

Элементы квантовой механики (продолжение)

Постулаты квантовой механики

Изучая геометрию в школе, вы познакомились с понятием аксиомы. Это такое первичное понятие, которое ниоткуда не выводится, зато из системы аксиом можно путем доказательств вывести все остальные теоремы. Аксиома обычно хотя бы кажется очевидной. Постулат – это тоже аксиома, но, как правило, совсем не очевидное. Справедливость системы постулатов проверяется опытом по выводам, которые из нее следуют.

Здесь я приведу постулаты в несколько упрощенной форме: мы пока не будем рассматривать *вырождение* и состояния, волновые функции не поддаются нормировке в том виде, как это было сформулировано в предыдущей лекции.

Постулат о квантовых состояниях

С этим постулатом мы уже знакомы, но прежде чем сформулировать его в окончательном виде, я сформулирую требования, накладываемые на волновую функцию, и напомним некоторые математические понятия.

Примем следующие обозначения. Полную волновую функцию частицы, зависящую как от координат, так и от времени, будем обычно, как и раньше, записывать в виде $\Psi(\mathbf{r}, t)$ (на доске «пси заглавная с пьедесталом»). Если же речь идет о конкретном моменте времени или зависимость от времени нас не интересует (мы увидим, что часто она просто подразумевается, как в оптике, когда работают с комплексными амплитудами), то будем использовать маленькую букву и писать $\psi(\mathbf{r})$. Такая договоренность позволяет для краткости не писать явно аргумент, т.е. ψ заменяет $\psi(\mathbf{r})$.

По традиционно используемой букве координатную волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$ еще называют ψ -функцией (читается «пси-функция»)¹.

Волновая функция – комплекснозначная функция действительных аргументов.² В отличие от электромагнитной волны, волновая функция частицы не имеет непосредственного физического смысла, нет никакого наблюдаемого поля, описываемого ею.³

Итак, сформулируем условия, накладываемые ψ -функцию $\psi(x, y, z)$.

Условия, накладываемые на ψ -функцию

1. ψ -функции интегрируемы с квадратом. Это означает, что сходится интеграл⁴ $\iiint_{\text{Вселенная}} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$.

Обычно именно так формулируют это условие. На самом деле должны сходиться интегралы типа $\int_{-\infty}^{+\infty} r^n |\psi|^2 dV$, целое $n \geq 0$. Это означает, что, например, $|\psi(x)|^2$ должна убывать при $x \rightarrow \pm\infty$ быстрее, чем $1/|x|^n$.

В случае непрерывного спектра энергий (например, для свободной частицы) это условие заменяется требованием *ограниченности* ψ -функции.

2. ψ -функция должна быть однозначной. Это *физическое* требование мы обсудим в параграфе о квантово-механическом моменте импульса.
3. ψ -функция должна иметь непрерывные⁵ производные по переменным x, y и z . В областях гладкости потенциала должны существовать и вторые производные ψ -функции.

Функции, обладающие этими свойствами, образуют линейное (векторное) бесконечномерное пространство над полем комплексных чисел. Я не буду перечислять все аксиомы линейного пространства, но напомним, что, в частности, это означает следующее.

¹ Иногда ψ -функцией называют и полную волновую функцию, но такого смешения лучше избегать.

² Мы записывали электромагнитную волну в комплексной форме, но подчеркивали, что имеется в виду какое-либо действительное выражение (например, ее действительная часть). Волновая функция принципиально комплекснозначная.

³ Такие поиски проводились в течение десятилетий, но ни к чему не привели. Напомним, что физический смысл имеет $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$.

⁴ Интегрирование по Вселенной сводится, конечно, к интегрированию в бесконечных пределах.

⁵ Непрерывность производных может нарушаться только в точках, где потенциальная энергия терпит разрыв второго рода. Такое может случиться только в модельных задачах (см. «Бесконечно глубокая прямоугольная потенциальная яма»).

Если функции ψ_1 и ψ_2 принадлежат этому пространству, то ему принадлежит и любая их линейная комбинация

$$\psi = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2, \quad (1)$$

где α и β – любые комплексные числа.

В пространстве ψ -функций существуют *базисы*, т.е. такие последовательности функций $\{\psi_n\}$, что любую ψ -функцию можно разложить по этим базисам, т.е. представить в виде (вообще говоря, бесконечной) суммы ¹

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n. \quad (2)$$

Отдельные ψ -функции – векторы этого пространства, и для них можно ввести *скалярное произведение* (интегрирование ведется в бесконечных пределах)

$$(\psi_1, \psi_2) = \iiint \psi_1^*(x, y, z) \psi_2(x, y, z) dV. \quad (3)$$

С этой точки зрения скалярное произведение ψ -функции на себя есть «квадрат ее длины» (как для обычного вектора), а условие нормировки, о котором мы говорили на предыдущей лекции

$$\iiint_{\text{Вселенная}} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 1, \quad (4)$$

– приведение этой длины к единице. Это условие можно кратко записать так:

$$(\psi, \psi) = 1. \quad (4')$$

Обратите внимание, что в скалярном произведении (3) функции неравноправны: к той, что стоит слева, применяется операция комплексного сопряжения. Поэтому некоторые свойства такого скалярного произведения отличаются от привычных:

$$(\psi_2, \psi_1) = (\psi_1, \psi_2)^*, \quad (5)$$

$$(\alpha\psi_1, \beta\psi_2) = \alpha^* \beta (\psi_1, \psi_2). \quad (6)$$

Две ненулевые функции, скалярное произведение которых равно нулю, называются *ортogonalными*.

С помощью *процесса Грама – Шмидта* любой базис $\{\psi_n\}$ нашего пространства можно ортогонализировать, т.е. сделать так, чтобы $(\psi_m, \psi_n) = 0$ для любой пары функций, $m \neq n$. Затем каждую функцию можно нормировать (см. (4)). В результате получается *ортонормированный базис*, для которого

$$(\psi_m, \psi_n) = \delta_{m,n}. \quad (7)$$

Свойства скалярного произведения

Символ Кронекера

¹ Вспомните, например, разложение функций в ряд Фурье.

Мы ввели *символ Кронекера*

$$\delta_{m,n} = \begin{cases} 1, & \text{если } m = n, \\ 0, & \text{если } m \neq n. \end{cases} \quad (8)$$

Символ Кронекера – дискретный аналог δ -функции, о которой вы знаете из математики:

$$\sum_n c_n \delta_{m,n} = c_m \quad (9)$$

В дальнейшем, если специально не оговорено, все базисы будут считаться ортонормированными.

Коэффициенты разложения (2) ψ -функции по таким базисам находятся очень легко. В самом деле, умножим скалярно левую и правую части равенства (2) слева на ψ_m :

$$(\psi_m, \psi) = (\psi_m, \sum_n c_n \psi_n)$$

и преобразуем правую часть, пользуясь свойствами линейности скалярного произведения:

$$(\psi_m, \sum_n c_n \psi_n) = \sum_n c_n (\psi_m, \psi_n) = \sum_n c_n \delta_{m,n} = c_m,$$

так что

$$c_n = (\psi_n, \psi). \quad (10)$$

Выпишем этот результат в явной форме для одномерных задач (когда ψ -функция зависит только от одной координаты, например, x):

$$c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi(x) dx. \quad (11)$$

Теперь сформулируем первый постулат – постулат о квантовых состояниях.

*Состояние частицы **полностью** описывается ее волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Получающаяся в фиксированный момент времени ψ -функция удовлетворяет условиям, сформулированным [выше](#): ψ -функции, отличающиеся только произвольным комплексным множителем, описывают одно и то же состояние.*

Последнее утверждение позволяет выполнить нормировку (4), поскольку нормированная функция описывает то же самое состояние. Кстати, что вообще может происходить с векторами, например, обычного трехмерного пространства, в котором мы живем? Они могут изменять свою длину и вращаться. В пространстве волновых функций «изменение длины» ни на что не влияет, поэтому при изменении состояния векторы этого пространства «вращаются».

Коэффициенты разложения ψ -функции по базису

Постулат о квантовых состояниях

Постулат о физических величинах

В пространстве ψ -функций, как и в любом линейном векторном пространстве, не живут, но могут работать *линейные операторы*. Линейный оператор должен быть определен для любой ψ -функции и преобразовывать ее, вообще говоря, в другую функцию этого пространства. Например, оператор дифференцирования преобразует любую функцию в ее производную. Операторы мы будем обозначать буквами с «домиком» над ними, например \hat{A} . Напомню, что линейность оператора означает справедливость равенства

$$\hat{A}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha\hat{A}\psi_1 + \beta\hat{A}\psi_2,$$

(где α и β – произвольные *комплексные* числа) для любых функций ψ_1 и ψ_2 нашего пространства.

Линейность
оператора

Сумма операторов $\hat{A} + \hat{B}$ есть оператор такой, что

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi,$$

а действие произведения операторов $\hat{A}\hat{B}$ определяется так

$$(\hat{A}\hat{B})\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi),$$

т.е. сначала безобразничает второй оператор, а к тому, что осталось, прикладывает руку первый оператор.

Вообще говоря, операторы в произведении *не коммутируют* (не перестановочны):

$$\hat{A}\hat{B}\psi \neq \hat{B}\hat{A}\psi \text{ или просто}^1$$

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}.$$

Это очень важное (и неприятное) свойство операторов и сделало их основным математическим инструментом квантовой механики.

Оператор

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{12}$$

Коммутатор

называется *коммутатором* операторов \hat{A} и \hat{B} . Если $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, то операторы *коммутируют* (перестановочны).

¹ Когда пишут какое-либо операторное равенство, то это означает, что оно верно при действии на любой вектор пространства. Например, если $\hat{A} = \hat{B}$, то $\hat{A}\psi = \hat{B}\psi$ для любой функции ψ . Для справедливости *отсутствия* равенства (\neq) достаточно, чтобы равенство не выполнялось хотя бы на одной функции.

Рассмотрим в качестве примера два оператора (обозначения, как мы вот-вот увидим, не случайны). Действие оператора \hat{x} сводится к умножению функции на x :

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad (13)$$

а оператор \hat{p}_x дифференцирует функцию и дополнительно умножает ее на константу:

$$\hat{p}_x\psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x). \quad (14)$$

Вычислим коммутатор этих операторов.

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi(x) = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(x)) = -\frac{\hbar}{i} \psi(x),$$

так что

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \quad (15)$$

Если из $\psi_1 \neq \psi_2$ следует $\hat{A}\psi_1 \neq \hat{A}\psi_2$, то можно ввести обратный оператор \hat{A}^{-1} :

$$\text{Если } \psi_2 = \hat{A}\psi_1, \text{ то } \psi_1 = \hat{A}^{-1}\psi_2.$$

Оператор можно возвести в целую степень

$$\hat{A}^n = \underbrace{A \dots A}_{n \text{ раз}}. \quad (16)$$

Вообще существуют различные способы определить функции от операторов. Например, если функциональный ряд

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n \psi(x)}{n!}$$

сходится для любой функции $\psi(x)$ из рассматриваемого пространства, то можно положить

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}.$$

Такая операторная экспонента обладает необычными свойствами. Например, если операторы \hat{A} и \hat{B} не коммутируют, $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, то $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} \neq e^{\hat{A}+\hat{B}}$.

Сейчас мы переходим к очень важным понятиям – собственным функциям и собственным значениям операторов.

Изучая электрические, оптические и многие другие явления, мы часто прибегаем к одному и тому же приему. Пусть требуется определить сигнал на выходе какого-либо устройства, если известен входной сигнал. Решение разбивается на три этапа. Сначала мы выясняем, что происходит с синусоидальным входным сигналом, т.е. определяем, как изменяются его амплитуда и фаза. Затем раскладываем входной сигнал по тригонометрическим функциям (в ряд или интеграл Фурье). Зная, как изменились тригонометрические компоненты на выходе, суммируем их, чтобы получить выходной сигнал.

Коммутатор координаты и импульса

Отступление. Можно не читать, как и вообще все дальнейшее мелким шрифтом. Однако для понимания...

Здесь возникают некоторые вопросы. Во-первых, почему именно тригонометрические функции (гармонические сигналы) выбираются из великого множества других? Во-вторых, всегда ли их нужно выбирать в качестве опорных (т.е. по которым ведется разложение)? И, наконец, всегда ли вообще так можно делать? Ответить будем в обратном порядке.

Делать так можно только в том случае, когда преобразование сигнала устройством линейно (сумме входных сигналов соответствует сумма сигналов на выходе, увеличение выходного сигнала пропорционально увеличению сигнала на входе). Иначе говоря, такой метод применим, если оператор, описывающий преобразование сигнала, определен на линейном пространстве входных и выходных сигналов и является линейным.

В качестве опорных выбирать нужно «любимые» функции преобразующей системы, т.е. такие, которые ею практически не изменяются. Ясно, что для реализации разложения и сложения, нужно выбрать систему функций, по которой можно разложить любой из используемых сигналов, т.е. эта система должна быть базисом пространства сигналов. Так вот каждая из функций этого базиса должна оставаться самой собой после прохождения системы, умножаясь лишь на число (возможно, комплексное). «Любимые» функции устройства – это *собственные векторы* описывающего его оператора, о которых сейчас и пойдет речь.

Тригонометрические функции образуют базис пространства сигналов, и их можно использовать для разложения, если они к тому же оказываются собственными («любимыми») для данного преобразования, а такими они и являются для подавляющего большинства как природных «устройств», так и систем, созданных человеком.

Правда, если использовать сами синусы и косинусы, то, хотя синусоида останется синусоидой, изменение фазы приведет на выходе к их новой комбинации. Чтобы избежать этого осложнения, их записывают в комплексной форме, в виде «комплексных амплитуд», тогда изменение и амплитуды и фазы сводится к умножению на комплексное число. Однако не надо забывать, что комплексных сигналов в природе не бывает, использование комплексных амплитуд всего лишь упрощающий прием, и при его использовании всегда подразумевается (но часто не выполняется) какой-либо переход к вещественному выражению окончательного результата (например, взятие его действительной части).

Скажем, наконец, что существуют линейные преобразования, для которых собственными являются вовсе не гармонические функции. Как правило, это системы специальных функций, которые также образуют базис пространства сигналов.¹ С другой стороны, все системы, преобразующие сигналы, обладают, в той или иной степени, нелинейностью, которая приводит к искажениям при воспроизведении записанного звука и видеоизображений, к абберациям в оптических приборах и т.п.

¹ Тригонометрические функции отнесены к элементарным не только потому, что они не слишком сложны, но и по соображениям, высказанным чуть выше.

Функция ψ называется *собственной функцией* оператора \hat{A} , *принадлежащей собственному значению a* , если выполняется равенство

$$\hat{A}\psi = a\psi, \quad \text{где } a \text{ – любое комплексное число.} \quad (17)$$

Сразу скажу, что далеко не все операторы имеют собственные функции, это, скорее, исключение.

Очевидно, что если ψ – собственная функция некоторого оператора, то и любая функция $\alpha\psi$ (α – произвольное комплексное число) есть его собственная функция, принадлежащая тому же собственному значению.

Для примера вспомним проекционный оператор (или проектор) \hat{P} . Его формальное определение заключается в том, что он удовлетворяет равенству $\hat{P}^2 = \hat{P}$. Пусть он работает в обычном трехмерном пространстве и проектирует радиус-вектор на ось Ox : $\hat{P}\mathbf{r} = x\mathbf{i}$. Ясно, что собственными векторами этого оператора служат все векторы $x\mathbf{i}$, которые принадлежат собственному значению 1, а также векторы, лежащие в плоскости Oyz , для которых собственное значение равно 0. Первые образуют одномерное пространство с нормированным вектором \mathbf{i} , а другие – двумерное пространство с ортонормированным базисом (\mathbf{j}, \mathbf{k}) . Подобно этому и собственные функции некоторого оператора в пространстве ψ – функций могут образовывать многомерное пространства.

Любая функция $F(\hat{A})$ оператора \hat{A} (например, \hat{A}^2) имеет такие же собственные функции, что и сам оператор \hat{A} , а собственные значения получаются подстановкой собственного значения a вместо \hat{A} в функцию F . Так, если выполняется (17), то

$$F(\hat{A})\psi = F(a)\psi. \quad (18)$$

Среди всех операторов в пространстве ψ -функций нас будут интересовать такие, все собственные значения которых действительны. К таким операторам относятся *самосопряженные* или *эрмитовы* операторы.

Оператор \hat{A}^+ (читается «а крест») называется эрмитово сопряженным к некоторому оператору \hat{A} , если для всех функций пространства выполняется равенство

$$(\psi_1, \hat{A}\psi_2) = (\hat{A}^+\psi_1, \psi_2). \quad (19)$$

Оператор переползает и в обратном направлении, приобретая крест:

$$(\hat{A}\psi_1, \psi_2) = (\psi_1, \hat{A}^+\psi_2).$$

В самом деле, используя свойство (5) скалярного произведения, получаем

$$(\hat{A}\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \hat{A}\psi_1)^* = (\hat{A}^+\psi_2, \psi_1)^* = (\psi_1, \hat{A}^+\psi_2).$$

Можно доказать, что два оператора такие, что $(\psi, \hat{A}\psi) = (\psi, \hat{B}\psi)$ для всех ψ , равны, т.е. $\hat{A} = \hat{B}$. Используя этот факт, легко показать, что оператор, «сопряженный сопряженному», равен исходному оператору:

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

Оператор \hat{A} называется (эрмитово) *самосопряженным* (или просто *эрмитовым*), если $\hat{A}^+ = \hat{A}$, т.е. если для всех функций пространства выполняется равенство

$$(\psi_1, \hat{A}\psi_2) = (\hat{A}\psi_1, \psi_2). \quad (20)$$

Эрмитовы операторы еще называют *действительными (вещественными)* операторами, потому что они представляют собой некоторый аналог действительных чисел (действительное число равно своему сопряженному, т.е. *самосопряжено*).

В явной форме (см. (3)) условие самосопряженности (эрмитовости) оператора записывается так:

$$\iiint \psi_1^*(x, y, z) \hat{A} \psi_2(x, y, z) dV = \iiint (\hat{A} \psi_1(x, y, z))^* \psi_2(x, y, z) dV. \quad (20')$$

Оператор \hat{x} очевидно эрмитов, проверим самосопряженность оператора \hat{p}_x . Из Условия 1 для ψ -функций следует, что функция $\psi(x)$ должна обращаться в 0 при $x \rightarrow \pm\infty$. Далее используем интегрирование по частям

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_2 dx = \frac{\hbar}{i} \psi_1^*(x) \psi_2(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_1(x) \right)^* \psi_2(x) dx.$$

Первое слагаемое в правой части обращается в ноль, а во втором мы поменяли знак, внося мнимую единицу под знак сопряжения. Сравнивая получившееся равенство с условием (20'), убеждаемся, что оператор \hat{p}_x эрмитов.

Если оператор \hat{A} эрмитов, то скалярное произведение $(\psi, \hat{A}\psi)$ действительно для любой функции ψ .

В самом деле, с одной стороны,
 $(\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \psi)$
 согласно определению (20), а с другой –

$$(\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \psi)^*$$

по свойству (5) скалярного произведения.

Теперь мы можем доказать, что все собственные значения самосопряженного оператора \hat{A} действительны. Итак, пусть у самосопряженного оператора \hat{A} есть собственная функция (17). Умножим левую и правую части этого равенства скалярно слева на ψ :

$$(\psi, \hat{A}\psi) = a(\psi, \psi).$$

Самосопряженный или эрмитов оператор

Условие эрмитовости оператора

Величина $(\psi, \hat{A}\psi)$, как мы только что доказали, действительна, а скалярное произведение (ψ, ψ) не только действительно, но и не отрицательно (см. (3) и последующий текст), поэтому и собственное значение a действительно.

Кроме того, что *все собственные значения эрмитовых операторов действительны*, важную роль играет следующее утверждение.

Собственные функции самосопряженного оператора, принадлежащие разным собственным значениям, взаимно ортогональны.

Ортогональность с.ф.

Это обстоятельство делает излишним ортогонализацию системы собственных функций таких операторов.¹

Доказательство.

Запишем условие:

$$\hat{A}\psi_1 = a_1\psi_1 \text{ и } \hat{A}\psi_2 = a_2\psi_2, \quad a_1 \neq a_2 \text{ и оба действительны.}$$

Умножим первое равенство скалярно слева на ψ_2 , а второе – на ψ_1 :

$$(\psi_2, \hat{A}\psi_1) = a_1(\psi_2, \psi_1), \quad (21)$$

$$(\psi_1, \hat{A}\psi_2) = a_2(\psi_1, \psi_2) \quad (22)$$

Теперь перейдем к сопряженным величинам в равенстве (22):

$$(\psi_1, \hat{A}\psi_2)^* = a_2(\psi_2, \psi_1).$$

В правой части мы уже воспользовались свойством скалярного произведения (5), а над левой частью еще чуть-чуть поглумимся, используя дополнительно эрмитовость оператора \hat{A} :

$$(\psi_1, \hat{A}\psi_2)^* = (\hat{A}\psi_2, \psi_1) = (\psi_2, \hat{A}\psi_1).$$

Равенство (22) принимает вид

$$(\psi_2, \hat{A}\psi_1) = a_2(\psi_2, \psi_1). \quad (22')$$

Вычитаем (22') из (21):

$$0 = (a_1 - a_2)(\psi_2, \psi_1).$$

Так как по условию $a_1 \neq a_2$, то $(\psi_2, \psi_1) = 0$, ч.т.д.

Ну, и наконец, нас будут интересовать только операторы, очень «богатые» на собственные функции.

Наблюдаемым называется самосопряженный линейный оператор в пространстве ψ -функций, собственные функции которого образуют базис этого пространства.

Наблюдаемые операторы.

Мы готовы сформулировать постулат о физических величинах.

¹ Остается только ортогонализировать линейно независимые собственные функции, принадлежащие одному и тому же собственному значению. Однако в квантовой механике обычно соответствующие состояния уточняются каким-либо другим оператором, он же обеспечивает их взаимную ортогональность.

Каждой наблюдаемой физической величине¹ квантовая механика ставит в соответствие наблюдаемый оператор по следующим правилам:

Постулат о физических величинах

Координаты и импульсы описываются операторами, действие которых определено соответственно формулами (13) и (14), т.е. краткой форме²

$$\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z, \quad (23)$$

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (24)$$

Операторы координат и проекций импульса

Остальные физические величины, имеющих классические аналоги,³ представляют собой функции координат и импульсов. Им ставится в соответствие такая же операторная функция от операторов $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$.⁴

Можно условно сказать, что для перехода от классической механики к квантовой достаточно «расставить домики».

Напишем классический квадрат импульса

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2.$$

Расставим домики:⁵

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\hbar^2 \Delta,$$

где Δ - оператор Лапласа,

так что

$$\hat{p}^2 \psi(x, y, z) = -\hbar^2 \Delta \psi(x, y, z).$$

Поскольку в классической механике кинетическая энергия материальной точки есть

$$E_K = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m},$$

то, расставляя домики, получаем

$$\widehat{E}_K = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \quad (25)$$

Оператор кинетической энергии

Оператор потенциальной энергии $\widehat{U}(x, y, z)$ просто умножает (как координата) ψ – функцию на эту функцию координат:

$$\widehat{U}(x, y, z) \psi(x, y, z) = U(x, y, z) \psi(x, y, z). \quad (26)$$

¹ Наблюдаемые величины можно измерить. В различных теориях встречаются еще «скрытые» параметры или величины, которые таким свойством не обладают.

² Мы раньше убедились, что эти операторы эрмитовы, а сейчас поверим, что их собственные функции образуют базис. Этими же свойствами обладают *вещественные* функции этих операторов.

³ В квантовой механике существуют величины, не имеющие классических аналогов (например, спин). В таких случаях операторы определяются дополнительно.

⁴ Из-за того, что операторы не коммутируют, иногда приходится выражение симметризовать.

⁵ По правилу умножения операторов, например, $\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

Наконец, оператор полной энергии есть сумма операторов кинетической и потенциальной энергии. В квантовой механике он носит особое название «оператор Гамильтона» или *гамильтониан* и обозначается \hat{H} :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z). \quad (27)$$

Все это довольно просто. Остается, однако, один вопрос: «Кому это все нужно и зачем?». Нам придется немного потерпеть, поскольку ответ будет дан только в параграфе, посвященном Постулату об измерениях, а сейчас мы обратимся к тому, как волновая функция изменяется во времени и как ее найти.

Динамический постулат. Уравнение Шредингера

Динамический постулат говорит о том, как состояние частицы, описываемое волновой функцией, изменяется во времени. В классической механике на этот вопрос отвечает, например, 2 закон Ньютона.

*Изменение волновой функции во времени описывается уравнением Шредингера:*¹

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (28)$$

Мы видим, что оператор Гамильтона (полной энергии) \hat{H} играет исключительную роль в квантовой механике.

В развернутом виде (см.(27)) уравнение Шредингера принимает вид уравнения в частных производных:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, z, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x, y, z, t) + U(x, y, z) \Psi(x, y, z, t). \quad (29)$$

Оставляю вам проверить, что волновая функция свободной частицы из предыдущей лекции

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} (Et - \mathbf{p}\mathbf{r})\right\}$$

удовлетворяет этому уравнению, если $U(x, y, z) = 0$.

Если заданы начальные условия, например, в момент времени $t = 0$,²

¹ Мы знакомимся с нерелятивистской квантовой механикой, и это утверждение справедливо только для нее. Не знать уравнение Шредингера на экзамене в этом семестре – то же самое, что не знать 2 закон Ньютона на экзамене по механике.

² Важную роль играют и краевые условия, но об этом речь пойдет позже.

Гамильтониан – оператор полной энергии

Динамический постулат – уравнение Шредингера

Дифференц. уравнение Шредингера

Волновая функция свободной частицы

$$\Psi(x, y, z, 0) = \psi_{\text{нач}}(x, y, z), \quad (30)$$

Начальные условия

то, решив уравнение Шредингера, мы можем найти состояние частицы в любой момент времени, т.е. все вроде детерминировано.

Известен и общий метод решения *уравнения математической физики* (29), с которым вы, наверно, знакомы из курса математики. Он называется *методом разделения переменных* и заключается в следующем.

Разделение переменных

Сначала находятся все частные решения специального вида

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})\varphi_n(t). \quad (31)$$

Тогда общее решение представляется суммой таких частных решений

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r})\varphi_n(t). \quad (32)$$

Подставим решение (31) в уравнение (29) и разделим левую и правую части получившегося уравнения на произведение $\psi_n(\mathbf{r})\varphi_n(t)$:

$$\frac{i\hbar}{\varphi_n(t)} \frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m\psi_n(\mathbf{r})} \Delta \psi_n(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}).$$

Теперь посмотрим, что получилось. Левая часть зависит только от времени, а правая – только от координат. Но как может функция, зависящая от времени, быть равной функции от координат? Никак. Единственный вариант – ни та, ни другая не зависят ни от времени, ни от координат, т.е. и левая и правая части последнего равенства есть константа, которую мы обозначим E_n . Получаются два уравнения.

Первое уравнение имеет вид

$$\frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E_n \varphi_n(t)$$

с очевидным решением

$$\varphi_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (33)$$

Нам удобно не писать произвольный множитель перед этим решением (им мы займемся потом).

Второе уравнение выглядит так

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_n(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}). \quad (34)$$

Сразу заметим, что в операторной форме оно становится очень симпатичным:

$$\hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}) \quad (35)$$

Стационарное уравнение Шредингера

То же в операторном виде

и представляет собой условие (17) того, что функции $\psi_n(\mathbf{r})$ суть собственные функции оператора Гамильтона (полной энергии), принадлежащие собственным значениям E_n .

Уравнение (34) (как и уравнение (35)) называется *стационарным уравнением Шредингера*.¹

Решение уравнения (34) должно находиться с учетом граничных условий и условий, накладываемых на ψ -функцию. Это решение и составляет основную проблему при рассмотрении квантово-механических задач. Примеры мы рассмотрим в лекции «Простейшие задачи квантовой механики».

Допустим, нам удалось решить стационарное уравнение (34), т.е. найти все собственные функции $\psi_n(\mathbf{r})$ гамильтониана. Напомню, что, во-первых, они образуют базис, а во-вторых, принадлежащие различным собственным значениям E_n собственные функции взаимно ортогональны. Будем считать, что мы их также нормировали. Частные решения (31) с учетом (33) запишутся так:

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}. \quad (36)$$

Эта волновая функция, конечно, зависит от времени, но поскольку экспоненциальный множитель не зависит от координат, то речь идет об умножении ψ -функции $\psi_n(\mathbf{r})$ на комплексное число, поэтому *состояние частицы, описываемое (36), не изменяется во времени* (см. постулат о квантовых состояниях). В частности,

$$|\Psi_n(\mathbf{r}, t)|^2 = \Psi_n(\mathbf{r}, t)\Psi_n^*(\mathbf{r}, t) = |\psi_n(\mathbf{r})|^2$$

не зависит от времени, т.е. не зависит от времени и вероятность найти частицу в некоторой области пространства. Это одна из причин того, что состояния, описываемые функциями (36), называются *стационарными* (как и уравнения (34,35)).

Общее решение (32) уравнения Шредингера принимает вид

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}. \quad (37)$$

Поскольку крайевым условиям удовлетворяют все функции $\psi_n(\mathbf{r})$, то нам осталось только удовлетворить начальным

Волновые функции стационарных состояний

Общее решение уравнения Шредингера

¹ Часто его просто называют уравнением Шредингера, и тогда главное уравнение (29) становится «динамическим (или временным) уравнением». Шредингер первоначально просто угадал его, пытаясь написать уравнение, собственные значения которого совпадали бы с известными энергетическими уровнями атома водорода. Почему это так – в следующем параграфе.

условиям (30). Полагая в (37) $t = 0$, получаем, что должно быть

$$\psi_{\text{нач}}(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}).$$

Это не что иное, как **разложение (2)** функции по ортонормированному базису, так что пока неизвестные коэффициенты получаются по формулам (10):

$$c_n = \iiint \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_{\text{нач}}(\mathbf{r}) dV. \quad (38)$$

Постулат об измерениях

Мы теперь, хотя бы формально, научились находить волновую функцию, а следовательно, можем найти вероятность то, что частица находится в той или иной области пространства. Однако, поскольку волновая функция полностью задает состояние частицы, она должна давать какую-то информацию и о других физических величинах, характеризующих эту частицу. Мы, конечно, ожидаем здесь какого-нибудь подвоха: если уж можно только указать *вероятность* нахождения частицы в некоторой области пространства, то наверно и с измерением других физических величин все не так просто.

Помните наш вопрос, зачем нужны все сложности с операторами? Ответ содержится в *постулате об измерениях*.

Пусть в некоторый фиксированный момент времени квантовая система¹ находится в состоянии, описываемом ψ -функцией ψ и измеряется некоторая физическая величина A , которой соответствует оператор \hat{A} с собственными функциями $\{\psi_n\}$ и действительными собственными значениями a_n :

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n. \quad (39)$$

Запишем разложение функции ψ по базису, составленному из собственных функций оператора \hat{A} :

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n. \quad (40)$$

Все функции считаются нормированными.²

Тогда

Постулат об измерениях

¹ Здесь я формулирую постулат чуть в более общей, чем обычно, форме – для произвольной квантовой системы, а не для одной частицы. Как ни странно, так легче нам будет осознать его смысл. Постулаты, сформулированные выше, тоже с небольшими изменениями переносятся на любые квантовые системы.

² Базис из собственных функций, тем самым, ортонормирован.

а) в момент измерения система **неминуемо перейдет** в одно из состояний, описываемых **собственными** функциями ψ_n , а в качестве результата измерения получится соответствующее **собственное значение** a_n ;

б) вероятность перейти в конкретное состояние ψ_n (стало быть, вероятность получить результат, равный a_n) дается квадратом модуля $|c_n|^2$ соответствующего коэффициента в разложении (40).

Обсудим. Во-первых, первая часть постулата чрезвычайно важна, поскольку она открывает принципиальную возможность привести систему в любое желаемое состояние. Возникает такая связка. Измеряем некоторую величину, приводим систему в определенное состояние, решаем уравнение Шредингера и предсказываем вероятность различных возможных (собственных, конечно) значений результатов следующего измерения, производим это измерение и т.д. Обратите внимание, что все это можно делать с одной частицей, для *одной и той же частицы* будут получаться *различные* результаты и для одной частицы можно говорить о среднем значении измеряемой величины. Мы получим выражение для квантово-механических средних значений чуть-чуть позже.

Во-вторых, становится понятно, почему операторы физических величин должны быть эрмитовыми: мы можем измерить только действительные величины, так что все собственные значения также должны быть действительными.

Однако сразу возникают и некоторые вопросы. Почему скачком изменяется состояние системы в момент измерения? Квантовая механика отвечает так: это следствие воздействия на нее измерительных инструментов. Почему система переходит именно в состояния, описываемы собственными функциями оператора измеряемой физической величины? Потому что так устроена природа.¹

Когда мы обсуждали опыты по волновым свойствам частиц, я оставил в стороне еще одну интересную вещь. Представьте себе интерференцию электронов, проходящих через две щели, причем параметры подобраны так, что дифракции от одной щели нет, а лучи от двух щелей интерфе-

¹ Почему во второй закон Ньютона входит именно вторая производная по времени от радиуса-вектора? Почему в законе Кулона $1/r^2$?

рируют. Отсутствие дифракции на одной щели говорит о том, что с точки зрения волновой теории речь идет о геометрической оптике, а с точки зрения электронов-частиц о стрельбе из ружья. Если открыта любая одна из щелей – напротив нее видим пятнышко от пули. Открываем две щели: волна проходит через *обе щели*, видна интерференционная картина с максимумом в середине экрана.

Попробуем сделать так: откроем обе щели, но будем следить за каждым электроном, записывая, через какую щель он прошел, например, освещая пространство за щелями пучком фотонов и анализируя их рассеяние на электронах. При этом каждый электрон ведет себя как пуля, приходя в пятнышко за своей щелью. Если бы теперь возникла интерференционная картина, то получилось бы непреодолимое противоречие – максимум в середине экрана, куда не мог попасть ни один электрон. Но электроны не могут себе позволить вести себя нелогично, и интерференционная картина исчезает! Не следим за электронами, она есть, следим – ее нет! Происходит что-то необычное, но зато никакого противоречия. Почему такое происходит? Потому что фотоны нагло вмешиваются в частную жизнь электронов, переводя их согласно постулату об измерениях в новое состояние, где проявляются уже другие свойства. Для электронов рассеяние фотона, что для нас нападение бандита!

Вторая часть постулата просто говорит, что чем «ближе» собственное состояние¹ к исходному, тем вероятнее в него переход. В обычном трехмерном пространстве «близость» радиус-векторов характеризуется их скалярным произведением. То же и в пространстве ψ -функций, ведь коэффициенты разложения (40) – как раз скалярные произведения (см. (10) и (11)).

Если в момент измерения система уже находится в собственном состоянии измеряемой величины, то никуда ей переходить не надо,² всегда будет получаться один и тот же результат. Говорят, что в этом состоянии измеряемая величина *имеет определенное значение*.

Далее, в каком бы состоянии не находилась система, при измерении будут получаться только собственные значения, поэтому *создается иллюзия*, что система и может находиться только в собственных состояниях измеряемой величины. К этому мы еще вернемся.

Поскольку результаты измерений представляют собой случайную величину, то естественно возникает вопрос о математическом ожидании, дисперсии и т.п. Все это может быть вы-

¹ Это употребительный жаргон. Правильно: «в состоянии, описываемом собственной функцией оператора измеряемой физической величины». Но уж очень длинно!

² Если $\psi = \psi_m$, то все коэффициенты разложения (40) обращаются в ноль, кроме c_m :
 $(\psi_n, \psi) = (\psi_n, \psi_m) = \delta_{n,m}$

числено на основе постулата об измерениях. Важнейшая величина – квантово-механическое среднее физической величины вычисляется по общему правилу (см Лекцию 0 в файле Электростатика)

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n a_n p_n}{\sum_n p_n}, \quad (41)$$

где

a_n – значения, принимаемые величиной A , p_n – весовые множители, в данном случае – вероятности получить при измерении соответствующие значения, Согласно постулату

$$p_n = |c_n|^2 = c_n \cdot c_n^* = c_n(\psi, \psi_n). \quad (42)$$

Последний вариант этих равенств нам понадобится, а получается он с использованием формул (10) и (5).

Если функция ψ нормирована то

$$\sum_n p_n = 1,$$

и

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n p_n \quad (43)$$

Формулу (43) можно преобразовать к гораздо более удобному виду;

$$\langle A \rangle = (\psi, \hat{A}\psi). \quad (44)$$

В явном виде для одной частицы это выглядит так:

$$\langle A \rangle = \iiint \psi^*(\mathbf{r}) \hat{A} \psi(\mathbf{r}) dV, \quad (45)$$

где интегрирование, конечно, ведется по всему пространству.

Отдельно выпишу эту формулу для одномерных задач:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx.$$

Докажем написанные формулы. Вообще, если базис ортонормирован, то

$$\sum_n p_n = |\psi|^2. \quad (46)$$

Используя формулы (7) и (8), напомним

$|\psi|^2 = (\psi, \psi) = (\sum_m c_m \psi_m, \sum_n c_n \psi_n) = \sum_{m,n} c_m^* c_n (\psi_m, \psi_n) = \sum_{m,n} c_m^* c_n \delta_{m,n} = \sum_n |c_n|^2 = \sum_n p_n$.¹ Так что действительно, если функция ψ нормирована, то $\sum_n p_n = 1$.

Теперь преобразуем равенство (43) к виду (44), используя формулы (42), (6), (39), (40) и линейность оператора \hat{A} :

$$\sum_n a_n c_n c_n^* = \sum_n a_n c_n (\psi, \psi_n) = \sum_n (\psi, a_n c_n \psi_n) = \sum_n (\psi, \hat{A} c_n \psi_n) =$$

Общая формула для среднего значения

Квантово-механическое среднее значение физ. величины

Как всегда, мелкий шрифт можно пропустить

¹ Как только становится трудно работать со скалярными произведениями, сделайте следующее. Во-первых, подумайте об обычных скалярных произведениях в трехмерном пространстве: все то же самое, только с учетом (5) и (6). Во вторых, вспомните, что скалярное произведение – просто интеграл (3).

$$= (\psi, \hat{A} \sum_n c_n \psi_n) = (\psi, \hat{A} \psi).$$

Теперь посмотрим, что получится, если мы попытаемся измерить *одновременно* две физические величины A и B . Согласно постулату, система должна перейти в состояние, описываемое как собственной функцией оператора \hat{A} , так и собственной функцией оператора \hat{B} . Стало быть, эта функция должна быть общей собственной функцией обоих операторов, т.е. операторы \hat{A} и \hat{B} должны иметь общий базис собственных функций. Если такого базиса нет, то *невозможно измерить эти величины точно и одновременно*.

Можно доказать, что операторы имеют общий базис собственных функций тогда и только тогда, когда они коммутируют.

В одну сторону это доказывается легко. Пусть операторы \hat{A} и \hat{B} имеют общий базис $\{\psi_n\}$:

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n, \quad \hat{B}\psi_n = b_n\psi_n,$$

а разложение произвольной функции ψ имеет обычный вид (40).

Вычислим $\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}\hat{B} \sum_n c_n \psi_n = \hat{A} \sum_n b_n c_n \psi_n = \sum_n a_n b_n c_n \psi_n$. Ясно, что к такому же результату приводит действие оператора $\hat{B}\hat{A}$, так что $[\hat{A}\hat{B}] = 0$.

Доказать, что наличие общего базиса следует из того, что операторы коммутируют, сложнее. Дело в том, что при этом надо разбираться с вырожденными собственными значениями, а мы договорились в эти вопросы особенно не вдаваться. Я поясню это, когда мы будем решать задачу о потенциальной яме.

Объединяя физическое следствие из постулата об измерениях с математической теоремой, получаем следующее утверждение.

Две физические величины A и B можно измерить одновременно точно тогда и только тогда, когда их операторы коммутируют:

$$[\hat{A}\hat{B}] = 0. \tag{47}$$

Например, можно одновременно измерить точно координату y и проекцию импульса p_x :

$$[\hat{y}, \hat{p}_x] = 0,$$

поскольку все равно, сначала умножить функцию на y и потом продифференцировать по x , или наоборот (см. (23)-(24)).

Две физические величины, операторы которых \hat{A} и \hat{B} не коммутируют, также, конечно, могут быть измерены одновре-

Условие
одновременного
точного
измерения
физ. величин

менно, но не точно: пределы этой точности устанавливает соотношение неопределенностей Гейзенберга. Можно показать, что если коммутатор

$$[\hat{A}\hat{B}] = i\hbar, \quad (48)$$

то среднеквадратические отклонения ΔA и ΔB удовлетворяют соотношению неопределенностей вида

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \hbar/2. \quad (49)$$

Я не буду здесь выводить это неравенство.¹ Напомню только, что именно такому коммутационному соотношению (48) удовлетворяют операторы координаты и соответствующей проекции импульса (см. (15)).

Кое-что еще

Рассмотрим качественно один пример – атом водорода. Решив для электрона в этом атоме стационарное уравнение Шредингера (35),² мы знаем все значения его энергии, которые могут получиться при ее измерении. Часто их называют просто *уровнями энергии*. Им соответствуют стационарные состояния (см. текст после формулы (36)), *не изменяющиеся* во времени.

Стационарное состояние с наименьшей энергией называется основным, остальные – возбужденными. Электрон может перейти с более высокого уровня энергии E' на более низкий E , испуская фотон,³ энергия которого по закону сохранения энергии равна

$$\hbar\omega = E' - E.$$

Мы знаем, что полное решение уравнения Шредингера представляет собой суперпозицию стационарных состояний (37). Рассмотрим простейшую ситуацию, когда замешаны только два стационарных состояния с энергиями E и E' и с собственными функциями оператора Гамильтона ψ_E и $\psi_{E'}$ соответственно:

$$\psi = c_E \psi_E e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + c_{E'} \psi_{E'} e^{-i\frac{E'}{\hbar}t}, \quad (50)$$

Основное и
возбужденные
состояния

¹ См. учебник Л.К. Мартинсона и Е.В. Смирнова.

² Позже мы обсудим эту задачу подробнее.

³ Возможен, конечно, и обратный процесс – с поглощением фотона и переходом электрона на более высокий уровень энергии.

причем

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E \text{ и } \hat{H}\psi_{E'} = E'\psi_{E'}. \quad (51)$$

Прежде чем обсуждать результаты измерения, получим одно важное соотношение, для чего вычислим $|\psi|^2$:

$$|\psi|^2 = \psi\psi^* = |c_E|^2|\psi_E|^2 + |c_{E'}|^2|\psi_{E'}|^2 + \rho(e^{i\alpha}e^{i\frac{\Delta E}{\hbar}t} + e^{-i\alpha}e^{-i\frac{\Delta E}{\hbar}t}),$$

где обозначено

$$\Delta E = E' - E, \quad \rho e^{i\alpha} = c_E\psi_E c_{E'}^*\psi_{E'}^*.$$

Вам ничего это не напоминает? Вспомните интерференцию световых волн. Преобразуем выражение в скобках к косинусу

$$2\rho \cdot \cos\left(\frac{\Delta E}{\hbar}t + \alpha\right).$$

Мы видим, что состояние изменяется во времени, осциллирует между стационарными состояниями (51),¹ при этом заметное изменение происходит за время Δt , когда аргументе косинуса изменяется на величину, порядка или большую единице, т.е. когда

$$\frac{\Delta E}{\hbar}\Delta t \gtrsim 1,$$

или

$$\Delta E\Delta t \gtrsim \hbar \quad (52)$$

Это неравенство носит название *соотношения неопределенностей для энергии и времени*.

Если в интервале энергий ΔE находится много стационарных уровней, то наши выводы остаются справедливыми, а соотношение (52) можно сформулировать так.

Если в состоянии системы «замешаны» стационарные уровни в интервале энергий ΔE , то изменение этого состояния происходит за время Δt , удовлетворяющее соотношению неопределенностей (52).

В частности, для одного стационарного уровня $\Delta E = 0$, так что в таком состоянии система находится бесконечно долго – уже известный нам факт.

А почему речь идет о неопределенностях? Применим постулат об измерениях к состоянию (50). Читайте [постулат](#) и

¹ Если $\Delta E \sim 1\text{эВ}$ ($1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж), то частота осцилляций $\omega \sim 10^{15}\text{с}^{-1}$. Сравните с частотами колебаний в световой волне. Однако при существенно меньших интервалах ΔE такие осцилляции могут стать наблюдаемыми.

Соотношение неопределенностей энергия-время

Его смысл

сравнивайте с тем, что я сейчас скажу. При измерении энергии система перейдет в одно из собственных состояний гамильтониана (51), и мы получим либо значение энергии E (с вероятностью $|c_E|^2$), либо значение E' (с вероятностью $|c_{E'}|^2$). То же, если уровней в интервале ΔE много. Иными словами, в таких состояниях у энергии *нет определенного значения*, а неопределенность в измерениях как раз характеризуется величиной ΔE . Что же касается времени, то величина Δt – никакая *не* неопределенность, а характерное время изменения состояния, но так уж говорят: «соотношение неопределенностей».

Обратите внимание, что смысл соотношения неопределенностей для энергии и времени сильно отличается от смысла соотношения неопределенностей для координаты и импульса.

Бесконечно узкие уровни энергии, например, электрона в атоме, получаются в простейшей модели. В действительности все уровни имеют конечную ширину ΔE .¹ Об этом говорит тот факт, что даже в отсутствие взаимодействия с другими системами, всегда возможен переход в состояние с меньшей энергией. Это так называемое естественное *уширение*. Взаимодействия приводят к дополнительному уширению. Пусть τ – среднее время жизни системы (например, того же электрона в атоме) на некотором энергетическом уровне шириной ΔE . Поскольку это и есть время, за которое происходит изменение состояния, то эти величины связаны соотношением (52):

$$\Delta E \cdot \tau \gtrsim \hbar. \quad (52)$$

Помните, я говорил об иллюзии, что система может находиться только в стационарных состояниях – отсюда и представление об уровнях энергии. На самом же деле, состояние может описываться сложной волновой функцией с неопределенной энергией, но при измерении все будет так, как будто она находилась «на одном из уровней энергии».

Все происходит примерно так. Измеряя энергию, мы переводим систему в стационарное состояние. Из-за взаимодействия с другими системами (их нужно бы учитывать в гамильтониане) это состояние оказывается не совсем стационарным и превращается в состояние-суперпозицию. Если при следующем

Еще о смысле соотношения неопределенностей энергия-время

¹ При полном отсутствии взаимодействия с другими системами формально бесконечно узким может быть только уровень основного состояния.

измерении энергии получается другое значение энергии, то мы говорим, что «система перешла на другой энергетический уровень». Это не очень точно, но очень удобно, и мы тоже будем пользоваться такой терминологией.

Измерения в квантовой механике – понятие весьма и весьма сложное. Это связано с тем, что с ее точки зрения вся Вселенная представляет собой *единую квантовую систему*. В классической механике часто удается выделить некоторую подсистему, которую с достаточной точностью можно считать изолированной. В квантовой механике тоже приходится это делать, однако надо соблюдать осторожность.

Вернемся к нашему примеру – атому водорода.

Расстояние между уровнями различны, поэтому по длине волны испущенного фотона можно определить состояние, в которое перешел электрон атома водорода.

Теперь представьте себе, что атом где-то далеко, а испущенный им фотон попал мне в глаз. В этот момент, согласно квантовой механике, я произвел (совсем не преднамеренно) *измерение*, и по постулату об измерениях именно в этот момент электрон атома перешел из одного состояния в другое, его энергия приняла определенное значение. Все это происходит мгновенно, потому что атом и фотон *образуют единую квантовую систему*. Что значит «мгновенно»? А то и значит, я поймал фотон одновременно с переходом электрона в собственное состояние оператора полной энергии (ведь я «измерил» именно энергию, и это измерение вызвало переход).

А как же быть со скоростью света? Здесь я должен напомнить один важный момент. Ни в одной системе отсчета не может нарушаться принцип причинности: нигде и никогда следствие не может опережать во времени причину. Именно отсюда (и, конечно, из постулатов теории относительности) следует, что скорость передачи информации не может превышать скорость света, материальный объект должен перемещаться со скоростью, меньшей скорости света (иначе пуля в некоторых ИСО попадет в мишень до выстрела) и т.п. Так вот, описанный только что эффект *не дает возможности передавать информацию быстрее, чем со скоростью света, не приводит к нарушению принципа причинности*.

Все равно, очень трудно принять тот факт, что измерение здесь, на Земле, мгновенно отражается на состоянии чего-то в другой галактике. А что, соотношение неопределенностей легко принять? Или мы уже смирились?

Даже в наши дни *принципиально* вероятностный характер поведения квантовых систем, отсутствие детерминизма, соотношение неопределенностей и т.п. вызывают сомнения у некоторых крупных физиков. Вопрос, поставленный Эйнштейном еще в 1927 году, сводится к следующему. Являются ли эти свойства микромира внутренне присущими ему – точка зрения так называемой Копенгагенской школы (Бор, Гейзенберг и др.) или они просто свидетельствуют о неполноте квантовой физики (Эйнштейн и др.). Эйнштейн предложил обойти соотношение неопределенностей с помощью косвенных измерений, что по его мнению могло бы доказать его точку зрения. Я приведу упрощенное описание его мысленного эксперимента.

Парадокс ЭПР

Представим себе, что две одинаковые частицы образовались в результате распада третьей частицы с известным импульсом. Мы измеряем импульс одной из них и по закону сохранения импульса знаем импульс и второй частицы, у которой теперь измеряем координату – и никакого для нее соотношения неопределенности! Поскольку эти соображения были опубликованы в 1935 г. в совместной статье А. Эйнштейна, Б. Подольского и Н. Розена, описанный мысленный эксперимент получил название «парадокс ЭПР»¹.

Мы с вами уже знаем, как разрешается этот парадокс квантовой механикой. Обе вылетевшие частицы образуют единую квантовую систему.² В момент измерения импульса первой частицы, вторая частица также переходит в состояние с определенным импульсом, но с неопределенной координатой, но когда мы измеряем координату второй частицы, она переходит в состояние с определенной координатой, но, увы, с неопределенным импульсом. Какое уж тут одновременное измерение координаты и импульса!

Однако это – мысленный эксперимент, нужно было поставить реальный эксперимент, выяснить, будет ли меняться состояние второй частицы при измерении импульса первой. Такие эксперименты были поставлены, правда в несколько другой конфигурации, и дали однозначный ответ: права квантовая механика, а не ЭПР.

Можно ли из сказанного заключить, что квантовая механика – исчерпывающее знание? Конечно, нет, она лишь корректно отражает наши знания о природе на современном этапе – как и любая другая наука.

¹ Не надо путать это название с физическим явлением ЭПР – электронным парамагнитным резонансом.

² В ситуациях, когда состояние одной частицы связано с состоянием другой частицы подобным образом, говорят о «спутанных» (или «запутанных») состояниях. Подробности вы можете посмотреть в лекции №17 А.М. Никифорова. Эти лекции тоже выложены на сайте PifMath.

И в заключение еще один вопрос. А может быть обойтись как-нибудь без этих сложностей с операторами?

Ну, прежде всего, что тут сложного? Была какая-то функция, на нее напал злодей-оператор, и превратилась она в другую функцию. Правда, при этом выясняется, что не все операторы – злодеи, от некоторых из них есть большой прок! Иными словами, если отказаться от операторов, то почти ничего нельзя посчитать.