction. From A. Zeilinger *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1067 (1988).

1.2.2 Interference of Atoms in a Double-Slit Experiment

The principle and the result of a Young double-slit interference experiment performed with atoms³ are represented in Fig. 1.3. A small cloud of neon atoms was first captured in a laser trap, and cooled down to a temperature of the order of one millikelvin. It was then released and fell with zero initial velocity onto a plate pierced with two parallel slits of width 2 microns, separated by a distance of 6 microns. The plate was located 3.5 cm below the center of the laser trap. The atoms were detected when they reached a screen located 85 cm below the plane of the two slits. This screen registered the impacts of the atoms: each dot in Fig. 1.3 represents a single impact. The impacts are distributed in a system of fringes similar to the one obtained with light waves. On some lines, parallel to the slit direction, very few atoms are detected. On either side of such a line, a large atom flux is detected.

This type of experiment has also been performed with other particles: electrons, neutrons and molecules. In all cases the distribution of impacts on the detection screen reveals an interference-like pattern. The measured fringe spacing is $x_s = \lambda D/a$, where the wavelength λ and the momentum $p = mv$ of the particles of velocity v are related by the de Broglie relation

$$p = h/\lambda. \quad (1.7)$$

In the experiment shown in Fig. 1.3, an accurate calculation of the positions of the interference fringes must take into account the variation of the de Broglie wavelength $\lambda = h/p$ since the atoms are accelerated by gravity. The velocity of the atoms is 0.8 m s^{-1} in the plane of the slits and 4 m s^{-1} on the detecting screen.

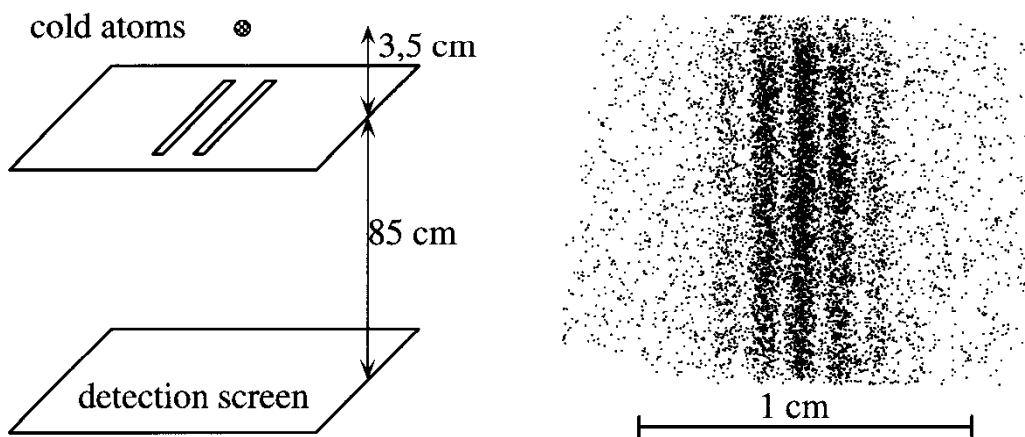


Fig. 1.3. *Left:* Young double-slit experiment with neon atoms cooled by lasers to a temperature $T \sim 1 \text{ mK}$. *Right:* detected pattern, with clearly visible interference fringes. Each point of the figure corresponds to the impact of an atom on the detection screen

³ F. Shimizu, K. Shimizu, H. Takuma, Phys. Rev. A **46**, R17 (1992) and private communication.

Pattern formed by 100 quantum particles



Pattern formed by 1000 quantum particles



Pattern formed by 10000 quantum particles



Fig. 1.3 A computer generated simulation of the build-up of a two-slit interference pattern. Each dot records the detection of a quantum particle on a screen positioned behind two slits. Patterns formed by 100, 1000 and 10000 quantum particles are illustrated.

1989 [35]: A. Tonomura et al., Am. J. Phys. 57, 117 (1989)

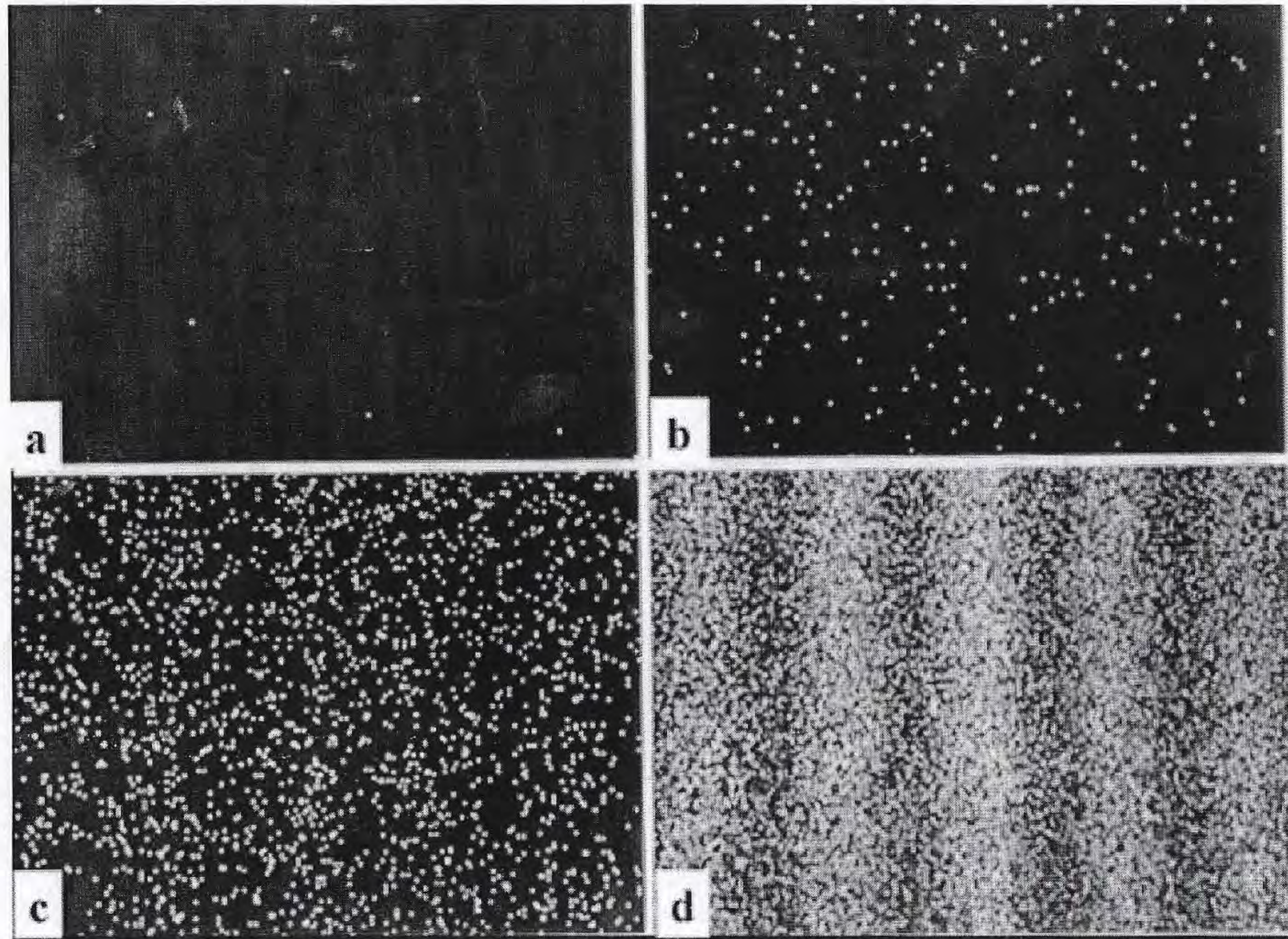
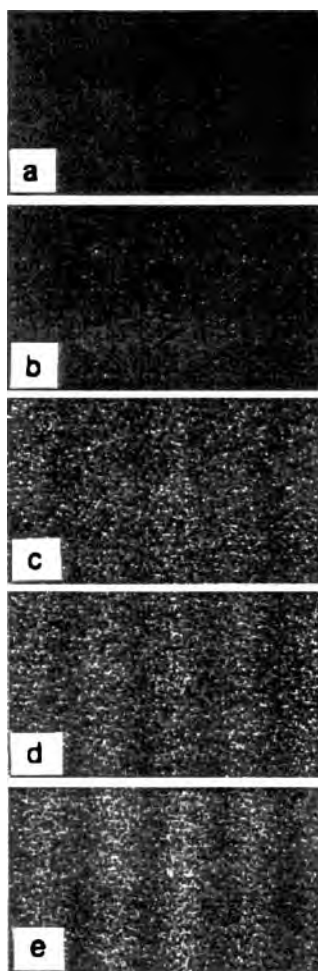


Figure 2.1: A sequence of pictures showing the progress of Young's double slit experiment done with single electrons [35]. In a) there are 8 electron spots, in b) 270, in c) 2000 and in d), after 20 minutes of exposure, there are 6000 electron spots.

the field-emission tip. Under these circumstances it is unlikely that there could have been any cooperative interaction between the electrons of the beam.

Electron detection events appear on the TV monitor one by one at random locations as illustrated in Fig. 1.2. The first few hundred scattered spots hardly hint of any organization. However, by the time some hundred thousand electrons have been recorded, stark alternating stripes of white and black stand out sharply as if made by the two-slit interference of laser light. Indeed, except for the large difference in wavelengths – about 500 nm for visible light and 0.005 nm (a tenth the diameter of a hydrogen atom) for the 50 keV electrons³ – the uninformed observer could not tell whether the fringe pattern was created by light or by particles.



If the location of each electron arrival is random, and there is no communication between electrons, how then can the overall spatial distribution of detected electrons manifest a coherently organized pattern? That is the enigma of quantum mechanics to which Feynman referred.

Fig. 1.2. Evolution of the electron interference pattern in time. Electrons arrive at the rate of approximately 1000 per second. The number recorded in each frame is: (a) 10, (b) 100, (c) 3000, (d) 20 000, and (e) 70 000. (Courtesy of A. Tonomura, Hitachi ARL)

³ The electron volt (eV) is a unit of energy equal to that gained by a particle with the charge of the electron (e) transported through a potential difference of 1 volt. $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$.

1.2. Волновое уравнение Шрёдингера

Получим уравнение для волны, сопоставляемой электрону. Примем простейшую гипотезу, что волновое поле описывается *скалярной* функций времени t и координат $\mathbf{r} = (x, y, z)$ точки наблюдения. По традиции эта функция обозначается $\psi(t, \mathbf{r})$ и называется *волновой функцией*.

Рассмотрим сначала частный случай монохроматической волны:

$$\psi = A \exp[-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})].$$

В нашем курсе мы ограничимся *нерелятивистской* теорией, в которой энергия E свободной частицы массы m связана с ее импульсом \mathbf{p} соотношением

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m},$$

что дает следующую зависимость частоты дебройлевской волны ω от волнового вектора \mathbf{k} (*закон дисперсии*):

$$\omega = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m}.$$

Для монохроматической волны имеем

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega\psi, \quad \nabla \psi = i\mathbf{k}\psi, \quad \nabla^2 \psi = -\mathbf{k}^2\psi,$$

и учет закона дисперсии приводит к дифференциальному уравнению для волновой функции

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi.$$

Это и есть *уравнение Шрёдингера* (E. Schrödinger) для свободной частицы, полученное им в 1926 г. Ввиду линейности этого уравнения

(параболического типа) оно выполняется для произвольной суперпозиции монохроматических волн:

$$\psi(t, \mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} C(\mathbf{k}) e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})},$$

представляющей собой *общее* решение.

Возникает вопрос о связи уравнения Шрёдингера (УШ) и уравнений классической механики. Заметим, что фаза монохроматической волны связана с решением $S(t, \mathbf{r})$ *уравнения Гамильтона–Якоби* (УГЯ) для свободной частицы

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 = 0$$

очевидным соотношением

$$S = -Et + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} = -\hbar(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}),$$

а сама волновая функция выражается через S в виде

$$\psi = e^{iS/\hbar}.$$

Подставив это выражение в УШ, получим для S уравнение

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S = 0,$$

которое отличается от УГЯ дополнительным слагаемым, пропорциональным постоянной Планка \hbar , и *эквивалентно* УШ. В частном случае, когда S – линейная функция \mathbf{r} , это слагаемое обращается в нуль. В общем же случае УШ для ψ переходит в УГЯ для S только в (формальном) пределе $\hbar \rightarrow 0$.

Используем установленную связь УШ и УГЯ, чтобы найти УШ для частицы, движущейся в потенциальном силовом поле $U(t, \mathbf{r})$. Запишем соответствующее классическое УГЯ:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U = 0.$$

Перейдем к новой функции $\psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)$. Для нее получаем:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \psi, \quad \nabla \psi = \frac{i}{\hbar} (\nabla S) \psi, \quad \nabla^2 \psi = -\frac{1}{\hbar^2} [(\nabla S)^2 - i\hbar \nabla^2 S] \psi.$$

В силу УГЯ для S функция ψ удовлетворяет *нелинейному* уравнению. Однако для объяснения явлений интерференции и дифракции необходимо выполнение *принципа суперпозиции*. Поэтому уравнение для

ψ должно быть *линейным*. Оно следует из *квантового обобщения* уравнения Гамильтона–Якоби (КУГЯ)

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + U - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S = 0$$

и имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(t, \mathbf{r}).$$

Это *уравнение Шрёдингера* для частицы в *потенциальном поле*. Введенный линейный оператор \hat{H} называется *оператором Гамильтона*, или *гамильтонианом*.

Линейное УШ эквивалентно нелинейному КУГЯ, причем в общем случае как ψ , так и S – *комплекснозначные* функции. КУГЯ переходит в классическое УГЯ при условии

$$\hbar |\nabla^2 S| \ll (\nabla S)^2.$$

В этом приближении допустимо использовать классическое выражение для импульса $\mathbf{p} = \nabla S$. Тогда находим

$$\frac{\hbar}{p^2} |\nabla \mathbf{p}| \ll 1, \text{ или } \frac{\hat{\lambda} |\nabla \mathbf{p}|}{p} \ll 1,$$

т.е. относительное изменение импульса на дебройлевской длине волны $\hat{\lambda} = \hbar/p$ должно быть малым.

В одномерном случае получаем простое условие

$$\left| \frac{d\hat{\lambda}}{dx} \right| \ll 1,$$

т.е. $\hat{\lambda}$ должна слабо изменяться при изменении координаты x . При $\partial U / \partial t = 0$ выполняется закон сохранения энергии:

$$\frac{p^2}{2m} + U(x) = E.$$

Отсюда находим

$$\frac{p}{m} \frac{dp}{dx} = - \frac{dU}{dx} = F,$$

где F – ньютоновская сила. Условие применимости классического уравнения Гамильтона–Якоби принимает в стационарном одномерном случае вид:

$$\frac{\hbar |F|}{p^2 / m} \ll 1,$$

т.е. работа силы на дебройлевской длине волны должна быть мала по сравнению с кинетической энергией частицы. Это условие заведомо нарушается в окрестности *точки поворота* $x = x_0$, где $p(x_0) = 0$, и, следовательно, $\hbar = \infty$.

Более подробно условия применимости классической механики мы обсудим позже (см. п. 5).

2. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

2.1. Волновой пакет и его эволюция

Рассмотрим специальное решение уравнения Шрёдингера для свободной частицы в одномерном случае:

$$\psi(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk C(k) \exp[-i(\omega t - kx)],$$

где $C(k)$ – функция, модуль которой имеет резкий максимум в некоторой точке $k = k_0$ и быстро убывает при $|k - k_0| \rightarrow \infty$. Такое решение называется *волновым пакетом*.

Ограничимся для определенности частным случаем прямоугольного пакета:

$$C(k) = \begin{cases} A / \delta = \text{const}, & k \in I = (k_0 - \delta / 2, k_0 + \delta / 2); \\ 0, & k \notin I, \end{cases}$$

где $0 < \delta \ll k_0$.

Вычислим интеграл по k приближенно, используя разложение частоты $\omega(k)$ в окрестности k_0 :

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \omega'(k_0)(k - k_0) + \frac{1}{2} \omega''(k_0)(k - k_0)^2 + \dots$$

С учетом лишь линейных членов разложения получим пакет в виде

$$\psi(t, x) = B(t, x) \exp[-i(\omega_0 t - k_0 x)].$$

Здесь переменная амплитуда

$$B(t, x) = \frac{A}{\delta} \int_{k_0 - \delta/2}^{k_0 + \delta/2} dk \exp[i(k - k_0)(x - \omega'_0 t)] = A \frac{\sin \xi}{\xi}, \quad ,$$

где

$$\xi = \frac{\delta}{2} (x - \omega'_0 t), \quad \omega'_0 = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0}.$$

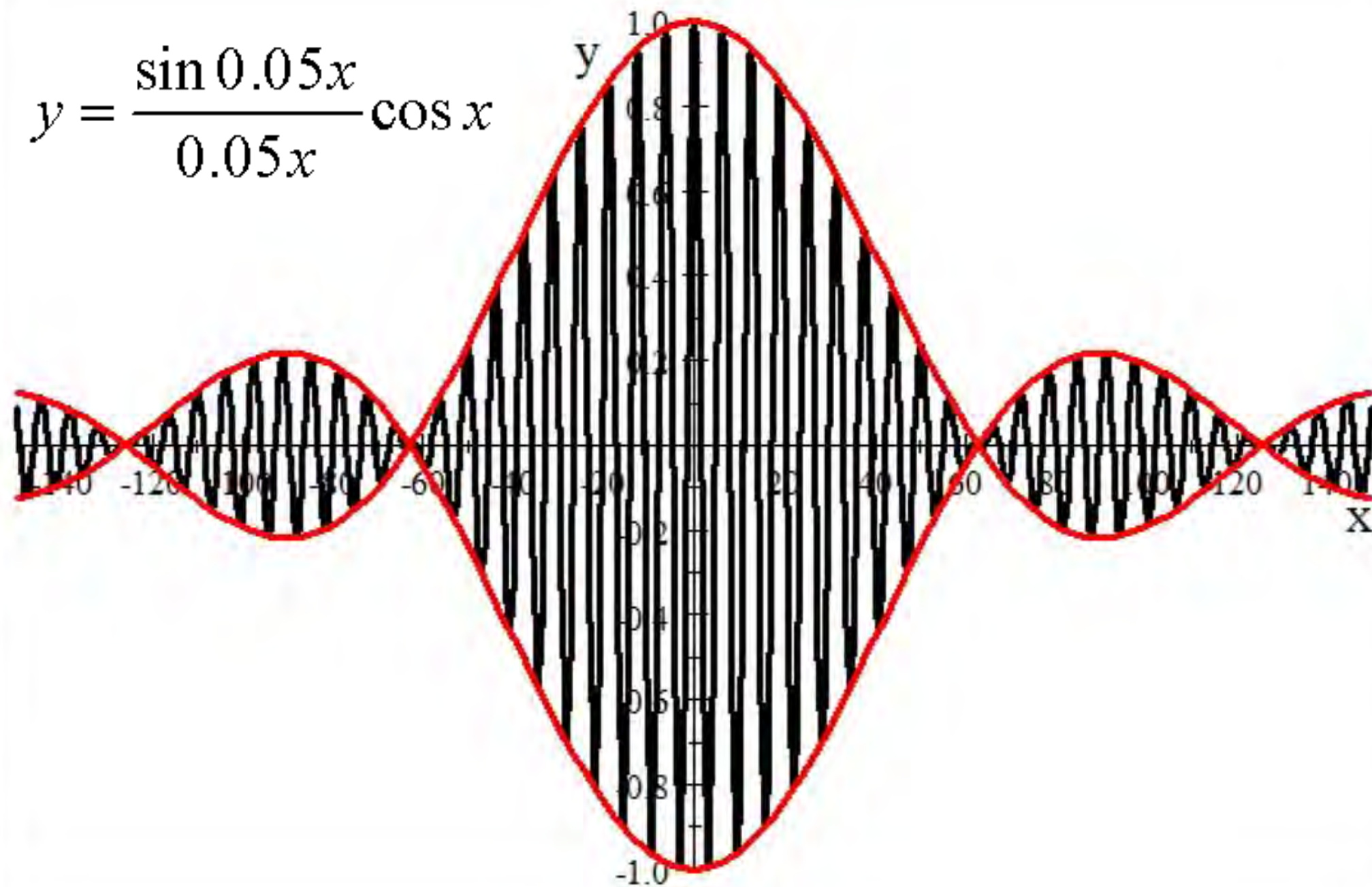
При

$$\omega'_0 \delta \equiv \Delta\omega \ll \omega_0$$

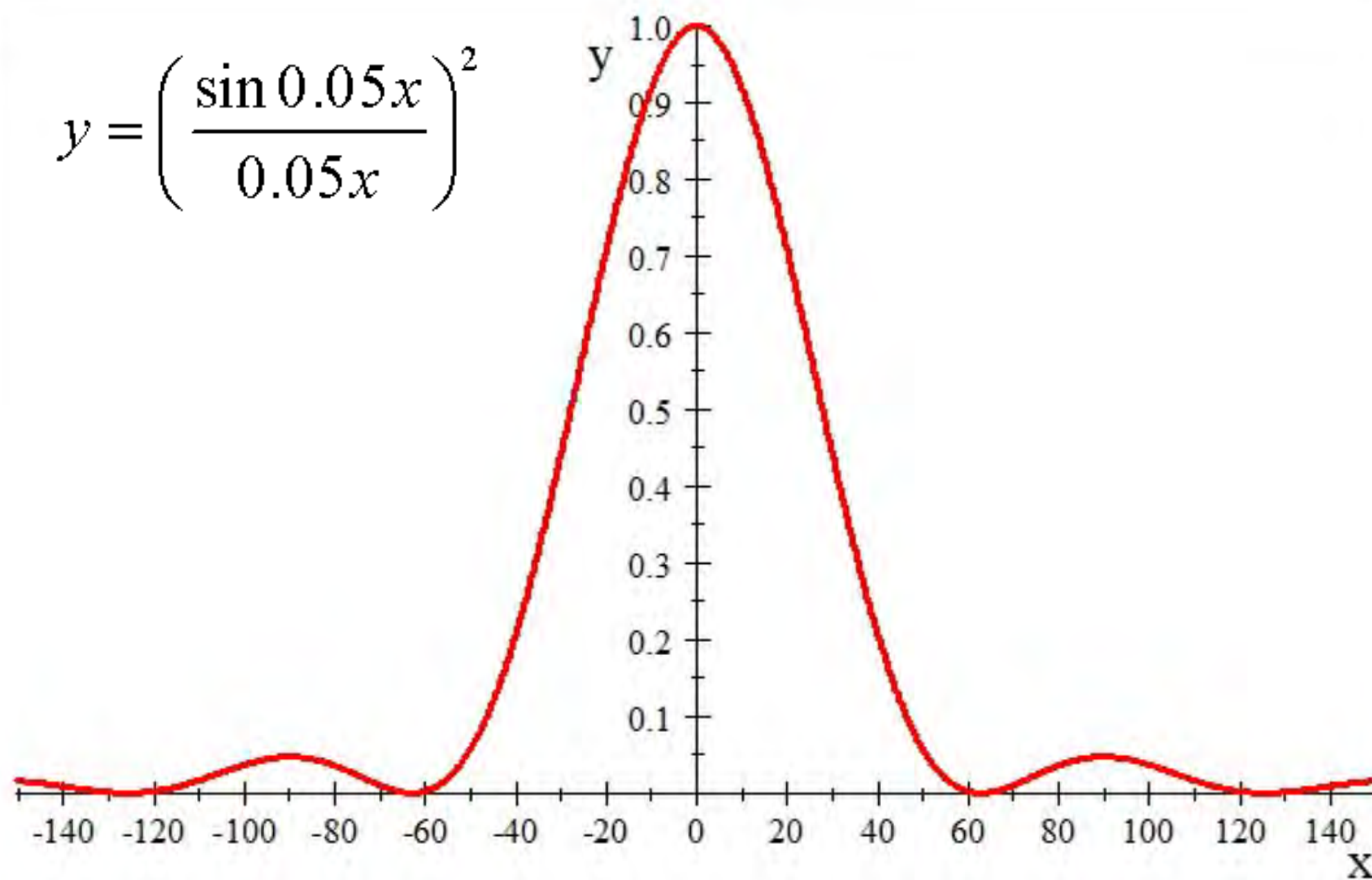
пакет представляет собой *амплитудно-модулированную* волну — это почти монохроматическая волна, амплитуда которой заметно изменяется на сравнительно больших временном и пространственном интервалах:

$$\Delta t \gtrsim 1 / \Delta\omega \gg 1 / \omega_0, \quad \Delta x \gtrsim 1 / \delta \gg 1 / k_0 .$$

$$y = \frac{\sin 0.05x}{0.05x} \cos x$$



$$y = \left(\frac{\sin 0.05x}{0.05x} \right)^2$$



В рассматриваемом случае амплитуда $B(t, x)$ имеет максимум, равный A , в точке $x = \omega'_0 t$. Следовательно, максимум (центр пакета) движется равномерно со скоростью

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0},$$

которая называется *групповой скоростью* (пакет \equiv группа волн). Пакет $\psi(t, x)$ сосредоточен в окрестности максимума амплитуды B и имеет указанные выше размеры Δx и Δt в пространстве и во времени. Его фурье-образ $\tilde{\psi}(\omega, k)$ имеет соответственно размеры $\Delta k \equiv \delta$ и $\Delta \omega$, причем выполнены соотношения

$$\Delta k \cdot \Delta x \gtrsim 1, \quad \Delta \omega \cdot \Delta t \gtrsim 1,$$

которые, конечно, известны в теории преобразования Фурье.

До сих пор мы не учитывали высшие члены разложения $\omega(k)$.
Учет слагаемого $\sim \omega_0''(k - k_0)^2 t$ в аргументе экспоненты в интегральном представлении пакета $\psi(t, x)$ приводит, очевидно, к *расплыванию* пакета, т.е. его уширению. Определим характерное *время расплывания* пакета t_d из условия

$$\omega_0''(\Delta k)^2 t_d \sim 1,$$

отсюда с учетом связи $\Delta k \sim 1/\Delta x$ находим

$$t_d \sim \frac{(\Delta x)^2}{\left(\frac{d^2 \omega}{dk^2} \right)_{k_0}}.$$

Описанные выше свойства волнового пакета не зависят от природы волны. *Волновая функция* свободной частицы в виде пакета описывает суперпозицию состояний частицы с различными значениями импульса и энергии:

$$p = \hbar k, \quad E = \hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Такая суперпозиция не имеет прямого аналога в классической механике. Тем не менее, косвенная связь с классикой есть: центр пакета движется равномерно с групповой скоростью

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} ,$$

что отвечает соотношению $v = p / m$ для *классической* частицы, движущейся со скоростью $v = v_g$.

Попытка представить квантовую частицу в виде некоторого материального волнового сгустка (пакета) не выдерживает критики, в частности, ввиду расплывания пакета. Действительно, время расплывания пакета начальной ширины a для нерелятивистской частицы ($E = p^2 / 2m$) равно

$$t_d \sim \frac{a^2}{\hbar \left(d^2 E / dp^2 \right)} = \frac{ma^2}{\hbar}.$$

Положим $a = 10^{-8}$ см (типичный размер атома, см. п. 10) и $m = 9,1 \cdot 10^{-28}$ г (масса электрона). Тогда время расплывания

$$t_d \sim \frac{10^{-27} \text{ г} \cdot 10^{-16} \text{ см}^2}{10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}} = 10^{-16} \text{ с}.$$

Следовательно, с макроскопической точки зрения пакет расплывается мгновенно. За время t_d ширина пакета возрастает по определению на величину порядка a . Следовательно, *скорость расплывания*

$$v_d \sim \frac{a}{t_d} \sim \frac{\hbar}{ma}.$$

В нашем примере за время $t = 1$ с ширина первоначально микроскопического пакета достигнет величины

$$\frac{\hbar t}{ma} \sim \frac{10^{-27} \cdot 1}{10^{-27} \cdot 10^{-8}} = 10^8 \text{ см} = 10^3 \text{ км!}$$

С другой стороны, для макроскопической частицы массы $m = 1$ г положим $a = 1$ см. Тогда время расплывания

$$t_d \sim \frac{1 \cdot 1}{10^{-27}} = 10^{27} \text{ с},$$

что гораздо больше *времени жизни Вселенной*

$$t_U \cong 1,5 \cdot 10^{10} \text{ лет} \sim 10^{17} \text{ с}.$$

Иначе говоря, за 1 с пакет расширится на ничтожную величину

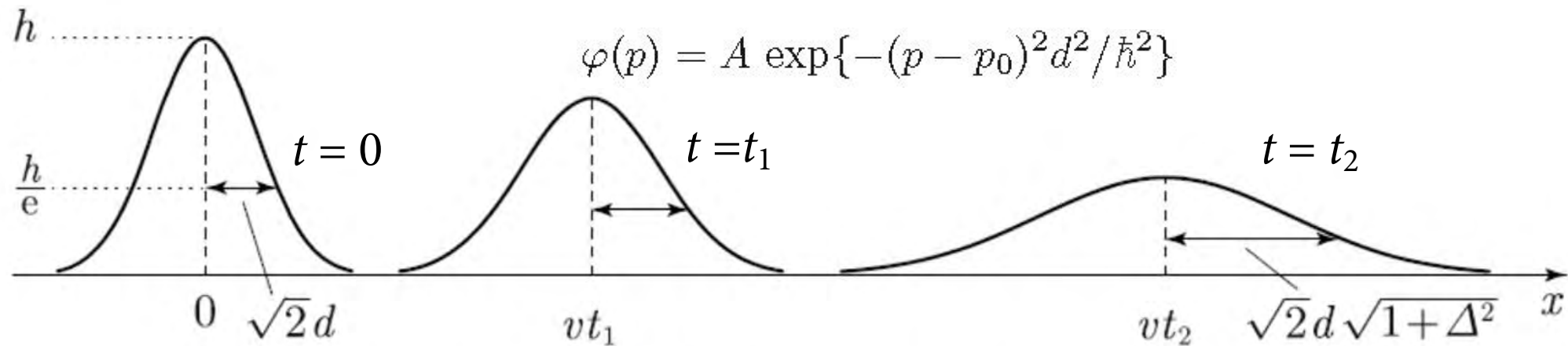
$$\frac{10^{-27} \cdot 1}{1 \cdot 1} = 10^{-27} \text{ см.}$$

Следовательно, для макроскопической частицы распылением пакета можно пренебречь. С высокой степенью точности движение центра макроскопически малого пакета подчиняется законам классической механики (см. п. 5).

Для микрочастицы в общем случае необходимо использовать уравнение Шрёдингера для волновой функции, которой, как мы убедились, нельзя придать непосредственно *прямой* физический смысл.

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{2\pi(1 + \Delta^2)}} \exp\left\{-\frac{(x - vt)^2}{2d^2(1 + \Delta^2)}\right\}$$

$$v = \frac{p_0}{m} \text{ and } \Delta \equiv \Delta(t) = \frac{t\hbar}{2md^2}$$



Motion and spreading of a Gaussian wave packet. The “width” of the probability density grows with time

2.2. Вероятностная интерпретация волновой функции

Представление об электро́не в виде группы волн находится в явном противоречии с экспериментами по столкновению электронов с атомами, в которых электрон ведет себя как единая стабильная частица. В экспериментах по дифракции пучка электронов на кристаллах проявляются волновые свойства электронов, причем аналогия с дифракцией электромагнитных волн, рассматриваемых как поток фотонов, приводит к *статистическому* предположению: интенсивность волны в данной точке пространства пропорциональна плотности частиц. Оказывается, однако, что дифракционная картина не зависит от интенсивности пучка частиц: она возникает и при очень малой интенсивности и даже при пропускании *одиночных* электронов

один за другим. При регистрации дифракционной картины каждый электрон, прошедший периодическую структуру (например, монокристалл), оставляет на фотопластинке небольшое пятно, проявляя тем самым корпускулярные свойства. При достаточно большом числе прошедших последовательно электронов распределение пятен на пластинке образует дифракционную картину, совпадающую с получаемой при пропускании пучка электронов.

Детальный анализ процессов рассеяния электронов на атомах на основе уравнения Шрёдингера привел Борна (М. Born) к *вероятностной* интерпретации волновой функции частицы (1926 г.): *квадрат модуля $|\psi(t, \mathbf{r})|^2$ есть плотность вероятности обнаружить частицу в точке пространства \mathbf{r} в момент времени t .* Таким образом, квантовая механика (*даже для одной частицы*) является вероятностной

теорией, в которой *принцип причинности* отличается от соответствующего лапласовского принципа причинности в классической механике. В своей статье 1926 г. Борн так сформулировал основную особенность квантовой теории: «*Движение частицы следует вероятностным законам, сама же вероятность распространяется в соответствии с законом причинности*».

Указанная вероятностная интерпретация волновой функции — один из основных постулатов квантовой теории, который подтвержден всей совокупностью проведенных экспериментов.

Покажем, что из УШ вытекает закон сохранения вероятности. Запишем уравнения для ψ и комплексно сопряженной к ней функции ψ^* :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi,$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + U\psi^*.$$

Умножив первое уравнение на ψ^* , а второе на ψ , вычтем одно из другого. Получим

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) = -\frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \nabla^2 \psi - (\nabla^2 \psi^*) \psi \right) = -\frac{\hbar}{2mi} \nabla \left(\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi \right).$$

Введем плотность ρ и поток вероятности \mathbf{j} :

$$\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2 ,$$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi \right) .$$

В результате находим *уравнение непрерывности* (ср. с электродинамикой, ч. 1 курса):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 .$$

Проинтегрировав его по объему V , ограниченному замкнутой поверхностью Σ , получим интегральный закон сохранения вероятности:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho d^3x = - \oint_{\Sigma} (\mathbf{j} \cdot \mathbf{n}) d\Sigma .$$

Удалив Σ в бесконечность, в предположении, что

$$\mathbf{j} \Big|_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} \rightarrow 0 ,$$

получим

$$\frac{d}{dt} \int \rho d^3x = 0 ,$$

или

$$\int |\psi|^2 d^3x = \text{const} .$$

Для *физически реализуемых* состояний всегда можно выбрать такую нормировку волновой функции, что

$$\int |\psi|^2 d^3x = 1 .$$

Это соотношение означает, что вероятность обнаружить частицу во всем пространстве равна единице, как и должно быть.

Замечание. Плотность ρ и поток вероятности \mathbf{j} инвариантны относительно преобразования фазы волновой функции:

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\alpha} \psi, \quad \psi^* \rightarrow \psi'^* = e^{-i\alpha} \psi^*.$$

Функции ψ и ψ' отвечают *одному и тому* же состоянию.

Положим $\psi = \sqrt{\rho} e^{i\theta}$. Тогда поток вероятности

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} \rho \nabla \theta.$$

Для частицы с энергией E и импульсом \mathbf{p} имеем:

$$\psi = A \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \right], \quad \mathbf{j} = |A|^2 \frac{\mathbf{p}}{m} = \rho \mathbf{v}.$$

3. НАБЛЮДАЕМЫЕ И ОПЕРАТОРЫ

3.1. Средние значения координаты и импульса. Наблюдаемые

Зная плотность вероятности координаты частицы, можно найти среднее значение координаты – математическое ожидание:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} |\psi|^2 d^3x.$$

Как найти среднее значение импульса $\langle \mathbf{p} \rangle$? Рассмотрим волновой пакет:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad C(\mathbf{k}) = \int \frac{d^3x}{(2\pi)^{3/2}} \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}.$$

Здесь время t фиксировано и явно не указано в качестве одного из аргументов волновой функции. Преобразуем условие ее нормировки:

$$\int \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3x = 1 = \int \frac{d^3k d^3k'}{(2\pi)^3} C^*(\mathbf{k}) C(\mathbf{k}') \int d^3x e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} =$$

$$= \int d^3k C^*(\mathbf{k}) C(\mathbf{k}),$$

где использовано известное соотношение:

$$\int d^3x e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}).$$

Естественно, следуя Борну, интерпретировать $|C(\mathbf{k})|^2$ как плотность вероятности обнаружить при измерении импульс частицы $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$.

Фурье-образ $c(\mathbf{k})$ функции $\psi(\mathbf{r})$ называется *волновой функцией в импульсном представлении*. Ясно, что тогда среднее значение импульса

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3k \hbar\mathbf{k} |C(\mathbf{k})|^2 = \int d^3k \int \frac{d^3x'}{(2\pi)^{3/2}} \psi^*(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} \int \frac{d^3x}{(2\pi)^{3/2}} \psi(\mathbf{r}) i\hbar (\nabla e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}).$$

Проинтегрировав в последнем интеграле по частям в предположении, что $\psi \Big|_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} \rightarrow 0$, получим с учетом

$$\int d^3 k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})$$

выражение для среднего импульса в *координатном* представлении:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3 x \psi^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla \psi(\mathbf{r})).$$

Итак, в пространстве волновых функций импульсу соответствует дифференциальный оператор:

$$\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla .$$

Координате отвечает оператор умножения:

$$\mathbf{r} \rightarrow \hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}, \quad \langle \mathbf{r} \rangle = \int d^3 x \psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) .$$

Заметим, что в пространстве волновых функций в *импульсном* представлении $C(\mathbf{p})$ имеем:

$$\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad \hat{\mathbf{r}} = i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} .$$

Поэтому, в частности, средняя координата

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int d^3 p C^*(\mathbf{p}) i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} C(\mathbf{p}).$$

Полученные результаты обобщаются следующим образом: каждой физической величине A , значение которой может быть в принципе измерено, *наблюдаемой*, однозначно соответствует *линейный оператор* \hat{A} в пространстве волновых функций.

Фундаментальный оператор Гамильтона — гамильтониан, определяющий эволюцию волновой функции, выражается через операторы координаты и импульса:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{r}}) .$$

Среднее значение наблюдаемой вычисляется по правилу:

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d^3x .$$

В дальнейшем будем использовать обозначения из *функционального анализа*, предполагая, что множество волновых функций — *линейное* пространство. Скалярное произведение:

$$(\psi, \phi) = \int \psi^* \phi d^3x, \quad (c\psi, \phi) = c^* (\phi, \psi)^*, \quad c = \text{const}.$$

Норма $\|\psi\|$ вектора ψ определена в виде

$$\|\psi\|^2 = (\psi, \psi) \geq 0,$$

причем $\|\psi\| = 0$ тогда и только тогда, когда $\psi = 0$.

Оператору \hat{A} ставится в соответствие *эрмитово сопряженный* оператор \hat{A}^+ согласно определению:

$$(\psi, \hat{A}\phi) = (\hat{A}^+\psi, \phi).$$

Пусть \hat{A} – оператор наблюдаемой A . Ее среднее значение должно быть действительным числом. Поэтому

$$\langle A \rangle = (\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^+\psi, \psi) = \langle A \rangle^* = (\hat{A}\psi, \psi).$$

Следовательно, оператор наблюдаемой должен быть *эрмитовым*: $\hat{A}^+ = \hat{A}$. Легко проверить, что уже введенные операторы координаты и импульса эрмитовы в пространстве квадратично интегрируемых функций $L^2(R^3)$.

3.2. Принцип суперпозиции

Линейность уравнения Шрёдингера и операторов наблюдаемых обеспечивает выполнение фундаментального *принципа суперпозиции*, согласно которому:

1. Если квантовая система может находиться в состояниях, описываемых волновыми функциями ψ_1 и ψ_2 , то она может также находиться и в состоянии

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2,$$

где c_1, c_2 — *произвольные комплексные числа*.

2. Функции ψ и $c\psi$, где c — произвольное комплексное число, описывают одно и то же состояние.

Для физически реализуемых состояний $\|\psi\| < \infty$. Принцип суперпозиции всегда позволяет выбрать для таких состояний *условие нормировки* $\|\psi\| = 1$. Рассмотрим состояние $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, представляющее собой *суперпозицию* состояний ψ_1 и ψ_2 . Для

плотности вероятности, квадрата нормы и среднего значения наблюдаемой A в этом состоянии получаем соответственно выражения:

$$|\psi|^2 = |c_1|^2 |\psi_1|^2 + |c_2|^2 |\psi_2|^2 + 2\operatorname{Re} c_1^* c_2 \psi_1^* \psi_2,$$

$$(\psi, \psi) = 1 = |c_1|^2 + |c_2|^2 + 2\operatorname{Re} c_1^* c_2 (\psi_1, \psi_2),$$

$$\langle A \rangle = (\psi, \hat{A}\psi) = |c_1|^2 (\psi_1, \hat{A}\psi_1) + |c_2|^2 (\psi_2, \hat{A}\psi_2) + 2\operatorname{Re} c_1^* c_2 (\psi_1, \hat{A}\psi_2).$$

Отсюда видно, что квантовая механика не сводится к классической теории вероятности: возникает характерный эффект *интерференции состояний* ψ_1 и ψ_2 , не имеющий классического аналога.

3.3. Условия одновременной измеримости наблюдаемых

Как мы уже видели, предсказания квантовой теории носят вероятностный характер. Выясним, когда измерение наблюдаемой A дает определенный результат. Рассмотрим отклонение от среднего

$\Delta A = A - \langle A \rangle$. Ему отвечает наблюдаемая $\hat{a} = \hat{A} - \langle A \rangle \hat{I}$, где \hat{I} — единичный оператор (в дальнейшем его будем опускать). Дисперсия случайной переменной A в состоянии ψ равна

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = (\psi, \hat{a}^2 \psi) = (\hat{a} \psi, \hat{a} \psi) \geq 0 .$$

Она обращается в нуль только при $\hat{a} \psi = 0$, или

$$\hat{A} \psi = \langle A \rangle \psi .$$

Следовательно, в указанном состоянии наблюдаемая имеет определенное значение, которое совпадает с одним из собственных значений оператора наблюдаемой. Само состояние описывается волновой функцией, представляющей собой *собственный вектор* оператора.

В дальнейшем для краткости, если это не приведет к недоразумению, мы будем отождествлять понятия состояния и соответствующей ему волновой функции (используется также термин *вектор состояния*), наблюдаемой и оператора наблюдаемой.

Пусть наблюдаемая \hat{A} имеет дискретный спектр:

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n, \quad n = 1, 2, 3 \dots,$$

причем система собственных функций $\{\psi_n\}$ полна и ортонормирована, т.е. образует базис в пространстве состояний:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n, \quad (\psi_{n'}, \psi_n) = \delta_{n'n}, \quad c_n = (\psi_n, \psi).$$

Здесь ψ – произвольный вектор с единичной нормой. Имеем следующие соотношения:

$$(\psi, \psi) = 1 = \sum_n |c_n|^2,$$

$$\langle A \rangle = (\psi, \hat{A}\psi) = \left(\sum_n c_n \psi_n, \hat{A} \sum_{n'} c_{n'} \psi_{n'} \right) = \sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} (\psi_n, \hat{A}\psi_{n'}) = \sum_n |c_n|^2 A_n.$$

Отсюда следует, что

$$w_n = |c_n|^2 = |(\psi_n, \psi)|^2$$

есть вероятность получить значение A_n наблюдаемой A при измерении в состоянии ψ , причем значений $A \neq A_n$ на опыте обнаружить нельзя.

Если наблюдаемая \hat{A} имеет непрерывный спектр $\{\lambda\}$, то

$$\psi = \int c_\lambda \psi_\lambda d\lambda, \quad c_\lambda = (\psi_\lambda, \psi).$$

Тогда

$$w(\lambda) = |c_\lambda|^2$$

– плотность вероятности, т. е. $w(\lambda)d\lambda$ – вероятность обнаружить значение A в интервале $(\lambda, \lambda + d\lambda)$. При этом

$$\int w(\lambda) d\lambda = (\psi, \psi) = 1.$$

Условие ортонормированности заменяется условием нормировки на δ -функцию:

$$(\psi_{\lambda'}, \psi_\lambda) = \delta(\lambda' - \lambda).$$

Пример. Собственные векторы оператора импульса $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ имеют вид

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right), \quad (\psi_{\mathbf{p}'}, \psi_{\mathbf{p}}) = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}).$$

Для оператора координаты $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ имеем

$$\psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0).$$

В общем случае смешанного спектра получаем

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n + \int d\lambda c_\lambda \psi_\lambda,$$

$$(\psi, \psi) = \sum_n |c_n|^2 + \int d\lambda |c_\lambda|^2 = 1.$$

Условие полноты системы собственных функций имеет вид:

$$\sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') + \int d\lambda \psi_\lambda(\mathbf{r}) \psi_\lambda^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Рассмотрим условия, при которых две наблюдаемых A и B могут быть *одновременно измерены*. Пусть в некотором состоянии они

имеют определенные значения. Тогда, как мы уже знаем, вектор состояния должен быть собственным для операторов \hat{A} и \hat{B} :

$$\hat{A}\psi_{nm} = A_n\psi_{nm}, \quad \hat{B}\psi_{nm} = B_m\psi_{nm}.$$

Предположим, что $\{\psi_{nm}\}$ образуют *полную систему* собственных векторов. Тогда для произвольного вектора состояния

$$\psi = \sum_{nm} c_{nm} \psi_{nm}$$

имеем

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi = \sum_{nm} c_{nm} (A_n B_m - B_m A_n) \psi_{nm} = 0.$$

Ввиду произвольности ψ получаем операторное равенство

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0,$$

т.е. наблюдаемые должны *коммутировать*.

Это утверждение обобщается на случай произвольного (смешанного) спектра и представляет собой известную теорему из функционального анализа: *если два оператора имеют общую полную*

систему собственных векторов, то они коммутируют. Справедлива и обратная теорема: если $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, то операторы \hat{A} и \hat{B} имеют общую систему собственных функций.

Определим *полный набор коммутирующих наблюдаемых* $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n$:

- 1) операторы \hat{A}_i попарно коммутируют, $[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = 0$; $i, j = \overline{1, n}$;
- 2) ни один из операторов \hat{A}_i не является функцией от остальных;
- 3) любой оператор, коммутирующий со всеми \hat{A}_i , есть функция от этих операторов.

Из изложенного выше следует, что существует общая полная система собственных векторов полного набора наблюдаемых:

$$\hat{A}_i \psi_{\lambda_1 \dots \lambda_n} = \lambda_i \psi_{\lambda_1 \dots \lambda_n}, \quad i = \overline{1, n}.$$

Поэтому произвольный вектор состояния может быть представлен в виде

$$\psi = \sum_{\lambda_1, \dots, \lambda_n} c_{\lambda_1 \dots \lambda_n} \psi_{\lambda_1 \dots \lambda_n},$$

причем $|c_{\lambda_1 \dots \lambda_n}|^2$ есть вероятность получить в результате одновременного измерения наблюдаемых A_1, \dots, A_n значения $\lambda_1, \dots, \lambda_n$.

Таким образом, состояние системы в квантовой механике можно задать полным набором значений наблюдаемых. Их число называется *числом степеней свободы системы*. В общем случае оно определяется из опыта. В частных случаях это число совпадает с числом степеней свободы соответствующей классической системы.

Полный набор наблюдаемых может быть задан многими способами. Его фиксация определяет некоторое *представление* пространства состояний квантовой системы функциями

$$\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \equiv c_{\lambda_1 \dots \lambda_n} = (\psi_{\lambda_1 \dots \lambda_n}, \psi),$$

определенными на спектре операторов $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n$. Функция $\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ называется *волновой функцией системы в данном представлении*.

Пример. Для точечной (бесструктурной) частицы полный набор наблюдаемых образуют операторы координат $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$. Ему отвечает *координатное представление* волновых функций:

$$\psi(x, y, z) = \int \psi(x_0, y_0, z_0) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) dx_0 dy_0 dz_0.$$

Другой полный набор составляют операторы компонент импульса $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$:

$$\psi(x, y, z) = \int \psi(p_x, p_y, p_z) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_x x + p_y y + p_z z) \right] \frac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi \hbar)^{3/2}},$$

где $\psi(p_x, p_y, p_z)$ – волновая функция в *импульсном представлении* (выше она обозначалась $C(\mathbf{p})$).

Замечание. Справедливо утверждение: все операторы полного набора наблюдаемых $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n$ являются различными функциями одного эрмитова оператора \hat{R} : $\hat{A}_i = f_i(\hat{R})$. Соответствующая теорема была строго доказана Дж. фон Нейманом (1931). Ниже приведен иллюстрирующий пример из книги: И. фон Нейман. Математические основы квантовой механики (Наука, 1964).

И. фон Нейман. Математические основы квантовой механики (Наука, 1964). -- С. 135.

Пусть \mathfrak{H}_∞ — пространство всех $f(q_1, q_2)$ с конечным $\int \int |f(q_1, q_2)|^2 dq_1 dq_2$, определенных в квадрате $0 \leq q_1, q_2 \leq 1$. Образующие операторы $A = q_1 \dots$, $B = q_2 \dots$. Они эрмитовы, в рассматриваемой области определения на плоскости q_1, q_2 также и непрерывны (при $-\infty < q_1, q_2 < +\infty$ — нет!), далее, они коммутируют. Следовательно, они оба должны быть функциями одного R . При этом последний должен коммутировать с A и B , откуда, на доказательстве чего мы не будем здесь останавливаться, следует, что R должен иметь вид $s(q_1, q_2) \dots$ [$s(q_1, q_2)$ — ограниченная функция]. Но тогда R^n ($n = 0, 1, 2, \dots$) должен равняться $(s(q_1, q_2))^n \dots$, и $F(R)$ равняться $F(s(q_1, q_2)) \dots$, если $F(x)$ — полином. Последнюю формулу можно, однако, во что мы также не можем глубже вникать здесь, распространить на все $F(x)$. Итак, из $F(R) = A$, $G(R) = B$ следует, что

$$F(s(q_1, q_2)) = q_1, \quad G(s(q_1, q_2)) = q_2^{(111)}.$$

Это значит, что взаимно обратные отображения $s(q_1, q_2) = x$ и $F(x) = q_1$, $G(x) = q_2$ должны были бы одно-однозначно отображать поверхность квадрата $0 \leq q_1, q_2 \leq 1$ на линейное числовое множество переменной x — нечто, что противоречит геометрической интуиции.

Однако на основе упоминавшегося выше доказательства мы знаем, что это тем не менее должно быть возможным. И в самом деле, отображение желаемого рода действительно осуществляется посредством так называемой кривой Пеано⁽¹¹²⁾. Внимательное изучение приведенного в прим.¹⁰⁹⁾ доказательства действительно показывает, что оно приводит в рассматриваемом примере к кривой Пеано или родственным ей образованиям.

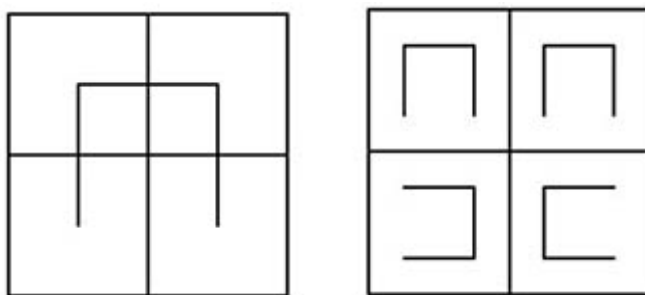
⁽¹¹¹⁾ На q_1, q_2 -множестве лебеговой меры 0 были бы допустимы исключения!

⁽¹¹²⁾ Ср., например, прим.⁴⁵⁾ на стр. 41.

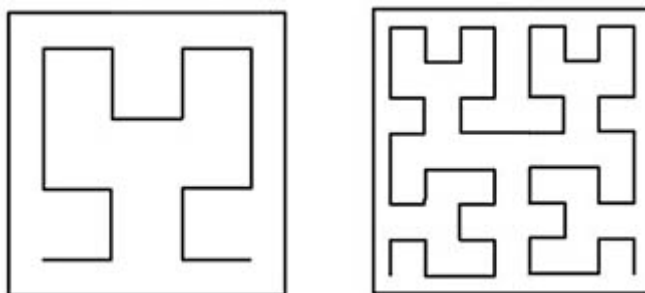
Кривая Пеано (G. Peano, 1890) проходит через все точки квадрата, полностью его заполняя, и имеет бесконечную длину.

Построение кривой Пеано

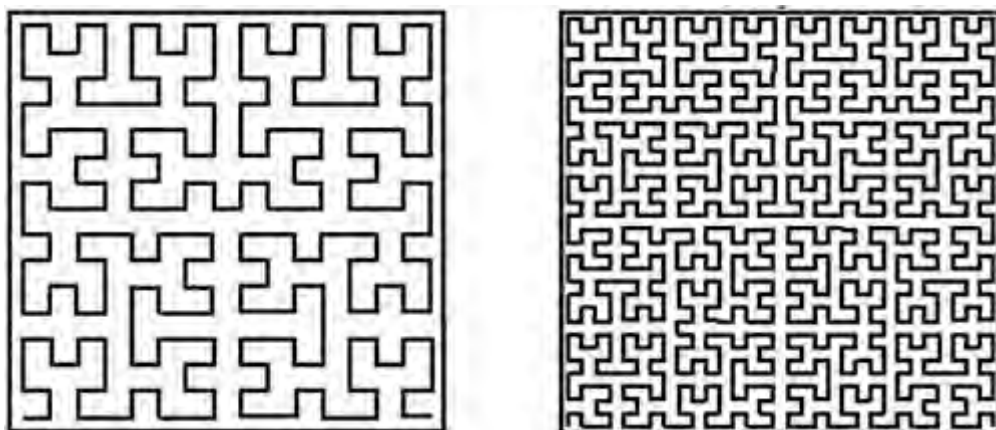
Для ее построения данный квадрат разбивают на четыре равных квадрата и соединяют их центры тремя отрезками. Уберем внутренние стороны квадратов и из четырех их копий составим фигуру:



Снова уберем внутренние стороны квадратов и соединим тремя отрезками концы ломаных:



Повторяя описанную процедуру, будем получать более сложные ломаные, приближающиеся к кривой Пеано.



Ломаные, участвующие в *построении кривой Пеано*, на каждом этапе проходят через все квадраты, а сами квадраты уменьшаются, стягиваясь к точкам исходного квадрата.

4. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА

4.1. Соотношение неопределенностей

Пусть две наблюдаемые \hat{A} и \hat{B} не коммутируют. Тогда их коммутатор имеет вид:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C},$$

где \hat{C} – эрмитов оператор. Покажем, что дисперсии наблюдаемых в произвольном состоянии ψ удовлетворяют ограничению

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle C \rangle^2.$$

Оно называется *соотношением неопределенностей* и получено впервые Гейзенбергом (W. Heisenberg) в 1927 г. для частного случая наблюдаемых \hat{x} и \hat{p}_x .

Его общее доказательство принадлежит Вейлю (H. Weyl). Введем наблюдаемые

$$\hat{a} = \hat{A} - \langle A \rangle, \quad \hat{b} = \hat{B} - \langle B \rangle, \quad [\hat{a}, \hat{b}] = i\hat{C},$$

и рассмотрим неотрицательную функцию действительного параметра λ :

$$\begin{aligned} F(\lambda) &= \left\| (\lambda \hat{a} - i\hat{b}) \psi \right\|^2 = \left((\lambda \hat{a} - i\hat{b}) \psi, (\lambda \hat{a} - i\hat{b}) \psi \right) = \\ &= \left(\psi, (\lambda \hat{a} + i\hat{b}) (\lambda \hat{a} - i\hat{b}) \psi \right) = \\ &= \left(\psi, (\lambda^2 \hat{a}^2 + \hat{b}^2 + \lambda \hat{C}) \psi \right) = \lambda^2 \langle a^2 \rangle + \lambda \langle C \rangle + \langle b^2 \rangle \geq 0. \end{aligned}$$

Ввиду произвольности λ дискриминант полученного квадратного трехчлена должен быть неположительным:

$$\langle C \rangle^2 - 4 \langle a^2 \rangle \langle b^2 \rangle \leq 0.$$

С учетом равенства $\langle a^2 \rangle = \langle (\Delta A)^2 \rangle$ получаем отсюда приведенное выше соотношение неопределенностей (CH).

Для коммутирующих наблюдаемых правая часть СН обращается в нуль, что соответствует, как мы видели выше (см. п. 3), одновременной измеримости таких наблюдаемых.

Для некоммутирующих наблюдаемых СН накладывает ограничение на точности, с которыми могут быть одновременно заданы (измерены) эти наблюдаемые. Наиболее сильное ограничение имеется в случае, когда $(\psi, [\hat{A}, \hat{B}] \psi) \neq 0$ для *любых* состояний ψ , например, если $[\hat{A}, \hat{B}] = ic\hat{I}$, где $c = \text{const}$. В этом случае не существует состояний, в которых обе наблюдаемые имеют определенные значения.

Пример. Пусть $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}_x$. Тогда

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\hat{I},$$

и мы получаем соотношение неопределенностей Гейзенберга:

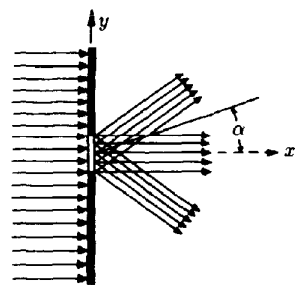
$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Качественно СН может быть получено из анализа эволюции волнового пакета (см. п. 2). Было показано, что эффективные размеры пакета в координатном и импульсном представлениях, т. е. неопределенности координаты и импульса частицы, связаны соотношением $\Delta x \cdot \Delta k \gtrsim 1$, или $\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim \hbar$, так как импульс $p_x = \hbar k$.

Детальный анализ показывает, что в случае некоммутирующих наблюдаемых \hat{A} и \hat{B} измерение одной из них приводит к неконтролируемому изменению другой наблюдаемой. Возмущение системы в процессе измерения конечно и таково, что всегда выполняются СН. Иными словами, для точного измерения таких наблюдаемых требуются несовместимые измерительные приборы.

Найдем состояния ψ , в которых достигается минимум неопределенностей, т. е. точное равенство в СН. Получаем для них систему уравнений (см. выше вывод СН):

Position Measurement with a Slit



Localization of a particle by a slit

We observe a de Broglie wave moving in the x direction through a slit perpendicular to it with a width $d = \Delta y$ (see Figure). The corresponding interference pattern is visible on a screen standing parallel to, and behind, the slit. Since the momentum in the y direction is given by $p_y = 0$, we would expect that once the particle has passed the slit, a simultaneous determination of its momentum and position in the y direction is possible. However, the diffraction of the wave at the slit causes an additional component of momentum in the y direction. As the diffraction is symmetric, we normally have $\bar{p}_y = 0$. At diffraction angle α , corresponding to the first diffraction minimum, the path a light beam travels is longer by $\lambda/2$ than a nondiffracted beam (see Figure below). Then the greatest intensity is to be expected between $-\alpha$ and $+\alpha$, and we make use of this angle as a measure of the momentum uncertainty. The relation for α reads:

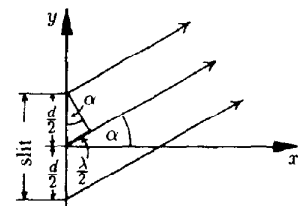
$$\lambda = d \sin \alpha \quad . \quad (1)$$

The projection of the momentum on the y axis is given by

$$p \sin \alpha = \Delta p_y = \frac{2\pi \hbar}{\lambda} \sin \alpha \quad .$$

Inserting $\sin \alpha = \lambda \Delta p_y / 2\hbar\pi$ in (1) yields

$$\lambda = d \frac{\lambda \Delta p_y}{2\hbar\pi} \quad .$$



The geometry of the diffraction at a slit. In the first diffraction minimum, a ray from the middle of the slit differs from a ray from the edges by $\lambda/2$

The uncertainty principle $\Delta p_y \Delta y = 2\pi \hbar$ follows from this, i.e. the more precisely the particle position d is determined, the less exact the determination of its momentum will be. In other words: the smaller the slit, the more the particle will be diffracted.

$$(\lambda \hat{a} - i\hat{b}) \psi = 0,$$

$$\lambda^2 \langle a^2 \rangle + \lambda \langle C \rangle + \langle b^2 \rangle = 0,$$

$$\langle a^2 \rangle \langle b^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle C \rangle^2.$$

Отсюда находим

$$\lambda = -\frac{\langle C \rangle}{2\langle a^2 \rangle},$$

и уравнение для определения *состояния, минимизирующего произведение неопределенностей*, принимает вид:

$$\left(\frac{\langle C \rangle}{2\langle a^2 \rangle} \hat{a} + i\hat{b} \right) \psi = 0.$$

Рассмотрим случай координаты и импульса:

$$\hat{a} = \hat{x} - x_0, \quad \hat{b} = \hat{p}_x - p_0, \quad \hat{C} = \hbar.$$

В координатном представлении $\hat{x} = x$, $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$, и получаем уравнение:

$$\left[\frac{d}{dx} + \frac{x - x_0}{2\sigma^2} - i \frac{p_0}{\hbar} \right] \psi(x) = 0.$$

Здесь $\sigma^2 = \langle (\Delta x)^2 \rangle$, $x_0 = \langle x \rangle$, $p_0 = \langle p_x \rangle$.

Нормированное решение имеет вид:

$$\psi(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar} p_0 x \right].$$

В этом состоянии

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}.$$

СН «координата-импульс» выражает отсутствие точной траектории у частицы. В частности, нельзя определить импульс в данной точке пространства (как в классической механике): импульс

характеризует состояние квантовой частицы в целом. Он может быть измерен, например, путем анализа дифракционной картины, образуемой при прохождении пучка частиц через периодическую структуру, с помощью дебройлевского соотношения между длиной волны и импульсом: $\lambda = 2\pi\hbar/p$.

4.2. Постулаты квантовой механики

Мы ввели основные понятия квантовой механики и можем теперь явно сформулировать, следуя Дж. фон Нейману (J. von Neumann), ее основные постулаты:

П1. Состояния системы описываются ненулевыми векторами ψ комплексного сепарабельного гильбертова пространства \mathcal{H} , причем векторы ψ и ψ' описывают одно и то же состояние тогда и только тогда, когда $\psi' = c\psi$, где c — произвольное комплексное число. Каждой наблюдаемой A однозначно сопоставляется линейный эрмитов (точнее, *самосопряженный*) оператор \hat{A} .

П2. Наблюдаемые одновременно измеримы тогда и только тогда, когда соответствующие им эрмитовы операторы коммутируют.

В результате измерения наблюдаемой, представляемой оператором \hat{A} , может быть получено лишь одно из собственных значений λ оператора \hat{A} . Вероятность w_n получить значение λ_n при измерении в состоянии ψ равна

$$w_n = |c_n|^2,$$

где c_n — коэффициент в разложении ψ по полной системе собственных функций ψ_n оператора \hat{A} :

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n, \quad c_n = (\psi_n, \psi).$$

П3. Эволюция системы определяется уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi,$$

где \hat{H} — гамильтониан.

П4. Каждому вектору $\psi \neq 0$ из пространства \mathcal{H} отвечает некоторое состояние системы, любой эрмитов оператор \hat{A} соответствует некоторой наблюдаемой.

Рассмотренный в п. 3 принцип суперпозиции, как легко проверить, следует из постулата **П4**.

Замечание 1. Выбор пространства \mathcal{H} и закона соответствия $A \rightarrow \hat{A}$ для конкретной физической системы определяется согласием предсказаний теории с результатами эксперимента. Этот выбор не может быть формализован: можно построить бесконечно много квантовых теорий, которые в пределе $\hbar \rightarrow 0$ переходят в одну и ту же классическую теорию.

Замечание 2. Существуют *правила суперотбора*, согласно которым пространство состояний \mathcal{H} разбивается в прямую сумму ортогональных подпространств, причем сумма векторов из разных подпространств не может соответствовать физически реализуемому

состоянию. Например, запрещена суперпозиция состояний с различными электрическими зарядами.