



ПОЛИТЕХ
Физико-механический
институт



ПОЛИТЕХ
Санкт-Петербургский
политехнический университет
Петра Великого



ПОЛИТЕХ-ПРЕСС

ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

Учебное пособие

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО

ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

Учебное пособие



ПОЛИТЕХ-ПРЕСС

Санкт-Петербургский
политехнический университет
Петра Великого

Санкт-Петербург

2022

УДК 530.145(075.8)

ББК 22.314я73

В24

Р е ц е н з е н т ы:

Доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. В. К. Буторина КемГУ

А. В. Маркидонов

Доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики СПбПУ

А. Н. Илатов

А в т о р ы:

П. В. Захаров, А. М. Ерёмин, Н. А. Манаков,

Е. Г. Апушкинский, Е. А. Еремеев

Введение в квантовую механику : учеб. пособие / П. В. Захаров [и др.]. – СПб. : ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2022. – 114 с.

Пособие соответствует содержанию основных профессиональных образовательных программ высших учебных заведений по укрупненным группам направлений подготовки бакалавров 16.00.00 «Физико-технические науки и технологии».

Пособие имеет учебно-методическое назначение при изучении дисциплины «Квантовая механика и статистическая физика». Главное внимание в пособии уделено физическим основам квантовой механики и используемому в ней математическому аппарату.

Пособие предназначено для студентов, аспирантов, инженеров и научных работников, специализирующихся в области нанoeлектроники.

Печатается по решению

Совета по издательской деятельности Ученого совета

Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

ISBN 978-5-7422-7565-7

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого, 2022

Оглавление

Введение	5
Глава 1. Введение в принципы квантовой механики	6
§ 1.1. Несостоятельность классической физики в качестве теории вещества и излучения для микромира. Квантовая механика как неклассическая теория явлений микромира.....	6
§ 1.2. Сопоставление классических и квантовых измерений. Необходимость статистической формы представления результатов квантовых измерений	9
§ 1.3. Функции распределения численных значений динамических переменных и их числовые характеристики	16
§ 1.4. Волновая функция (амплитуда вероятности)	22
§ 1.5. Принцип суперпозиции	27
§ 1.6. Вектор состояния	30
§ 1.7. Динамические переменные и операторы в квантовой механике.....	32
§ 1.8. Принцип неопределённости	35
§ 1.9. Принцип дополнительности	40
§ 1.10. Связь квантовой механики с классической. Принцип соответствия	42
§ 1.11. Принцип причинности в квантовой механике	47
Глава 2. Введение в общий математический формализм квантовой механики	51
§ 2.1. Математическая формулировка принципа суперпозиции. Кет-векторы	51
§ 2.2. Скалярное произведение. Бра-векторы	53
§ 2.3. Линейные операторы	58
§ 2.4. Сопряжённые операторы. Правила сопряжения для векторов и операторов	60
§ 2.5. Эрмитовы (самосопряжённые) операторы, положительно определённые операторы, унитарные операторы	61

§ 2.6. Собственные значения операторов. Связь собственных значений с результатами измерений динамических переменных	62
§ 2.7. Средние значения динамических переменных	67
§ 2.8. Коммутационные соотношения	68
§ 2.9. Условия, при которых несколько физических величин могут одновременно иметь определённые значения	71
§ 2.10. Соотношения неопределённостей	74
§ 2.11. Динамические уравнения квантовой механики	76
Глава 3. Классические задачи квантовой механики	82
§ 3.1. Одномерное движение	82
§ 3.2. Линейный гармонический осциллятор	84
§ 3.3. Одномерное движение в однородном поле	89
§ 3.4. Момент количества движения	91
§ 3.5. Общие свойства движения в центральном поле	95
§ 3.6. Задача двух тел	99
§ 3.7. Движение в кулоновском поле притяжения. Атом водорода ...	101
Заключение	108
Предметный указатель	109
Указатель важнейших обозначений	111
Список литературы	112

Введение

К концу 19 века в физике стала господствовать точка зрения, согласно которой все сколько-нибудь значимые открытия уже были совершены и основными направлениями физических научных исследований станет решение частных задач классической ньютоновской механики. Последовавшие за этим открытия и парадоксы привели к возникновению сразу двух теорий, которые в результате сформировали новую физику — теории относительности и квантовой механики.

Классическая механика хорошо описывает макросистемы, но при этом не в состоянии объяснить все явления в микромире. Зато квантовая механика отлично объясняет процессы, протекающие на уровне молекул, атомов, электронов и элементарных частиц.

Датой рождения этой теории можно считать 14 декабря 1900 года. В этот день впервые прозвучало слово «квант» на заседании Берлинского физического общества. Последующее развитие квантовой механики подарило человечеству множество ключевых технологий 20 столетия: ядерное оружие и энергия, лазеры, ускорители частиц, ядерный магнитный резонанс и созданная на его основе магнитнорезонансная томография, полупроводниковая электроника и т.д. Всё это стало событиями первой квантовой революции. К концу 20 века прогресс в этой области позволил научиться управлять базовыми компонентами сложных квантовых систем (атомами и элементарными частицами). Эти события стали предпосылками ко второй квантовой революции, которая только начинается. Её плодами по всей видимости станут квантовые вычисления, квантовая связь, квантовая криптография и т.д.

Глава 1. Введение в принципы квантовой механики

§ 1.1. Несостоятельность классической физики в качестве теории вещества и излучения для микромира. Квантовая механика как неклассическая теория явлений микромира

На рубеже 19-20 веков было завершено построение *классической физической теории*. Её основой являются *механика системы материальных точек* (И. Ньютон, У. Р. Лагранж, Ж. Л. Гамильтон и др.) и *электродинамика* (Д. К. Максвелл). При этом теория теплоты (термодинамика) истолковывается как статистическая механика, а оптические явления находят объяснение в рамках электродинамики.

Классическая теория является теорией явлений происходящих в макроскопических системах, т.е. системах состоящих из большого числа частиц. Во многих случаях для таких объектов классических представлений вполне хватает, однако надо заметить не всегда. Например, при низких температурах, в сверхпроводниках магнитный поток квантуется, т.е. квантовые эффекты проявляются на уровне макроскопических систем. Это типичный пример макроскопического квантового эффекта. Проблема понимания истинной структуры вещества в рамках классической теории оставалась далёкой от разрешения, хотя упрощённые представления о структуре вещества в ней существовали (атомно-молекулярная гипотеза).

Вполне естественно, что усилия экспериментаторов на рубеже веков оказались сосредоточенными на исследованиях истинной структуры вещества и на выяснении законов взаимодействия материальных микро-частиц друг с другом и электромагнитным излучением (полем). Эти усилия привели к тому, что в период с 1895 по 1925 гг. был сделан ряд открытий, касающихся структуры вещества (например, открытие электрона (Д. Д. Томсон, 1897 г.); открытие радиоактивности (А. Беккерель, 1897 г.); открытие атомного ядра (Э. Резерфорд, 1911 г.) и др.), усовер-

шенствованы методы спектрального анализа и накоплено большое количество информации относительно испускания, рассеивания и поглощения света веществом.

Постепенно выяснилось, что классическая теория оказалась не в состоянии объяснить ряд наблюдаемых явлений. К ним относятся, в частности, устойчивость вещества (атомов и молекул), дискретность атомных состояний и атомных переходов, волновые свойства микрочастиц и другие.

Особо отметим, что из классической теории никак не следует необходимость существования *постоянной Планка* $\hbar$, универсальность которой была первоначально установлена в экспериментах квантовой оптики (тепловое излучение, фотоэффект, эффект Комптона), а затем подтверждена всей историей становления и развития квантовой физики. Эта универсальная постоянная входит в формулы:

$$E = \hbar\omega \quad (1.1)$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (1.2)$$

которые связывают корпускулярные характеристики E (энергия) и $\vec{p}$ (импульс) с волновыми характеристиками ω (частота) и $\vec{k}$ (волновой вектор), определяемыми из интерференционных явлений.

Формулы (1.1) и (1.2), первоначально установленные в исследованиях корпускулярных свойств света и связавшие волновые и корпускулярные характеристики фотона, оказались универсальными в том смысле, что они остаются справедливыми для всех микрочастиц и свидетельствуют, таким образом, об универсальности корпускулярно-волнового дуализма свойств микрочастиц. Ни существование корпускулярно-волнового дуализма, ни необходимость новой универсальной постоянной $\hbar$ не поддаются объяснению с позиций классической физики.

Несостоятельность классической физики в интерпретации явлений микромира привела к глубокому изменению точки зрения физиков на применимость математического аппарата используемого для осмысления экспериментальных фактов. Было осознано, что классическая физи-

ческая теория применима только к явлениям в макроскопических системах, а для построения теории явлений микромира необходимы как новые понятия, так и новые формы математического аппарата.

В силу такой необходимости в первой четверти двадцатого века и была создана теория (Э. Шрёдингер, В. Гейзенберг, П. Дирак, П. Иордан, М. Борн, В. А. Фок), целиком основанная на новых неклассических идеях и названная в дальнейшем квантовой механикой. Эта теория позволила в течение двадцатого века объяснить все известные и предсказать новые явления в атомной и ядерной физике, а также физике конденсированных сред. Благодаря квантовой механике появились теория атома, атомного ядра, полупроводников, сверхпроводимости и многое другое. Успешное применение квантовой механики в теоретических исследованиях продолжается и в наше время. Можно также не сомневаться и в её перспективах на будущее.

Первоначально квантовая механика была сформулирована в двух частных вариантах. В 1925 году появилась *«матричная механика»* (М. Борн, В. Гейзенберг, П. Иордан) и *«волновая механика»* (Э. Шрёдингер). Уже в 1926 году Э. Шрёдингер показал, что обе теории эквивалентны.

В конце двадцатых годов П. Дирак (и независимо П. Иордан, а также Ф. Лондон) создали общий математический формализм квантовой механики. В его основе лежит понятие о пространстве «векторов состояний» без конкретизации базиса в этом пространстве. Переход от общего формализма к частным формулировкам («представлениям») квантовой механики осуществляется тем или иным выбором базиса в пространстве векторов состояний. Матричная и волновая механики вытекают из общего формализма как его конкретные «представления».

§ 1.2. Сопоставление классических и квантовых измерений. Неизбежность статистической формы представления результатов квантовых измерений

Как в классической, так и в квантовой механиках, измерение понимают, как акт взаимодействия исследуемой частицы (системы частиц) с некоторым макроскопическим классическим объектом, который называется *прибором*. Количественные результаты анализа такого акта взаимодействия есть не что иное, как *результаты измерений*.

При этом предполагают, что результаты измерений не содержат погрешностей в их обычном (метрологическом) понимании. Измерения, в которых погрешности отсутствуют (могут быть исключены расчётом или сделаны пренебрежимо малыми) будем называть *идеальными измерениями*. Дальнейшее обсуждение особенностей и результатов измерений относится только к идеальным измерениям.

Измерения в классической механике имеют *следующие особенности*:

1. Процесс измерения протекает на макроскопическом уровне.
2. Всегда имеется возможность строго разделить объект измерения и измерительный прибор.
3. Прибор не влияет на объект измерения и не возмущает исследуемое состояние движения. Иными словами, объект измерения (микрочастица) и исследуемое явление (состояние движения) всегда выступают как абсолютные понятия по отношению к средствам измерений.
4. Результатами классических измерений всегда являются достоверные (реализующиеся в процессе измерения с вероятностью 1) численные значения динамических переменных.
5. Не существует взаимоисключающих классических измерений. Классические измерения всех динамических переменных могут быть выполнены одновременно и со сколь угодно высокой степенью точности. В связи с этим принято говорить, что все классические измерения совместны.

В силу упомянутых особенностей классических измерений состояние движения в классической механике считается в каждый момент времени определённым, если имеют определённые значения все динамические переменные, характеризующие систему.

В квантовой механике, где объектом исследования являются микрочастицы, картина результатов измерений не выглядит столь просто и однозначно, как в механике классической.

В то время как результатами классических измерений всегда являются достоверные числа, только некоторая часть результатов квантовых измерений может быть представлена в такой же форме. Вместе с тем существует и другая их часть, имеющая совершенно неклассические особенности. Эти особенности состоят в том, что, во-первых, *прибор оказывает на объект настолько ощутимое воздействие, что его никак нельзя считать пренебрежимо малым* и, во-вторых, *это воздействие является случайным по своему характеру*. К измерительным опытам такого рода относятся, прежде всего, опыты по дифракции микрочастиц (электронов, протонов, нейтронов и др.). Рассмотрим простейший* из таких опытов.

Пусть есть параллельный монохроматический поток электронов. Мы знаем, что электроны в потоке имеют одинаковый по величине и направлению импульс. Будем говорить в таком случае, что все электроны находятся в определённом *состоянии* поступательного движения. (В дальнейшем, ради краткости, будем употреблять только термин «состояние»).

Пусть далее электроны (см. рисунок 1) проходят сквозь прямую узкую бесконечную щель в некоторой плоской диафрагме Д и затем засвечивают фотоплёнку Ф, расположенную параллельно диафрагме.

* Рассматривается опыт, идеализированный в сторону упрощения его картины. Реальные опыты такого рода выполняются не на отдельной щели, а на кристаллической решётке, рассматриваемой в качестве дифракционной.

Диафрагма D может рассматриваться как прибор, фильтрующий из падающего потока частицы с заранее заданной координатой и показывающий с неопределённостью Δx значение x — координаты частицы в момент её прохождения через щель.

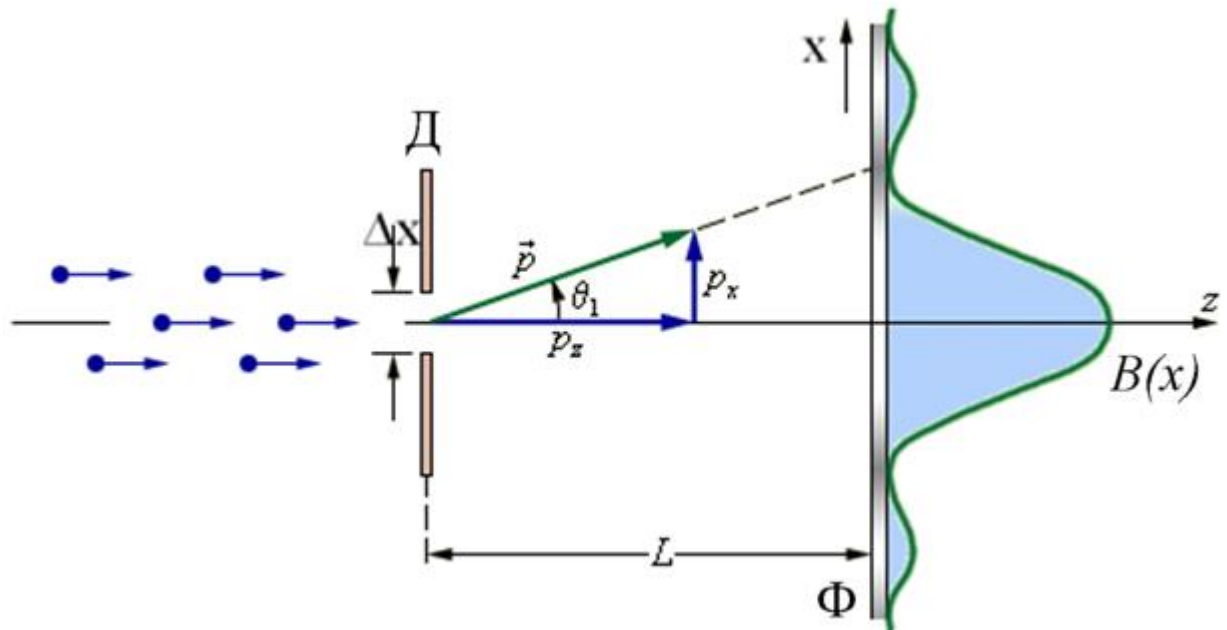


Рис. 1. Дифракция электронов на щели.

D — диафрагма; Φ — фотопластинка; $B(x)$ — график распределения степени почернения по оси x ; Δx — ширина щели

Опыт показывает, что если щель достаточно узка, а число зарегистрированных электронов очень велико ($N \rightarrow \infty$), то на фотопластинке регистрируется не изображение щели, а непрерывное распределение $B(x)$ степени почернения B , имеющее вид дифракционной картины.

При малом числе N зарегистрированных электронов (это возможно при малой плотности потока и малом времени экспозиции) дифракционная картина перестаёт быть непрерывной и складывается из множества отдельных засвеченных точек, каждая из которых возникает при попадании в неё электрона.

Особенность этих точек состоит в том, что их появление на фотопластинке невозможно заранее предсказать. Оно совершенно случайно и

свидетельствует о том, что воздействие измерительного прибора (диафрагмы Д) на отдельную частицу не является ни малым, ни полностью контролируемым.

Причина этой неконтролируемости неизвестна. Можно лишь предположить, что неконтролируемое (случайное) воздействие возникает потому, что в процессе измерения исследуемая частица и прибор образуют на микроскопическом уровне составную систему, внутри которой невозможно строго разделить измеряемый объект и измерительный прибор и однозначно предсказать поведение системы в процессе измерения.

Случайное возмущение, вносимое прибором, приводит к тому, что и результаты измерений (по крайней мере, некоторые) приобретают характер случайных величин. Последние, как известно, характеризуются не только численным значением измеряемой величины, но и вероятностью реализации этого численного значения. Необходимость указывать в результатах измерений не только численное значение динамической переменной, но и соответствующую ему вероятность, означает переход на статистическую форму представления результатов измерений. При этом основной целью измерений становятся функции распределения (статистические распределения) динамических переменных и численные характеристики этих функций.

Подводя итог обсуждению картины результатов квантовых измерений, можно отметить, что все эти результаты можно подразделить на *случайные и достоверные*.

Случайные результаты могут быть представлены только в статистической форме и теоретически объяснены только с помощью понятий и методов теории вероятностей и математической статистики.

Форма представления *достоверных результатов* измерений может быть двоякой.

Во-первых, возможна статистическая (с помощью функций распределения) форма представления этих результатов. Эта возможность существует потому, что достоверная величина определена в теории вероятностей как случайная величина, вероятность реализации которой (в про-

цессе испытаний) равна единице. Из этого определения видно, что понятие достоверной величины не только не противоречит понятию случайной величины, но может рассматриваться как частный (или, если угодно, предельный) случай последнего. Следовательно, достоверные результаты измерений, как и случайные, могут быть объяснены в рамках единой теории, которая должна быть обязательно статистической в своей основе.

Во-вторых, достоверные результаты измерений могут быть представлены в форме одних только численных значений без указания вероятности реализации этих чисел, поскольку эта вероятность заранее известна и всегда равна единице. Такая форма представления результатов характерна для классической физики и, в том числе, для классической механики. Эта форма не приемлема в случае квантовых измерений (измерений над микросистемами), так как она не охватывает всех результатов измерений.

Из изложенного следует, что в случае квантовых измерений статистическая форма представления результатов измерений является единственно возможной. Соответственно, теория, объясняющая такие результаты (а это квантовая механика), должна основываться на понятии вероятности и быть статистической теорией.

Обратим далее внимание на то, что процесс измерения (процесс взаимодействия частицы с прибором) занимает ограниченное время, в течение которого и формируются результаты измерений.

Для классических измерений характерно, что прибор никогда и никак не возмущает исследуемое состояние движения: оно остаётся одинаковым до, в процессе и после измерения. Именно поэтому в случае классических измерений существует взаимно-однозначное соответствие между непосредственно предшествующим измерению состоянием и измеренными численными значениями динамических переменных. В результате появляется возможность утверждать, что классическое состояние движения в каждый момент времени определено, если имеют определённые значения динамические переменные, характеризующие систему. Кроме того, абсолютная независимость классических состояний

движения от средств измерений позволяет существенно упростить картину (рисунок 2) связи между исследуемым состоянием и результатами измерений, исключив из неё измерительный прибор.



Рис. 2. Картина связи исследуемого динамического состояния с результатами измерений, характерная для классической механики.

Другое упрощение этой картины состоит в отсутствии случайных величин и, следовательно, случайных состояний.

$x = \{x_1, x_2, \dots x_n\}$ — обобщённые координаты;

$p = \{p_1, p_2, \dots p_n\}$ — обобщённые импульсы;

E — полная механическая энергия

В связи с обсуждаемой картиной оговорим более подробно роль обобщённых координат и обобщённых импульсов.

Опыт показывает, что одновременное задание всех обобщённых координат и импульсов полностью определяет состояние классической системы и позволяет в принципе предсказать её дальнейшее движение (*гамильтонов формализм в классической механике*). Это означает, что понятия обобщённых координат и обобщённых импульсов важны для теории не менее чем для эксперимента: в эксперименте на языке этих понятий могут быть представлены результаты измерений, а в теории оба понятия играют первостепенную роль как независимые переменные, позволяющие описывать состояния и их эволюцию во времени.

Заметим также, что применение обобщённых координат и обобщённых импульсов в качестве независимых переменных возможно ещё и

потому, что они подчиняются **принципу линейной суперпозиции** (то есть преобразуются линейно, образуют линейное векторное пространство). Нетрудно осознать, что нарушение принципа суперпозиции сделало бы невозможным формулировку основных законов механики в линейной форме и заставило бы отказаться от теоретического описания динамических состояний в терминах координат и импульсов (несмотря даже на наличие взаимоднозначного соответствия между состоянием и результатами измерений координат и импульсов).

В экспериментах с микрочастицами (квантовых экспериментах) картина связи состояния, подвергаемого исследованию прибором, с результатами измерений выглядит значительно сложнее, чем в классической механике (рис. 3).

В эту картину обязательно входит прибор, который (в общем случае) возмущает исследуемое состояние и переводит его в другое состояние, соответствующее окончанию процесса измерения. Это второе состояние находится во взаимоднозначном соответствии с результатами измерений, представленными в форме статистических распределений.

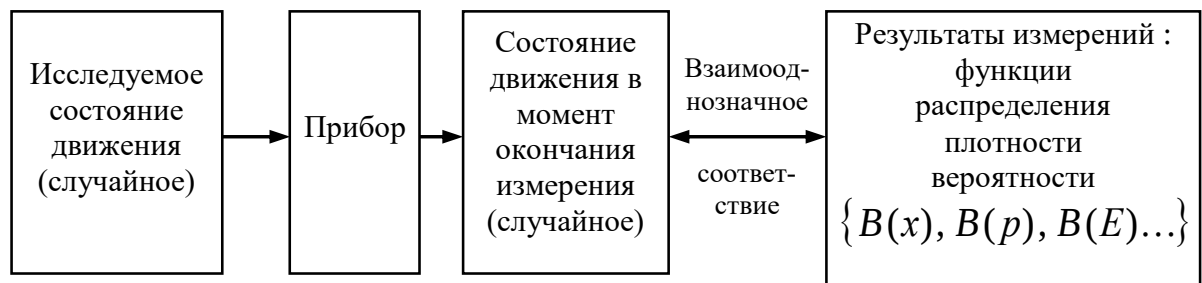


Рис. 3. Картина связи исследуемого состояния с результатами измерений, характерная для квантовых измерений.

Квантовые состояния (до и после измерения) рассматриваются, в общем случае, как *случайные*, так как *случайное воздействие на микрочастицу имеет место не только в процессе измерения, но и в процессе приготовления квантового состояния*. Соответственно, каждому состоянию можно поставить во взаимоднозначное соответствие некоторое

множество функций распределения, часть которого образуют взаимонезависимые функции, в принципе содержащие в себе всю информацию о исследуемом состоянии.

В заключение отметим, что функции распределения не подчиняются в общем случае принципу линейной суперпозиции. В подтверждение сошлёмся на результаты опыта по дифракции электронов на двух параллельных щелях. Схема этого опыта такая же, как на рисунке 1 с единственной разницей: диафрагма D прорезана не одной, а двумя параллельными бесконечными щелями. Известно, что распределение интенсивностей $I_{12}(x)$ регистрируемое при двух открытых щелях, не является суммой двух распределений интенсивностей $I_1(x)$ и $I_2(x)$, регистрируемых при одной (первой или второй) открытой щели: $I_{12}(x) \neq I_1(x) + I_2(x)$.

Невозможность представления функций распределения в виде линейных комбинаций (суперпозиций) может рассматриваться как осложняющее обстоятельство, не позволяющее теоретически рассматривать (задавать, описывать) квантовые состояния движения непосредственно с помощью функций распределения.

Из приведённого рассмотрения картины связи квантовых состояний с результатами измерений следует, что при построении квантовой теории предстоит рассмотреть (как минимум) две проблемы, отсутствовавшие в классической теории: учесть возмущающее действие прибора и преодолеть затруднение, связанное с тем, что статистические результаты квантовых измерений не удовлетворяют принципу линейной суперпозиции.

§ 1.3. Функции распределения численных значений динамических переменных и их числовые характеристики

Ввиду неизбежности представления результатов квантовых измерений в виде статистических распределений посвятим настоящий параграф обсуждению самого понятия функции распределения.

Введём (напомним!) понятие функции распределения плотности вероятности для некоторой случайной величины* x , которая может принимать непрерывный ряд значений.

Пусть значение величины x , лежащее в интервале от x до $x + dx$, при выполнении предельно большого ($N \rightarrow \infty$) количества измерений оказалось реализовано в количестве случаев $dN(x, x + dx) = dN(x)$. Очевидно, что количество $dN(x)$ зарегистрированных случаев попадания величины x внутрь интервала $(x, x + dx)$ должно быть пропорционально как ширине dx этого интервала, так и общему числу измерений N :

$$dN(x) \sim Ndx \quad (1.3)$$

Так как величины N и dx в приведённом рассуждении рассматриваются как постоянные, вполне очевидно, что коэффициент пропорциональности $K(x)$ в формуле (1.3) зависит от x так, как зависит от x величина $dN(x)$, стоящая в левой части (1.3). Иными словами, зависимость $K(x)$ и $dN(x)$ различаются постоянным множителем Ndx . Учитывая сказанное, запишем соотношение пропорциональности (1.3) в виде равенства

$$dN(x) = K(x)Ndx \quad (1.4)$$

Очевидно, что величина $dP(x)$, определяемая как

$$dP(x) = \frac{dN(x)}{N} \quad (1.5)$$

есть вероятность того, что результат измерения величины x окажется в интервале $(x, x + dx)$. Назовём $dP(x)$ вероятностью реализации численного значения x и запишем (1.4) в виде

$$dP(x) = p(x)dx \quad (1.6)$$

Отсюда следует

$$p(x) = \frac{dP(x)}{dx} \quad (1.7a)$$

Кроме того, если учесть (1.5), то

$$p(x) = \frac{dN(x)}{Ndx} \quad (1.7b)$$

* Величина x может иметь различный физический смысл; в том числе под x может подразумеваться и декартова -координата.

Из (1.7а) видно, что $p(x)$ есть вероятность регистрации величины x в пределах интервала $(x, x + dx)$, отнесённая к единице этого интервала. Назовём $p(x)$ *плотностью распределения вероятности или дифференциальной функцией распределения вероятности*.

Плотность распределения вероятности всегда положительна и подчинена условию нормировки

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx = 1 \quad (1.8)$$

Интеграл (1.8) берётся по всей области существования* величины x , которая условно обозначена как (x_1, x_2) .

Приняв во внимание (1.5), легко понять, что условие нормировки (1.8) означает, что суммарная вероятность обнаружения значения x во всех элементарных интервалах dx , из которых состоит область существования величины x , равна единице.

Заметим, что результатом эксперимента обычно являются ненормированные функции распределения. Процедура нормировки — это чисто теоретическая процедура, применяемая при обработке экспериментальных данных с целью их приведения к некоторому логически обоснованному стандарту.

Функции распределения плотности вероятности принято описывать аналитическими выражениями и изображать графически. Примером графика функции распределения может служить кривая зависимости $B(x)$ степени почернения, приведённая на рисунке 1. Если кривая нормирована в соответствии с (1.8), то площадь под кривой распределения равна единице.

Если результатом бесконечно большого количества измерений величины x всегда (то есть с вероятностью 1) является одно и то же численное значение $x = x_1$ (установленное с неограниченной точностью, так как мы обсуждаем идеальные измерения), то такой результат измерения

*Область существования величины x есть область, к которой принадлежат все возможные результаты измерений величины x при рассматриваемых условиях выполнения измерительного опыта

называется достоверным. Функция распределения (1.7), соответствующая достоверному результату измерения $x = x_1$, очевидно, равна нулю при всех $x \neq x_1$ и отлична от нуля только при $x = x_1$. Отличное от нуля значение $p(x_1)$ не может быть конечным по величине, так как в этом случае интеграл в левой части условия нормировки (1.8) обращается в нуль. Сохранение условия нормировки возможно только в том случае, если $p(x) \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow x_1$. Функцию с перечисленными свойствами впервые ввёл в теоретическую физику П. Дирак. Её принято называть **дельта-функцией** (δ -функцией). Выпишем определяющие δ -функцию формулы:

$$\begin{cases} \delta(x - x_1) = 0 & \text{при } x \neq x_1 \\ \delta(x - x_1) = \infty & \text{при } x = x_1 \end{cases} \quad (1.9)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_1) dx = 1 \quad (1.10)$$

В качестве пределов в формуле (1.10) можно написать любые другие, между которыми находится точка $x = x_1$.

Дельта-функция не является функцией в общепринятом* математическом смысле. Она определяется не заданием её величины для всех значений аргумента, а заданием правил интегрирования её произведений с непрерывными функциями. Одно из таких правил есть формула (1.10). Другие будут рассмотрены позднее в процессе изучения математического аппарата квантовой механики.

Функции распределения, имеющие вид δ -функции, применяются для статистического описания результатов измерений в том случае, когда значения измеряемой величины образуют дискретный спектр. В случае непрерывного спектра результаты измерений описываются непрерывными, конечными знакоположительными вещественными функциями распределения плотности вероятности, определяемыми выражением (1.7).

*Введённая П. Дираком δ -функция нашла своё место в математике в рамках теории обобщённых функций (С. Л. Соболев, Л. Шварц и др.).

Рассмотренное определение (1.7) плотности вероятности было введено для **одной** непрерывно изменяющейся величины x . Оно может рассматриваться как распределение плотности вероятности в **одномерном** пространстве (где dx выполняет роль элементарного объёма). Будем называть такое распределение одномерным. Примерами одномерных распределений служат распределения $p(x), p(y), p(z)$ по одной координате; распределения $p(p_x), p(p_y), p(p_z)$ по одной компоненте импульса; распределение $p(E)$, по энергии и другие.

Определение (1.7) плотности вероятности может быть распространено на многомерный случай, если под обозначением x понимать множество $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ из n непрерывно изменяющихся случайных величин $x_1, x_2, \dots, x_n$ и интерпретировать dx как элемент объёма n мерного пространства: $dx = dx_1, dx_2, \dots, dx_n$.

Примерами многомерных распределений могут служить трёхмерные распределения:

$$p(\vec{r}) = p(x, y, z) = \frac{dN(x, y, z)}{N dx dy dz} = \frac{dP(x, y, z)}{dx dy dz} \quad (1.11)$$

$$p(\vec{p}) = p(p_x, p_y, p_z) = \frac{dN(p_x, p_y, p_z)}{N dp_x dp_y dp_z} = \frac{dP(p_x, p_y, p_z)}{dp_x dp_y dp_z} \quad (1.12)$$

$p(\vec{r})$ есть распределение по трём координатам; $p(\vec{p})$ — распределение по трём компонентам импульса.

В силу теоремы умножения вероятностей статистически независимых событий, многомерные функции распределения являются произведениями соответствующих одномерных. В качестве подтверждающих примеров приведём формулы:

$$\begin{cases} p(\vec{r}) = p(x)p(y)p(z) \\ p(\vec{p}) = p(p_x)p(p_y)p(p_z) \end{cases} \quad (1.13)$$

Если функции распределения плотности вероятности имеют (по обсуждавшимся ранее причинам) вид δ -функций, то формулы (1.13) приобретают вид:

$$\begin{cases} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0) \\ \delta(\vec{p} - \vec{p}_0) = \delta(p_x - p_{x_0})\delta(p_y - p_{y_0})\delta(p_z - p_{z_0}) \end{cases} \quad (1.14)$$

Из всех функций распределения для экспериментатора являются предпочтительными распределения по координатам, так как их регистрация осуществима наиболее просто (фотографированием). Однако, если не принимать во внимание степень сложности эксперимента по регистрации функций распределения, то между распределениями по координатам, импульсам, энергиям или другим величинам нет принципиальной разницы: в теоретическом отношении все распределения равноправны.

Числовыми характеристиками (параметрами) функций распределения плотности вероятности являются математическое ожидание (среднее значение) и дисперсия.

Математическое ожидание непрерывного одномерного распределения $p(x)$ определяют формулой

$$\langle x \rangle = \int_{x_1}^{x_2} xp(x)dx \quad (1.15),$$

где (x_1, x_2) — область определения величины x .

Математическое ожидание определяет положение (x — координату) центра распределения.

Ширина (или степень «размазанности») распределения определяется **дисперсией**:

$$D = \int_{x_1}^{x_2} (x - \langle x \rangle)^2 p(x) dx \quad (1.16),$$

Квадратный корень из дисперсии D называется **среднеквадратичным отклонением** $\sigma\langle x \rangle$:

$$\sigma = D^{1/2} \quad (1.17)$$

Последнее выражение также служит характеристикой ширины распределения.

Из формулы (1.16) видно, что чем менее результаты измерений величины x отличаются от $\langle x \rangle$, то есть чем уже распределение, тем меньше величина дисперсии (D) и среднеквадратичного отклонения (σ).

Случаю, когда результатом измерения является достоверное значение величины x , равное x_1 , соответствует функция распределения, имеющая вид δ -функции. Дисперсия (D) и среднеквадратичное отклонение такой функции распределения (σ) равны нулю, а математическое ожидание $\langle x \rangle$ совпадает с достоверно установленным значением x_1 : $\langle x \rangle = x_1$.

Числовые характеристики функций распределения являются измеримыми величинами (наряду с самими функциями распределения).

§ 1.4. Волновая функция (амплитуда вероятности)

Для того, чтобы «восстановить в правах» в качестве основного принципа теории принцип суперпозиции, в квантовой механике приходится отказаться от намерения описать состояние системы непосредственно с помощью экспериментально наблюдаемых функций распределения и начать построение теории с формулировки* следующей из далеко не очевидной аксиомы.

Состояние квантовой системы может быть полностью описано некоторой (в общем случае комплексной) функцией координат $\psi(x)$, которая удовлетворяет принципу суперпозиции и связана с плотностью распределения $p(x)$ вероятности по координатам соотношением

$$|\psi(x)|^2 = p(x) \quad 1.18$$

Определяемая таким образом функция $\psi(x)$ называется **волновой функцией в координатном представлении**. Сама волновая функция не имеет физического смысла и не наблюдаема. Однако, квадрат её модуля получает на основе соотношения (1.18) статистическое истолкование: квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности того, что система окажется в рассматриваемом состоянии (например, с заданными координатами).

Так как с течением времени состояние, а, следовательно, и волновая функция, изменяются, то волновая функция является функцией не только

*Формулировка не является окончательной. Система аксиом квантовой механики будет в окончательном виде рассмотрена во второй главе в ходе обсуждения общего математического формализма квантовой механики

координат, но и времени. В обозначениях волновой функции время t в явном виде часто не указывают, но подразумевают.

Утверждение, что волновая функция $\psi(x)$ определяет состояние системы со всей полнотой, означает, во-первых, что знание функции $\psi(x)$ позволяет вычислить функции распределения всех динамических переменных, а не одну только функцию $p(x)$ распределения по координатам. Соответствующие формулы выглядят сложнее, чем (1.18) и здесь не приводятся.

Кроме того, понятие полного описания системы предполагает, что волновая функция подчиняется уравнениям, которые позволяют по известной волновой функции начального состояния найти волновую функцию и во все последующие моменты времени.

Ранее уже говорилось, что функции распределения всех динамических переменных равноправны в теоретическом отношении. Это обстоятельство позволяет осуществить полное описание системы не только функцией $\psi(x)$, зависящей от координат и связанной с распределением $p(x)$ по координатам соотношением (1.18).

Ничуть не хуже состояние может быть описано функцией $\varphi(p)$ импульсов, связанной с распределением $p(p)$ по импульсам соотношением

$$|\varphi(p)|^2 = p(p) \quad (1.19)$$

которое формально аналогично соотношению (1.18). **Вводимая таким образом функция $\varphi(p)$ называется волновой функцией в импульсном представлении.** Действуя аналогично, можно ввести **волновую функцию $c(E_n) = c_n$ в энергетическом (дискретном) представлении.** Для этого случая соотношение, формально аналогичное (1.18) и (1.19), будет иметь вид:

$$|c_n|^2 = p(E_n) \quad (1.20)$$

Принято говорить, что волновая функция может быть записана либо в координатном, либо в импульсном, либо в энергетическом, либо в каком-либо ещё представлении. Все эти формы записи (представления) волновой функции равноправны, взаимосвязаны и могут быть преобразованы одна в другую. Такие преобразования рассматриваются в главе 3 в рамках теории представлений.

Обсудим ещё некоторые особенности волновой функции, вытекающие из условия (1.18) и условия нормировки (1.8) функции распределения $p(x)$.

Условие (1.18) выполняется всегда, независимо от того, выполнено или нет условие нормировки.

Если распределение $p(x)$ не нормировано условием (1.8), то и волновая функция также является ненормированной. Ненормированное распределение $p(x)$ определено с точностью до произвольного постоянного вещественного множителя. Учитывая, что $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ (где символ $*$) означает операцию комплексного сопряжения), с помощью (1.18) нетрудно прийти к заключению, что нормированная волновая функция определена с точностью до произвольного постоянного комплексного множителя. Иными словами, из (1.18) вытекает, что ненормированные волновые функции ψ и $c\psi$ (где c — произвольное комплексное число) соответствуют одному и тому же квантовому состоянию.

Если же распределение $p(x)$ нормировано условием (1.8), то подставив (1.18) в (1.8), получим условие нормировки волновой функции:

$$\int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx = 1 \quad (1.21),$$

где (x_1, x_2) — область определения величины x .

Волновые функции, удовлетворяющие условию (1.21), называются нормированными. Снова учитывая, что $|\psi|^2 = \psi\psi^*$, нетрудно прийти к заключению, что нормированная волновая функция определена лишь с точностью до постоянного фазового множителя вида $e^{i\alpha}$, где α — любое вещественное число. Иными словами, нормировка волновой функции не устраняет некоторого её произвола. Этот произвол состоит в том, что одному состоянию соответствуют как волновая функция ψ , так и волновая функция $e^{i\alpha}\psi$.

Решения уравнений квантовой механики, содержащих в качестве неизвестной волновую функцию, всегда содержат произвольный численный множитель (в общем случае комплексный). Это означает, что из соответствующих уравнений всегда находятся ненормируемые волновые

функции. Процедуру нормировки проводят (или не проводят) после нахождения явного вида ненормированной волновой функции.

На этом можно было бы закончить описание существенных для квантовой теории сведений о волновой функции. Продолжим, однако, начатое обсуждение, преследуя цели объяснить происхождение термина «волновая функция» и сделать некоторые замечания.

Понятие волновой функции впервые было введено Э. Шрёдингером, разработавшим в 1926 году формулировку квантовой механики, известную под названием волновой механики. Истоки последней восходят к работам Луи де Бройля, посвящённым волновым свойствам материальных частиц, а также к опытам, подтверждающим корпускулярно-волновой дуализм свойств микроматерии.

Возможность (но не необходимость!) введения термина «волновая функция» вытекает из некоторых особенностей опытов по дифракции электронов.

Первая из них состоит в том, что регистрируемые в таких опытах распределения по координатам $B(x)$ степени почернения (рис.1) имеют вид дифракционной картины. Это позволяет рассматривать процесс дифракции электронов не только как статистический, но и как волновой.

Другая особенность заключается в том, что дифракционная картина не зависит от плотности потока частиц, если общее количество частиц N , испытавших дифракцию, очень велико ($N \rightarrow \infty$). Она получается совершенно одинаковой как при большой плотности потока, так и в случае, если электроны летят практически по одному и не взаимодействуют друг с другом. Из этой особенности следует, что волновой характер движения не является коллективным эффектом, а присущ каждому отдельно взятому электрону.

Иными словами, волновыми свойствами обладает всякий отдельно взятый электрон.

Наконец, третьей особенностью опытов по дифракции электронов можно считать то, что электронные дифракционные картины ничем не отличаются от соответствующих картин, наблюдаемых в классических опытах по дифракции света. Следовательно, математическое описание

электронных состояний движения формально может быть осуществлено с помощью **волновых функций** классической волной оптики. Последние, как известно, являются, в общем случае, комплексными функциями координат и времени: $\psi(x, t)$. Они удовлетворяют принципу линейной суперпозиции: всякая линейная комбинация волновых функций есть некоторая новая волновая функция (наложение нескольких волн есть новая волна). Известно также, что степень почернения $B(x)$ дифракционной картины в окрестности точки x пропорциональна интенсивности волны, которая, в свою очередь, пропорциональна квадрату модуля волновой функции (то есть $p(x) = |\psi(x)|^2$, где $p(x)$ и $\psi(x)$ предполагаются ненормированными).

Приведённое рассмотрение особенностей дифракции электронов показывает, что возможен такой вариант рассуждений, при котором аксиому о квантовомеханической волновой функции (включая соотношение (1.18)) формулируют, отталкиваясь от понятия о классической волновой функции и трансформируя последнее с учётом необходимости совместить волновое и статистическое описания движения электронов. Этот вариант рассуждений не является, однако, ни обязательным, ни единственно возможным. Следовательно, не обязательно функцию, предназначенную для описания квантовых состояний, называть волновой. Это название оправдано лишь соображениями удобства (надо же как-то называть) и традицией (сохранено название, предложенное Э. Шрёдингером).

Термин «волновая функция» не следует понимать буквально ещё и потому, что далеко не всегда эта функция описывает волны, обнаруживаемые экспериментально по наблюдаемым дифракционным картинам.

Действительно, понятие «волновая функция» одинаково применяется как к одной частице, так и к системе частиц. В первом случае волновая функция зависит от трёх координат и описывает волну в трёхмерном пространстве. Только такие волны могут создавать наблюдаемые дифракционные картины. Во втором же случае волновая функция системы частиц содержит $3N$ координат (где N — число частиц в системе). Можно, конечно, говорить, что эта функция «описывает волну в $3N$ -мерном пространстве», но такая «волна» является уже чистой абстракцией.

Слово «функция» в названии волновой функции также не обязательно понимать буквально, то есть как непрерывное упорядоченное множество чисел: это множество может быть и дискретным.

Несовершенство термина «волновая функция» состоит, прежде всего, в его узости: термин не охватывает всего разнообразия свойств обозначаемого им математического объекта и неоправданно акцентирует внимание лишь на некоторых возможных свойствах (непрерывность, возможность волновой интерференции). В тех случаях, когда математический объект упомянутыми особенностями не обладает, термин «волновая функция» становится, по существу, не уместным, а его сохранение может нанести вред, так как провоцирует на неоправданное применение волновых аналогий.

Более удачным термином, чем «волновая функция», является термин «амплитуда вероятности». Оба термина обозначают один и тот же математический объект и потому могут рассматриваться как синонимы. Термин «амплитуда вероятности» применяется реже, но предпочтителен, поскольку не обладает упомянутыми недостатками термина «волновая функция». Термин «волновая функция» употребляется чаще, что делается по традиции и не смотря на его недостатки. В заключение настоящего параграфа подчеркнём, что в квантовомеханической аксиоме о волновой функции существенным является лишь постулат о возможности полного описания состояния системы с помощью упорядоченного множества комплексных чисел (непрерывного или дискретного), которое подчиняется принципу линейной суперпозиции и связано с экспериментально регистрируемыми функциями распределения соотношениями вида (1.18).

§ 1.5. Принцип суперпозиции

Принцип линейной суперпозиции состоит в том, что объекты (физические или математические), на которые этот принцип распространяется, подчиняются операциям сложения и умножения на число, то есть преобразуются линейно.

Так в классической механике говорят о суперпозиции (сложении или разложении) движений потому, что обобщённые координаты и импульсы с помощью которых задаётся «сложное» состояние движения, всегда могут быть представлены в виде линейной комбинации (суммы или разности) соответствующих величин, характеризующих «простые» движения, выступающие в роли слагаемых.

В классической электродинамике говорят о суперпозиции электромагнитных полей, так как характеристики (напряжённости, потенциалы) «сложного» поля всегда могут быть представлены как линейные комбинации (суммы, разности) соответствующих характеристик «элементарных» полей.

Наконец, принципу суперпозиции подчиняются классические волны (акустические, оптические). На этом принципе основано объяснение явления интерференции волн: составление линейных комбинаций из некоторого количества «элементарных» (когерентных) волновых функций с последующим возведением в квадрат результирующей волновой функции позволяет теоретически предсказывать наблюдаемые интерференционные картины.

В квантовой механике принцип суперпозиции может быть сформулирован (формулировка П. Дирака) следующим образом [5]:

«Любое состояние можно рассматривать как результат суперпозиции (наложения) двух или многих других состояний и притом бесконечным числом способов. Наоборот, любые два или несколько состояний могут быть наложены друг на друга и, тем самым, будет получено новое состояние».

На языке волновых функций формулировка **принципа суперпозиции** такова:

Если квантовая система может находиться в состояниях, описываемых волновыми функциями $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots$, то она может находиться и в состоянии, описываемом линейной комбинацией (суперпозицией) этих функций, то есть функцией вида:

$$\psi(x) = \sum_K C_K \psi_K(x) \quad (1.22)$$

Степень значимости принципа суперпозиции как для квантовой механики, так и для физических теорий вообще, хорошо характеризует следующая формулировка П. Дирака: «Допущение суперпозиционных связей между состояниями приводит к математической теории, в которой уравнения, определяющие состояния, линейны по отношению к неизвестным» Линейный характер физической теории предпочтителен потому, что в математике существует обширный арсенал методов решения линейных уравнений различных типов (алгебраических, дифференциальных, интегральных) в то время как нелинейные теории служат источником существенных или даже непреодолимых математических трудностей.

Весьма важным является следующее замечание П. Дирака: «Представление состояния в виде результатов суперпозиции некоторого числа других состояний – это математическая процедура, которая всегда возможна и не имеет отношения к физическим условиям. Эта процедура аналогична разложению волн на компоненты Фурье. Будет ли такое разложение полезно, это зависит от конкретных физических условий в рассматриваемой задаче».

Аналогии между квантовыми состояниями микрочастиц и классическими волнами не являются полными. Будучи полезными (эти аналогии привели к созданию «волновой механики» Э. Шрёдингера), они могут, как указывает П. Дирак «привести к ошибкам». Поэтому «важно помнить, ..., что суперпозиция, которая встречается в квантовой механике, существенным образом отличается от суперпозиции, встречающейся в любой классической теории...».

Рассмотрим в заключение параграфа различие между классической и квантовой суперпозицией.

В классической физике суперпозиция колебания с самим собой приводит к новому колебанию с большей или меньшей амплитудой. В квантовой физике суперпозиция состояния с самим собой не приводит к образованию нового состояния, так как волновая функция, соответствующая состоянию определена с точностью до произвольного комплексного численного множителя.

Далее, в классической теории колебаний существует состояние покоя, рассматриваемое как колебание с нулевой амплитудой. В квантовой теории равенство нулю волновой функции означает отсутствие состояния.

Отметим ещё одно различие. Из опыта известно, что в результате интерференции двух микрочастиц с энергиями E_1 и E_2 возникает состояние, в котором энергия с той или иной вероятностью имеет либо значение E_1 либо значение E_2 . Иными словами, состояние, полученное в результате квантовой суперпозиции, характеризуется не определённым значением энергии E а зависимостью $p(E)$ вероятности появления того или иного значения энергии от самого этого значения. Зависимость $p(E)$ есть не что иное, как статистическое распределение по энергии. Из этого примера видно, что квантовый принцип суперпозиции допускает существование состояний, в которых физические величины не имеют определённых значений, а характеризуются статистическими распределениями этих значений. Следовательно, это не классические состояния, характеризующиеся вполне определёнными значениями динамических переменных, а состояния статистические, характеризующиеся функциями распределения значений динамических переменных. Из этого примера также видно, что суперпозиция квантовых состояний не приводит к появлению новых значений динамических переменных, а состоит только в перераспределении их вероятностей, в то время как в классической физике интерференция состояний всегда приводит к появлению новых значений динамических переменных.

§ 1.6. Вектор состояния

К математическим величинам, подчиняющихся принципу линейной суперпозиции, помимо чисел относятся также векторы. Поэтому полное описание состояния квантовой системы может быть осуществлено не только с помощью скалярной волновой функции, но и с помощью некоторого вектора, который будем называть *вектором состояния*.

Понятие вектора состояния имеет определённые преимущества по сравнению с понятием волновой функции.

Прежде всего отметим, что ни понятие вектора, ни операции над векторами, не зависят от какой-либо системы координат. Поэтому применение векторов в физике даёт возможность строить физическую теорию, не обращаясь к какой-либо конкретной системе координат.

Векторный математический формализм обладает высокой степенью общности в том смысле, что от него возможны переходы к многочисленным формулировкам теории в координатной форме, в основе которых лежит тот или иной выбор базиса векторного пространства.

Кроме того, векторный аппарат приводит к геометризации физики, что делает многие физические представления более простыми и наглядными.

К понятию вектора состояния можно прийти путём обобщения понятия волновой функции с помощью следующих рассуждений.

Известно, что упорядоченная последовательность чисел может рассматриваться как множество проекций некоторого вектора. Например, если разложение вектора $\vec{a}$ по ортогональным базисным векторам $\vec{e}_i$ имеет вид

$$\vec{a} = \sum_i a_i \vec{e}_i; \quad (i = 1, 2, 3),$$

то вектору $\vec{a}$ в выбранном базисе соответствует упорядоченная последовательность трёх чисел (a_1, a_2, a_3) .

В общем случае такая последовательность может быть, как дискретной, так и непрерывной (функциональной), иметь конечную или бесконечную размерность. В частности, непрерывная числовая последовательность (функция) всегда бесконечномерна.

Известно также, что если один и тот же вектор разлагать на составляющие в разных базисах, то числовые последовательности, характеризующие этот вектор, в разных базисах различны.

Отталкиваясь от этих сведений и перенося (обобщая) их на случай как дискретных, так и непрерывных (функциональных) последовательностей чисел, можно утверждать, что каждая из упомянутых волновых

функций $\Psi(x)$, $\varphi(p)$, $c(E)$ является множеством проекций некоторого вектора состояния на базисные векторы абстрактного **бесконечномерного пространства**. При этом значения, принимаемые функцией $\Psi(x) = \Psi(x_1, x_2, \dots, x_n)$ являются составляющими данного вектора по некоторой системе ортогональных осей координат. Аналогично значения, принимаемые функцией $\varphi(p) = \varphi(p_1, p_2, \dots, p_n)$ в каждой точке импульсного пространства, являются составляющими того же самого вектора по другой системе ортогональных осей координат. То же относится и к волновой функции $c(E)$ в энергетическом представлении.

Не будем развивать далее понятие вектора состояния, так как в настоящей главе не ставится задача последовательного изложения математического аппарата квантовой механики, а обсуждаются лишь предпосылки для его построения. Ограничимся постулатом о том, что каждому состоянию движения можно сопоставить некоторый вектор в абстрактном линейном бесконечномерном пространстве и отложим до второй главы обсуждение алгебры векторов состояния.

§ 1.7. Динамические переменные и операторы в квантовой механике

Названием «динамические переменные» как в классической, так и в квантовой механике объединяются такие физические величины, как координаты, импульсы, моменты импульса, энергия. Уже подчёркивалось, что результаты измерений динамических переменных в обеих механиках представляются в разных формах. Если в классической механики результатами измерений являются только численные значения динамических переменных, то в квантовой механике помимо численных значений динамических переменных измеряются ещё и вероятности их реализации. Последнее приводит к представлению результатов квантовых измерений в форме статистических распределений.

Любое квантовое состояние, как предшествующее измерению, так и возникшее в результате измерения, с точки зрения экспериментатора

характеризуется некоторым количеством функций распределения, содержащих полную информацию о исследуемом состоянии.

Опыт показывает, что каждая функция распределения по какой-либо динамической переменной претерпевает (в общем случае) изменение под воздействием измерительного прибора. Эти изменения можно изобразить в виде следующей схемы:

$$p_0(x) \rightarrow p(x); \quad p_0(p) \rightarrow p(p); \quad p_0(E) \rightarrow p(E);$$

(Здесь индексом «ноль» помечены функции распределения, предшествовавшие измерению. Функции распределения, получившиеся после измерения, индекса не имеют).

С теоретической точки зрения функции распределения не пригодны для полного описания квантового состояния, так как они не удовлетворяют принципу линейной суперпозиции. Вместо них с помощью нелинейной операции возведения в квадрат по модулю (то есть с помощью соотношения вида (1.18)) в теорию вводится понятие волновой функции, что «восстанавливает в правах» принцип суперпозиции. С точки зрения теоретика удобнее считать, что под воздействием прибора преобразуются не функции распределения, а волновые функции. Эти преобразования можно представить в виде схемы, аналогичной предыдущей:

$$\Psi_0(x) \rightarrow \Psi(x); \quad \Psi_0(p) \rightarrow \Psi(p); \quad c_0(E) \rightarrow c(E)$$

(Смысл индекса «ноль» тот же, что и в схеме преобразования функций распределения).

Кроме того, их можно записать в виде операторных соотношений:

$$X\Psi_0(x) = \Psi(x); \quad P\varphi_0(p) = \varphi(p); \quad Hc_0(E) = c(E) \quad (1.23)$$

С помощью соотношений (1.23) вводится понятие оператора. Оператор задаёт правило (операцию), по которому одна волновая функция преобразуется в другую. Из представленной схемы преобразования волновых функций ясно, что каждой измеряемой динамической переменной в квантовой механике соответствует *свой* оператор. Операторы будем в дальнейшем обозначать заглавными буквами: X — оператор координаты; P — оператор импульса; H — оператор энергии или оператор Гамильтона.

Помимо операторов динамических переменных в квантовой механике применяют и другие операторы, не имеющие отношения к измерениям. Поэтому ясно, что операторы, соответствующие измеряемым величинам, должны удовлетворять неким особым требованиям, не обязательным для прочих операторов. Не обсуждая пока этих требований, отметим лишь, что все операторы квантовой механики должны быть линейными, чтобы не нарушать принцип суперпозиции. Требование линейности означает, что для всякого оператора F должны выполняться соотношения вида:

$$\begin{aligned} F(\Psi_1 + \Psi_2) &= F\Psi_1 + F\Psi_2 \\ F(c\Psi) &= cF\Psi \end{aligned} \quad (1.24)$$

Здесь F — линейный оператор; Ψ, Ψ_1, Ψ_2 — волновые функции; c — число (вещественное или комплексное).

Отметим далее, что возможны частные случаи, в которых квантовое измерение не сопровождается изменением исходной волновой функции, а результатом измерения является достоверное численное значение динамической переменной. В этих случаях соотношения (1.23) приобретают вид:

$$X\Psi_0(x) = x\Psi_0(x); \quad P\varphi_0(p) = p\varphi_0(p); \quad Hc_0(E) = Ec_0(E) \quad (1.25)$$

Здесь x, p, E — численные значения соответствующих динамических переменных, являющиеся достоверными результатами измерений. В теории эти числа называют собственными значениями соответствующего оператора.

Обратим ещё раз внимание на то, что одно отдельно взятое численное значение волновой функции рассматривается как проекция вектора состояния на некоторое направление в абстрактном пространстве. Тогда множество всех численных значений волновой функции полностью определяет вектор состояния, принадлежащий этому пространству. Можно сказать короче: явный вид волновой функции полностью определяет вектор состояния.

Отсюда следует, что *понятие оператора*, определяемое как правило преобразования волновых функций, *может быть без изменений распространено и на векторы состояния*.

Теперь можно говорить, что каждому динамическому состоянию сопоставляется некоторый вектор состояния, а каждой динамической переменной сопоставляется линейный оператор, действующий в пространстве векторов состояния. После введения двух этих понятий задача построения общего математического формализма квантовой механики сводится, в основном, к задаче построения алгебры векторов состояний и алгебры линейных операторов. «При таком подходе теория оказывается формально проще и элегантнее волновой механики; она к тому же имеет и более широкую область применения, так как может быть использована для изучения квантовых систем, не имеющих классических аналогов».

Разумеется, при разработке математического аппарата необходимо помнить о соответствии теоретических понятий и построений результатам наблюдений.

§ 1.8. Принцип неопределённости

Вернёмся к обсуждению опыта по дифракции электронов на щели, схема которого приведена на рисунке 1, и рассмотрим ещё одну особенность экспериментальных результатов, до сих пор не обсуждавшуюся. Эта особенность связана с функциями распределения по координате x и составляющей импульса p_x .

Нетрудно видеть, что в состоянии, предшествующем измерению, имеет место равномерное распределение частиц по x — координате, характеризующее бесконечно большим среднеквадратичным отклонением (так как по условию пучок частиц по оси x не ограничен). В то же время проекция импульса на ось x имеет достоверное значение $p_x = 0$. Это означает, что функция распределения $p_0(p_x)$ имеет вид δ -функции Дирака: $p_0(p_x) = \delta(p_x)$. (Здесь индекс «ноль» означает состояние до измерения). Среднеквадратичное отклонение такого распределения равно нулю. Таким образом, в состоянии до измерения распределение $p_0(x)$ по координатам «размазано» по оси x от $(-\infty)$ до $(+\infty)$, а у распределения $p_0(p_x)$ «размазанность» отсутствует.

По окончании взаимодействия с прибором частица оказывается в состоянии, которому соответствуют новые распределения $p(x)$ и $p(p_x)$. Из опыта видно, что эти распределения резко отличаются от тех, что предшествовали измерению. Распределение $p(x)$ имеет среднеквадратичное отклонение, сопоставимое с размером щели. Так как щель мала, то можно сказать, что это среднеквадратичное отклонение близко к нулю, а распределение $p(x)$ приближается к виду δ -функции. В то же время распределение $p(p_x)$ неравномерно «размазано» по оси p_x в пределах от $p_x = -p$ до $p_x = p$ и имеет среднеквадратичное отклонение, существенно отличающееся от нуля.

Сопоставление распределений по x — координате и p_x — составляющей импульса до и после измерения показывает, что эта пара распределений не может одновременно иметь равными нулю оба среднеквадратичных отклонения, а сами эти распределения не могут одновременно иметь вид δ -функции. Иными словами, величины x и p_x не могут иметь одновременно вполне определённых (достоверных) значений. Очевидно, это относится также к парам $y, p_y; z, p_z$, а в случае квантовых систем, содержащих несколько частиц — и к любой паре x_i, p_i сопряжённых (декартовых) переменных.

Утверждение о том, что *в один и тот же момент времени любые сопряжённые координата и импульс не могут иметь определённых значений, что значение либо одной, либо обеих упомянутых переменных обязательно являются неопределёнными*, может рассматриваться как формулировка **принципа неопределённости**.

Принцип неопределённости (для координат и импульсов) может быть записан на языке математических символов с помощью соотношений неопределенностей. Строгий вывод этих соотношений был впервые осуществлён В. Гейзенбергом. Соотношения неопределенностей Гейзенберга имеют вид:

$$\begin{cases} \Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2 \\ \Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2 \\ \Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2 \end{cases} \quad (1.26)$$

В этих формулах неопределенности $\Delta x, \Delta p_x$ и другие имеют строгий смысл среднеквадратичных отклонений.

Неравенства такого же вида можно получить и другим способом, опираясь на волновые аналогии. Если рассматривать квантовое состояние как одномерный волновой пакет, имеющий в координатном пространстве протяжённость Δx , то можно показать, что протяжённость ΔK волнового пакета в пространстве волновых чисел связана с Δx соотношением

$$\Delta x \Delta K \geq 2\pi \quad (1.27)$$

Учитывая, что $P_x = \hbar K_x$ и $h = 2\pi\hbar$, из (1.27) приходим к неравенствам:

$$\begin{cases} \Delta x \Delta p_x \geq h \\ \Delta y \Delta p_y \geq h \\ \Delta z \Delta p_z \geq h \end{cases} \quad (1.28)$$

которые отличаются от строгих неравенств В. Гейзенберга множителем 4π в правой части. Это отличие обусловлено тем, что неопределенности $\Delta x, \Delta p_x$ и др. понимаются в формулах (1.28) как протяженности волновых пакетов, а не среднеквадратичные отклонения. Так как понятие протяженности волнового пакета в соответствующем пространстве (x — пространстве, p_x — пространстве и т.д.) не является строгим, то неравенства (1.28) не являются точными. К ним следует относиться как к оценочным соотношениям. В связи с оценочным характером соотношений (1.28) в литературе также встречается их запись в виде

$$\begin{cases} \Delta x \Delta p_x \geq \hbar \\ \Delta y \Delta p_y \geq \hbar \\ \Delta z \Delta p_z \geq \hbar \end{cases} \quad (1.29)$$

которую можно рассматривать как компромиссную между формулами (1.26) и (1.28).

Так как соотношения неопределенностей используются главным образом для оценок, то обычно применяют наиболее простую форму, т.е. либо (1.28), либо (1.29).

Обсудим далее некоторые важные следствия из соотношений неопределённостей. Для этого перепишем одно из соотношений неопределённостей в виде

$$\Delta x \Delta V_x \geq \frac{\hbar}{m} \quad (1.30)$$

где $V_x = \frac{p_x}{m}$ — скорость частицы.

Из (1.30) видно, что произведение неопределённостей $\Delta x \Delta V_x$ тем ближе к нулю, чем больше масса частицы. Ввиду малости $\hbar$ и при больших m , очевидно, можно полагать $\frac{\hbar}{m} \cong 0$ или даже $\hbar \cong 0$. Тогда (1.30) переходит в соотношение $\Delta x \Delta V_x \geq 0$. Последнее означает, что координата x частицы большой массы и её скорость V_x поддаются определению одновременно и со сколь угодно высокой точностью и что возможен классический подход к описанию её механического движения.

Этот пример является иллюстрацией общего важного положения квантовой механики, называемого **принципом соответствия**: если по условию задачи можно пренебречь эффектами, пропорциональными кванту действия $\hbar$ то при переходе к пределу $\hbar \rightarrow 0$ законы и соотношения квантовой механики переходят в соответствующие законы и соотношения классической физики.

Оценки показывают, что масса может рассматриваться как большая даже для броуновских частиц ($m \sim 10^{-12}$ кг), которые являются мельчайшими макрочастицами. Следовательно, предельный переход $\hbar \rightarrow 0$ справедлив при рассмотрении любых макроскопических тел.

Однако не следует думать, что макроскопичность самой частицы является обязательным условием, при котором квантовое движение трансформируется в классическое. Понятие «по условию задачи» допускает разнообразие этих условий. Так, движение электрона в макроскопической области пространства (камера Вильсона), наблюдаемое по оставляемому им туманному следу, рассматривается как вполне классическое движение по траектории. Причина его классичности заключена не в большой массе электрона, а в низкой точности определения координат частицы. Неопределённость этих координат задана размерами капелек

жидкости, образующих туманный след, и превышает атомные размеры на несколько порядков.

Если же частица очень малой массы (например, электрон $m \cong 10^{-30}$ кг) движется в области пространства атомных (10^{-10} м) размеров, то даже считая координату x электрона заданной с очень плохой по атомным масштабам точностью $\Delta x \cong 10^{-10}$ м, получим из (1.30), что неопределённость скорости $\Delta V_x \geq 10^6$ м/с сопоставима с самой скоростью V_x . Всё это означает, что движение микрочастиц в областях пространства атомных размеров не может быть охарактеризовано вполне определёнными координатами и скоростями и не может рассматриваться как классическое движение по траектории. Для описания движений микрочастиц в микроскопических областях пространства применимы лишь квантовые представления и способы.

В заключение параграфа обсудим возможность обобщения принципа неопределенностей для координат и импульсов.

Так как сопряженные координата и импульс не могут иметь одновременно определённых значений, то вполне очевидно, что определённых значений не могут иметь и физические величины, которые являются функциями координат и импульсов: у каждой такой функции все её аргументы не могут иметь одновременно определённых значений. Отсюда следует, что определённые значения в квантовой механике могут иметь динамические переменные, являющиеся либо функциями координат, либо функциями импульсов. При этом точные значения физических величин, функционально зависящих от координат, не могут существовать (быть реализованы) одновременно с точными значениями величин, зависящих от импульсов. Всё это наводит на мысль, что возможно обобщение принципа (соотношений) неопределенностей для координат и импульсов. Это обобщение должно состоять в распространении принципа неопределенности на все возможные пары динамических переменных, не способных иметь одновременно определённых значений.

Если динамические переменные могут одновременно иметь определённые численные значения, то такие переменные называют **совмест-**

ными. Примером совместных переменных (для случая квантовой системы, содержащей одну частицу) служат координаты x, y, z , а также динамические переменные, являющиеся функциями координат. Другой пример совместных переменных образуют проекции p_x, p_y, p_z импульса и функции от них. Для совместных переменных A и B условие совместности имеет вид

$$\Delta A \Delta B \geq 0 \quad (1.31)$$

В то же время для несовместных величин A и C , в общем случае, произведение неопределенностей вещественно, конечно, положительно и пропорционально кванту действия $\hbar$:

$$\Delta A \Delta C \geq \lambda \hbar \quad (1.32)$$

где $\lambda > 0$ — некоторый вещественный численный множитель, имеющий численное значение порядка единицы.

§ 1.9. Принцип дополнительности

Если квантовая система имеет классический аналог, то при описании результатов измерений оперируют, в принципе, одними и теми же динамическими переменными (координаты, импульсы, моменты импульсов, энергии).

В классической механике все эти переменные являются совместными, поскольку их значения зависят только от состояния системы, но не зависят от прибора.

Иное — в квантовой механике. Здесь результаты измерений существенно и случайным образом зависят от условий эксперимента и типа измерительного устройства. Это приводит к тому, что всё множество упомянутых динамических переменных распадается на два подмножества, в каждое из которых входят только совместные переменные. Количество подмножеств (два, а не несколько) обусловлено существованием пар несовместных переменных в соответствии с принципом (соотношениями) неопределенностей. Оба подмножества можно считать **дополнительными** по отношению друг к другу в том смысле, что вместе они составляют то множество динамических переменных, которое необходимо

для описания результатов измерений с помощью классической терминологии.

О паре несовместных переменных, связанных соотношением неопределенностей, принято говорить, что они образуют пару *дополнительных переменных*. Примером пары дополнительных переменных являются x и p_x .

Утверждение о том, что *описание результатов экспериментальных исследований квантовой системы на классическом языке требует использования пар дополнительных переменных, причём каждый член пары определяется тем точнее, чем менее точно определяется другой*, носит название *принципа дополнительности*.

К этому можно добавить, что подобно тому, как все динамические переменные в квантовой механике могут быть разделены на два дополнительных класса, и способы математического описания квантового состояния образуют «два взаимоисключающих класса, которые являются дополнительными в том смысле, что их совокупность могла бы дать в классическом понимании полное описание состояния системы» [8].

В свете сказанного становится понятным, почему в экспериментах проявляются либо корпускулярные, либо волновые свойства микрочастиц. Эти свойства просто являются дополнительными друг к другу. Эксперимент, направленный на наблюдение волновых свойств всегда разрушает условия для наблюдения корпускулярных свойств, и наоборот.

В заключение параграфа отметим, что в квантовой механике особо важную роль играют *полные наборы совместных переменных*. Они составлены из попарно совместных переменных и обладают тем свойством, что любая другая совместная переменная является функцией переменных полного набора (Здесь напрашивается параллель с базисом векторного пространства).

Рассмотрим в качестве примера квантовую систему из одной частицы. Три координаты x, y, z образуют полный набор совместных переменных. Все прочие динамические переменные, совместные с x, y, z , есть функции вида $f(x, y, z)$. Другой полный набор, дополнительный к пер-

вому, образуют проекции импульсов p_x, p_y, p_z . Соответственно, динамические переменные, совместные с p_x, p_y, p_z , всегда есть функции вида $\varphi(p_x, p_y, p_z)$.

В квантовой механике утверждается, что *измерение полного набора совместных переменных системы даёт тот максимум информации о системе, который вообще можно получить*.

§ 1.10. Связь квантовой механики с классической. Принцип ответственности

Сравнивая формы представления результатов классических и квантовых измерений, нетрудно прийти к заключению, что, не смотря на различие этих форм, для описания как классических, так и квантовых измерений, применяется общая система понятий, заимствуемая из классической механики. К этим понятиям относятся понятие динамической переменной (координата, импульс, момент импульса, энергия и др.) и понятие вероятности реализации того или иного результата измерения. Последнее является вполне классическим и одинаково* применяется в качестве характеристики классических и квантовых результатов измерений.

Уже говорилось, что результат классического измерения динамической переменной представляется в форме вещественного числа. Чтобы дать полное представление о результатах квантового измерения динамической переменной одного числа оказывается недостаточно и поэтому вводятся новые понятия. Прежде всего, это понятие функции распределения плотности вероятности. Кроме самой функции распределения результатами квантовых измерений являются её числовые характеристики:

* Мы можем проигнорировать то обстоятельство, что существует разница в истолковании причин появления понятия вероятности в классической и квантовой механике, поскольку это не касается формы представления экспериментальных результатов.

среднестатистическое значение динамической переменной и среднеквадратичное отклонение (последнее называют неопределенностью значения динамической переменной).

Из всех понятий, применяемых для описания результатов квантовых измерений, выделим квантовые среднестатистические значения динамических переменных. Любое квантовое среднее может рассматриваться как координата центра соответствующего распределения. Например, квантовое среднее $\langle x \rangle$ есть декартова -координата центра распределения $p(x)$ и характеризует положение этого центра на оси x точно так же, как классическая x -координата характеризует положение классической частицы. Иными словами, если о классической частице мы говорим, что она находится в положении с координатой x , то о квантовой частице можно сказать, что она находится в положении с координатой $\langle x \rangle$, но «размазана» вокруг этого положения. Таким образом, классическую -координату и квантовое $\langle x \rangle$ можно рассматривать как величины, наиболее близко соответствующие друг другу, поскольку обе они выполняют роль характеристик положения частицы.

Квантовое $\langle x \rangle$ есть величина *достоверная*, если функция распределения $p(x)$ по координатам установлена с предельно достижимой точностью. Поэтому математическое описание движения центра распределения может быть осуществлено без применения понятия вероятности, то есть вполне классически. В частности, отвлекаясь от «размазанности» частицы вокруг центра распределения по координатам, можно говорить о движении этого центра как о движении частицы по траектории. Примером квантовой теории, где используется представление о движениях частиц по траекториям, является ранняя квантовая теория Бора–Зоммерфельда.

Приведённые рассуждения о квантовом среднем значении $\langle x \rangle$ легко обобщаются на всякую динамическую переменную. Это позволяет сделать общее утверждение о том, что *квантовое среднее значение всякой динамической переменной находится в тесном соответствии с численным значением соответствующей классической переменной* в том

смысле, что оба эти значения выполняют формально одинаковую роль в описании результатов измерений.

В силу упомянутого соответствия далее можно предполагать, что математическим соотношениям, существующим между классическими величинами, должны соответствовать формально аналогичные соотношения между квантовыми средними. Это соответствие и формальная аналогия должны распространяться и на операторные соотношения квантовой механики, поскольку соотношения между квантовыми средними являются следствиями операторных соотношений.

В главе вводного характера невозможно привести примеры, подтверждающие наличие соответствия между классическими и квантовыми понятиями и закономерностями, поскольку ни большинство понятий, ни математический аппарат квантовой механики ещё не рассматривались. Однако, обсуждавшиеся в настоящем параграфе предположения вполне подготавливают к восприятию встречающихся в литературе ликвидаций, подобных следующему: «... мы исходим из существования формальной аналогии между классической и квантовой теориями. Это «соответствие» прослеживается вплоть до самых тонких деталей и может служить руководящей идеей при истолковании результатов новой теории».

До сих пор подчёркивалось, что результаты квантовых измерений иногда приобретают характер случайных величин и это обстоятельство диктует необходимость вероятностного описания *всех* результатов измерений.

Теперь обратим внимание на другую особенность результатов квантовых измерений, заключающуюся в том, что иногда они способны приобретать вид дискретных числовых последовательностей. Эта дискретность обусловлена существованием постоянной Планка h .

Действительно, согласно М. Планку и Н. Бору

а) в природе не может существовать энергии монохроматического излучения, меньшей чем $E_0 = h\nu$;

б) возможны только такие состояния квантовой системы, в которых её энергия кратна наименьшей энергии (кванту) E_0 , то есть $E = nE_0$ или $E = nh\nu$, где n — целое число ($n = 1, 2, 3, \dots$);

в) при излучении или поглощении энергии система переходит из одного состояния в другое скачком, минуя промежуточные состояния. При этом сам переход из одного состояния в другое представляет собой случайное явление, характеризуемое *вероятностью перехода* (в единицу времени).

Запишем формулу $E = nh\nu$ в виде

$$E/\nu = nh \quad (1.33)$$

Формулу (1.33) можно рассматривать как общее требование, заключающееся в том, что физическая величина, имеющая размерность $\left[\frac{\text{энергия}}{\text{частота}}\right]$ или, что то же, [энергия · время] и называемая *действием* S , должна быть кратной постоянной Планка

$$h: S = nh \quad (1.34)$$

Из (1.34) следует, что постоянную Планка можно рассматривать как квант действия (то есть наименьшее действие, существующее в природе):

$$S_{\min} = h.$$

Так как кванту действия h пропорциональны энергия, импульс, момент импульса и другие физические величины, то вполне очевидно, что дискретность (квантуемость) действия влечёт за собой дискретность многих физических величин. Следовательно, дискретность действия может рассматриваться как первопричина дискретности результатов квантовых измерений.

Величина действия зависит от размеров системы, от массы и энергии, входящих в неё частиц. Если эти величины предельно малы (что может иметь место в атомных и субатомных системах), то действие S также мало и сопоставимо по порядку величины с квантом h . Из (1.34) следует, что малому действию соответствует малое (порядка единиц) значение квантового числа n и что при этом дискретность действия выражена наиболее отчётливо.

Если же действие S очень велико ($S \gg h$; $n \gg 1$), то шаг изменения действия $\Delta S = S_n - S_{n-1} = h$ мал по сравнению с самим действием и прерывность действия становится мало заметной. При предельно больших значениях квантового числа n ($n \rightarrow \infty$) дискретностью действия можно пренебречь, положив $h = 0$.

Сформулированные выводы о связи между значением квантового числа n и дискретностью (или непрерывностью) действия очевидным образом обобщаются на другие физические величины и другие квантовые числа. Можно утверждать вообще, что дискретность результатов квантовых измерений имеет место при малых значениях квантовых чисел, характеризующих состояние квантовой системы. Наоборот, при больших значениях квантовых чисел результаты квантовых измерений имеют вид величин, изменяются практически непрерывно (квазинепрерывно).

Если же действие S настолько велико, что можно положить $\hbar = 0$, прерывность становится незаметной, а квантовая система, как показывает опыт, ведёт себя как вполне классическая. Последнее означает, что результаты квантовых измерений в рассматриваемом предельном случае могут быть успешно объяснены с помощью законов классической механики. Так как квантовая теория предназначена объяснять эти же (и все возможные другие) результаты измерений, то можно утверждать, что соотношения квантовой механики в предельном случае, когда $\hbar \rightarrow 0$, должны автоматически переходить в соотношения классической механики.

Этот результат является частным случаем общего принципа теоретической физики — **принципа соответствия**. Принцип соответствия требует, чтобы всякая неклассическая теория в соответствующем предельном случае переходила в классическую. Этому принципу удовлетворяет специальная теория относительности, формулы которой в пределе $c \rightarrow \infty$ переходят в формулы ньютоновской механики. Точно также и формулы квантовой механики в пределе $\hbar \rightarrow 0$ переходят в формулы классической механики.

Подводя итог обсуждению взаимоотношений квантовой механики с классической, можно сказать, что своеобразие этих взаимоотношений состоит в том, что квантовая механика не только содержит в себе классическую механику как предельный случай, но и нуждается в последней для своего обоснования.

§ 1.11. Принцип причинности в квантовой механике

В классической механике принцип причинности находит своё выражение в том, что по известным динамическим переменным начального состояния и заданному закону взаимодействия можно (с помощью основного уравнения динамики) однозначно предсказать все динамические переменные любого последующего состояния. Иными словами, причинность в классической механике понимается как однозначная предопределённость эволюции значений всех динамических переменных. Такое понимание причинности носит название лапласовского детерминизма.

В квантовой механике заданное значение некоторой динамической переменной и определённый закон взаимодействия не определяют однозначно значение этой физической величины в последующие моменты времени, так как поведение отдельной микрочастицы определяется закономерностями статистического типа. В связи с этим иногда говорят о нарушении принципа причинности в квантовой механике. При этом всегда подразумевается понимание причинности по Лапласу.

Между тем, понимание детерминизма по Лапласу отличается от понимания причинности в философско-методологическом смысле. В философии принцип причинности рассматривается как принцип объективной взаимосвязи и взаимообусловленности явлений материального мира. Принятая в философии формулировка принципа причинности не содержит требования обязательной однозначной предсказуемости количественных характеристик явления. Конечно, такая предсказуемость свидетельствует о детерминированности явления в философско-методологическом смысле, но не является единственно возможной формой проявления причинно-следственных связей.

Философский принцип причинности в квантовой механике, конечно, не нарушается, но проявляется в иной по сравнению с классической механикой форме. Состояние микрочастицы после «приготовления», то есть начальное состояние, уже является статистическим. Оно считается известным, если задана волновая функция $\Psi(\vec{r}, 0)$ в начальный

момент времени $t = 0$. Если задан закон взаимодействия, то в квантовой механике, с помощью основного уравнения динамики (уравнения Шрёдингера) можно однозначно предсказать волновую функцию $\Psi(\vec{r}, t)$ в любой последующий момент времени. Подчеркнём, что в интервале времени от «приготовления» начального состояния до момента последующего измерения эволюция волновой функции предопределена основным уравнением динамики вполне однозначно. Если понимать под временной эволюцией состояния именно эволюцию волновой функции, то в квантовой механике принцип причинности можно сформулировать совершенно так же, как и в механике классической, а именно в виде утверждения, что ***временная эволюция начального состояния однозначно предопределена законом взаимодействия.***

В этой формулировке только термин «состояние» в обеих механиках — квантовой и классической — истолковывается по-разному. В классической механике состояние является однозначно определённым значениями динамических переменных, а в квантовой механике состояние является статистическим и определяется заданием статистических распределений динамических переменных. Таким образом, ***причинность в квантовой механике предстаёт в промежутке между измерениями как однозначно предопределённая эволюция статистического по своей природе состояния.***

Ещё одним поводом говорить о нарушении принципа причинности в квантовой механике является то обстоятельство, что измерительный прибор в момент измерения вносит неконтролируемое возмущение в исследуемое движение микрочастицы и поэтому результат измерения какой-либо динамической переменной невозможно однозначно предсказать даже в том случае, если перед измерением эта физическая величина имела вполне определённое значение. Заметим, однако, что о непредсказуемости результата здесь говорится не в статистическом смысле, а как об отсутствии однозначной предопределённости. В статистическом же смысле этот результат вполне предсказуем, так как волновая функция, определяющая состояние частицы в момент t непосредственно перед измерением позволяет предсказать вероятность появления в результатах

измерений любого возможного значения любой динамической переменной при различных вариантах постановки измерительного эксперимента.

Таким образом, в статистическом смысле, поведение микрочастицы вполне предсказуемо как в интервале времени между приготовлением состояния и измерением, так и в результате самого измерения. Эта предсказуемость причинно обусловлена в философском смысле *характером внешнего воздействия* на микрочастицу в интервале времени от приготовления состояния до заключительного измерительного опыта и *выбором типа заключительного опыта*.

Здесь уместно напомнить, что заключительный измерительный опыт, в зависимости от способа его реализации, всегда направлен на измерения статистического распределения какой-либо динамической переменной. *Полный измерительный опыт* состоит из совокупности опыта по приготовлению исходного состояния и всех возможных измерительных опытов, направленных на получение статистических распределений различных физических величин.

В заключение отметим, что утверждения о нарушении принципа причинности в квантовой механике в настоящее время перестали быть популярными. Современная точка зрения состоит в том, что основными закономерностями в природе являются закономерности статистического (а не динамического) типа. При этом вероятностная форма проявления причинно-следственных связей рассматривается как основная, а классический (лапласовский) детерминизм представляет собой лишь её предельный случай.

Вопросы для самопроверки

1. Почему классическая физическая теория оказалась не состоятельной в качестве микроскопической теории вещества и излучения?
2. Чем квантовые измерения отличаются от классических?
3. Почему в квантовой механике результаты измерений необходимо представлять в статистической форме?

4. Применение каких понятий предполагает статистическая форма представления результатов измерений? Дайте соответствующие определения.

5. Какие результаты измерений называются достоверными? Почему в квантовой механике достоверные результаты измерений представляются в статистической форме? Каковы особенности статистического представления достоверных результатов измерений?

6. Почему в классической механике статистическая форма результатов измерения (идеального измерения!) не применяется?

7. Почему в квантовую теорию необходимо вводить понятие волновой функции или вектора состояния?

8. Насколько оправдано название «волновая функция»? Всегда ли его следует понимать буквально?

9. Волновая функция (вектор состояния) и вероятность. Условие нормировки. Произвол в определении волновой функции (вектора состояния).

10. Дайте определение квантово-механического оператора. Почему в квантовой механике каждой динамической переменной соответствует свой оператор?

11. Что означает термин «линейный оператор»? Почему операторы квантовой механики должны быть линейными?

12. Принцип неопределенности: математическая запись принципа неопределенности и её логические следствия.

13. Принцип дополнительности. Какие переменные называются дополнительными, совместными? Что такое полный набор совместных переменных? Приведите примеры.

14. Нарушается ли принцип причинности в квантовой механике?

15. Охарактеризуйте взаимоотношения классической и квантовой механик. Сформулируйте принцип соответствия.

Глава 2. Введение в общий математический формализм квантовой механики

§ 2.1. Математическая формулировка принципа суперпозиции. Кет*- векторы

В соответствии с принципом суперпозиции состояния можно как-то складывать, получая новые состояния.

Математическое описание суперпозиции состояний может быть реализовано, если состояния будут связаны с такими математическими величинами, которые можно линейно складывать между собой и получать величины того же рода. Наиболее простыми и известными из таких величин являются векторы.

Векторы, которые предназначены для описания квантовых состояний, понимаются в квантовой механике в максимально обобщённом смысле, а именно как векторы в некотором абстрактном комплексном пространстве. При этом постулируется (аксиома 1 квантовой механики), что состояние a описывается вектором состояния (обозначим его $|a\rangle$ и назовём кет-вектором), который определён с точностью до произвольного численного (комплексного) множителя. Последнее означает, что состояние определяется только направлением вектора состояния.

Приведённая формулировка аксиомы 1 квантовой механики не является окончательной и будет уточнена в следующем параграфе. Обозначение $|a\rangle$ для вектора состояния и название «кет-вектор» предложены П. Дираком и в настоящее время являются если не общепринятыми, то широко применяемыми в квантовой механике.

Обсудим свойства кет-векторов. Кет-векторы образуют линейное векторное пространство: всякая линейная комбинация нескольких кет-

* В дальнейшем, наряду с названием «кет-вектор» будет введено название «бра-вектора». Термины «бра» и «кет» ведут происхождение от английского слова *bracket* (скобка). Они представляют собой первую и вторую половины этого слова.

векторов является кет-вектором. Пусть, например, задана дискретная последовательность кет-векторов $|i\rangle$ и произвольные комплексные числа λ_i . Тогда линейная комбинация

$$|v\rangle = \sum_{i_1}^{i_2} \lambda_i |i\rangle \quad (2.1)$$

есть вектор, принадлежащий пространству кет-векторов.

В случае если индекс суммирования ξ изменяется непрерывно, линейная комбинация векторов $|\xi\rangle$ образующих непрерывную последовательность, записывается в виде интеграла

$$|u\rangle = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \lambda(\xi) |\xi\rangle d\xi \quad (2.2)$$

и даёт вектор $|u\rangle$, принадлежащий пространству кет-векторов. Имея в виду равенства вида (2.1) или (2.2), будем говорить, что вектор $|v\rangle$ есть линейная комбинация (или линейная суперпозиция) векторов $|i\rangle$ а вектор $|u\rangle$ — линейная комбинация (суперпозиция) векторов $|\xi\rangle$.

Кет-векторы из некоторой совокупности называются **линейно независимыми**, если ни один из них не может быть представлен в виде линейной комбинации остальных векторов этой совокупности.

Если пространство кет-векторов содержит n линейно независимых векторов, то все остальные векторы этого пространства могут быть представлены в виде линейной комбинации n упомянутых векторов. Совокупность n линейно независимых векторов образует **базис** векторного пространства, а их число n называется размерностью векторного пространства. Особый интерес представляют ортонормированные базисы. Как и в трёхмерном евклидовом пространстве, в пространстве кет-векторов существует бесконечно большое количество ортонормированных базисов.

В квантовой механике линейно-независимые («базисные») векторы, как правило, образуют бесконечную (счётную или непрерывную) последовательность.

§ 2.2. Скалярное произведение. Бра-векторы

Введём далее понятие скалярного произведения векторов состоя-
ния.

Будем исходить из определения скалярного произведения для век-
торов в вещественном векторном пространстве. Это определение (в не-
котором ортонормированном базисе) записывается в виде:

$$\varphi = \vec{a}\vec{b} = \sum_{i=1}^n a_i b_i \quad (2.3)$$

В частном случае $\vec{b} = \vec{a}$ из (2.3) следует:

$$\vec{a}^2 = a^2 \quad (2.4)$$

Последнее означает, что квадрат вещественного вектора равен
квадрату его модуля и является вещественным числом.

Определение (2.3) не может быть автоматически распространено на
векторы в комплексном пространстве, так как квадрат комплексного век-
тора есть комплексное число и не равен квадрату его модуля, то есть со-
отношение вида (2.4) для комплексных векторов не выполняется.

Это означает, что применение определения скалярного произведе-
ния в виде (2.3) к комплексным векторам, лишает смысла понятие «квад-
рат модуля (норма) вектора». Чтобы сохранить это понятие в комплекс-
ном векторном пространстве, необходимо отказаться от определения
(2.3) и дать новое, более общее определение скалярного произведения,
которое не лишало бы смысла понятие "квадрат модуля вектора" и со-
держало бы в себе определение (2.3) как частный случай. Разумеется,
необходимо ввести и новое обозначение скалярного произведения.

Определение скалярного произведения, общее для комплексных и
вещественных векторов, имеет вид:

$$\varphi = (\vec{a}\vec{b}) = \sum_{i=1}^n a_i^* b_i \quad (2.5)$$

где значком (*) обозначена операция комплексного сопряжения.

Скобки в обозначении скалярного произведения $(\vec{a}\vec{b})$ есть признак скалярного произведения как комплексных, так и вещественных векторов, в то время как обозначение $\vec{a}\vec{b}$ скалярного произведения (без скобок) относится только к вещественным векторам.

Нетрудно видеть, что правая часть (2.5) может также рассматриваться как результат умножения матрицы — строки $\{a^+\} = \{a_1^*, a_2^*, \dots, a_n^*\}$ на матрицу — столбец:

$$\{b\} = \begin{Bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{Bmatrix}$$

Если прибегнуть к записи компонент вектора либо в виде матрицы-строки, либо в виде матрицы-столбца, то операцию сопряжения матриц (обозначаемую символом $+$) можно распространить на векторы, а сами понятия вектора и матрицы объединить в единое понятие (сохраним за ним название «вектор»).

Отождествим кет-вектор с вектором, компоненты которого записываются в виде матрицы столбца:

$$|a\rangle = \begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{Bmatrix}$$

Вектор $\langle b|$, компоненты которого являются комплексно сопряжёнными компонентам вектора $|b\rangle$ и записываются в виде матрицы строки, назовём бра-вектором и обозначим

$$\langle b| = \left\{ b_1^*, b_2^*, \dots, b_n^* \right\}$$

(Напомним, что символом $(*)$ обозначена операция комплексного сопряжения).

Операцию сопряжения векторов будем обозначать, как и для матриц, знаком $(+)$. Как и для матриц, операция $(+)$ означает замену вектора-

столбца на вектор-строку с одновременной заменой компонент исходного вектора на комплексно сопряжённые.

После того, как операция сопряжения для векторов состояния определена, можно утверждать, что всякому кет-вектору $|a\rangle$ состояния a соответствует сопряжённый бра-вектор $\langle a|$ того же состояния: $|a\rangle = \left| a^+ \right\rangle$. И наоборот: всякому бра соответствует сопряжённый кет: $\langle a| = \left| a^+ \right\rangle$.

Определение скалярного произведения векторов состояния в обозначениях Дирака записывается в виде

$$\varphi = \langle a | b \rangle = \sum_{i=1}^n a_i^* b_i \quad (2.6)$$

где $a_i^* \equiv a_{1i}^*$; $b_i = b_{i1}$ (в обозначениях, a_{1i}^* , b_{i1} первый из индексов есть номер строки, второй – номер столбца). Определение (2.6) по существу не отличается от (2.5). Изменено лишь обозначение скалярного произведения: общепринятое в математике обозначения $(\vec{a} | \vec{b})$ заменено на обозначение $\langle a | b \rangle$, введённое Дираком.

Введение в теорию двух типов векторов (бра и кет) обязывает уточнить формулировку аксиомы 1 квантовой механики. Сформулируем эту аксиому в её окончательном виде следующим образом: *состояние a (a — индекс состояния) квантовой системы описывается как кет-вектором $|a\rangle$, так и сопряжённым бра-вектором $\langle a| = \left| a^+ \right\rangle$, каждый из которых определён с точностью до произвольного численного (комплексного) множителя.*

Из определения (2.6) скалярного произведения могут быть выведены все свойства бра-векторов. Рассмотрим их более подробно.

Во-первых, из (2.6) видно, что если скалярное произведение $\varphi = 0$ для всех возможных кет-векторов $|a\rangle$ то бра-вектор $\langle b| = 0$.

Во-вторых, обратим внимание на то, что скалярное произведение (2.6) удовлетворяет распределительному (дистрибутивному) закону умножения в отношении каждого из сомножителей, то есть

$$\langle m | \{ |a\rangle + |b\rangle \} = \langle m | a \rangle + \langle m | b \rangle \quad (2.7)$$

$$\{\langle a| + \langle b|\} |n\rangle = \langle a|n\rangle + \langle b|n\rangle \quad (2.8)$$

Кроме того, умножение на численные множители подчинено обычным алгебраическим аксиомам:

$$\langle b|\{c|a\rangle\} = c\langle b|a\rangle \quad (2.9)$$

$$\{c\langle b|\}|a\rangle = c\langle b|a\rangle \quad (2.10)$$

где c — число (в общем случае, комплексное).

Соотношения (2.7), (2.8), (2.9), (2.10) означают, что **линейная комбинация бра-векторов есть бра-вектор**. Иными словами, для бра-векторов существуют линейные комбинации, аналогичные по структуре соотношениям (2.1) и (2.2):

$$\langle v| = \sum_{i_1}^{i_2} \alpha_i \langle i| \quad (2.11)$$

$$\langle u| = \int_{\xi_2}^{\xi_1} \alpha(\xi) \langle \xi| d\xi \quad (2.12)$$

Тот факт, что линейная комбинация бра-векторов позволяет получить только бра-векторы, но не позволяет получить кет-вектор, означает, что бра- и кет-векторы принадлежат к различным векторным пространствам. Пространство бра-векторов называют **дуальным пространством** по отношению к пространству кет-векторов.

Применим операцию сопряжения к скалярному произведению (2.6). Получим:

$$\varphi^+ = \langle b|a\rangle^+ = \langle a|b\rangle \quad (2.13)$$

Так как φ и φ^+ комплексные числа, то для них операция сопряжения может быть истолкована только как комплексное сопряжение: $\varphi^+ = \varphi^*$, или

$$\langle b|a\rangle^+ = \langle b|a\rangle^* = \langle a|b\rangle \quad (2.14)$$

Что касается бра- и кет-векторов, то по отношению к ним операция сопряжения означает процедуру, позволяющую ставить во взаимно-однозначное соответствие векторы $|a\rangle$ и $\langle a|$, относящиеся к одному и тому же квантовому состоянию. Чтобы выяснить характер упомянутого соответствия для векторов $|a\rangle$ и $\langle a|$, предположим, что

$$|a\rangle = \lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle \quad (2.15)$$

и подставим (2.15) в правую часть (2.14). Тогда получим

$$\langle b|a\rangle^+ = \{\lambda_1^+ \langle 1| + \lambda_2^+ \langle 2|\} |b\rangle \quad (2.16)$$

Т.к. λ_1, λ_2 — комплексные числа, то $\lambda_1^+ = \lambda_1^*$ и $\lambda_2^+ = \lambda_2^*$ и поэтому

$$\langle b|a\rangle^+ = \{\lambda_1^* \langle 1| + \lambda_2^* \langle 2|\} |b\rangle \quad (2.17)$$

Сопоставляя правые части выражений (2.14) и (2.17), получаем

$$\langle a| = \lambda_1^* \langle 1| + \lambda_2^* \langle 2| \quad (2.18)$$

Сопоставляя (2.15) и (2.18), видим, что операция сопряжения для бра- и кет-векторов устанавливает взаимно-однозначное соответствие между сопряжёнными $|a\rangle$ и $|a\rangle^+ = \langle a|$, определяемое соотношениями (2.15) и (2.18). Принято говорить, что скалярное произведение $\langle a|b\rangle$ зависит линейно от b и **антилинейно** от $\langle a|$ или что взаимно-однозначное соответствие между $|a\rangle$ и $\langle a|$ **антилинейно**. Существование антилинейного взаимно-однозначного соответствия между сопряжёнными бра- и кет-векторами позволяет уточнить коэффициенты разложения α_i и $\alpha(\xi)$ в формулах (2.11), (2.12) и придать формулам (2.11), (2.12) следующий вид

$$\langle v| = \sum_{i_1}^{i_2} \lambda_i^* \langle i| \quad (2.19)$$

$$\langle u| = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \lambda^*(\xi) \langle \xi| d\xi \quad (2.20)$$

Разложения (2.19), (2.20) находятся во взаимно-однозначном соответствии с разложениями (2.1) и (2.2). Из сопоставления формул (2.1) и (2.19) или (2.2) и (2.20) особенно ясно видно, что операция сопряжения, применяемая к векторам кет (или бра), состоит в том, что в рассматриваемых линейных комбинациях векторов все исходные векторы заменяются на сопряжённые, а все исходные комплексные числа заменяются на комплексно-сопряжённые.

§ 2.3. Линейные операторы

В общем случае можно утверждать, что в процессе квантового измерения микрочастица переводится из состояния, предшествовавшего измерению, в новое состояние, зависящее от типа измерительного опыта. Это состояние зависит, в частности, от того, какая динамическая переменная подвергается измерению.

На языке векторов состояний это означает, что исходному состоянию соответствует некоторый кет $|u\rangle$, а состоянию после измерения — новый кет $|v\rangle$, причём в процессе измерения осуществляется операция A перевода состояния $|u\rangle$ в состояние $|v\rangle$. В этом случае пишут

$$|v\rangle = A|u\rangle \quad (2.21)$$

Оператор A соответствует измеряемой динамической переменной. Он должен быть обязательно **линейным**, чтобы не нарушался основной принцип квантовой механики — принцип суперпозиции. В дальнейшем будет показано (§ 2.5; 2.6), что линейный оператор A , ставящийся в соответствие динамической переменной, должен быть ещё и эрмитовым (самосопряженным). Утверждение, что **динамическим переменным в квантовой механике сопоставляются линейные эрмитовы операторы, действующие в линейном комплексном пространстве* векторов состояний**, может рассматриваться как **аксиома 2** квантовой механики.

Чтобы выяснить, как оператор A действует на бра – векторы, образуем из (2.21) скалярное произведение

$$\langle x|v\rangle = \langle x|A|u\rangle = \langle \eta|u\rangle \quad (2.22)$$

Из (2.22) видно, что оператор A действует на кет – векторы вправо, а на бра – векторы — влево:

$$|v\rangle = A|u\rangle \quad (2.23)$$

$$\langle \eta| = \langle x|A \quad (2.24)$$

* «Пространство бра-векторов и кет-векторов, имеющих конечную длину и конечное скалярное произведение, называется математиками пространством Гильберта». Бра-векторы и кет-векторы квантовой механики образуют пространство более общее, чем пространство Гильберта.

При взаимно-однозначном соответствии между состояниями $|u\rangle$ и $|v\rangle$, очевидно, имеют место два равенства:

$$|v\rangle = A|u\rangle, \quad |u\rangle = B|v\rangle \quad (2.25)$$

Операторы A и B по определению (2.25) **обратны** друг другу. Они удовлетворяют операторным соотношениям

$$AB = 1, \quad BA = 1 \quad (2.26)$$

Оператор, обратный данному, существует не всегда. Если же он существует, то его обозначают символом A^{-1} . Если операторы P, Q имеют обратные операторы, то произведение PQ имеет обратный оператор, причём

$$(PQ)^{-1} = Q^{-1}P^{-1} \quad (2.27)$$

Равенство (2.27) может быть получено с помощью (2.26).

Определим далее три основных операции алгебры линейных операторов:

а) умножение оператора A на комплексное число:

$$(cA)|u\rangle = c(A|u\rangle); \quad \langle x|(cA) = c(\langle x|A);$$

б) сумма операторов $S = A + B$:

$$S|u\rangle = A|u\rangle + B|u\rangle; \quad \langle x|S = \langle x|A + \langle x|B;$$

в) произведение линейных операторов $P = AB$:

$$P|u\rangle = A(B|u\rangle); \quad \langle x|P = (\langle x|A)B.$$

В квантовой механике применяются несколько разновидностей линейных операторов, различающихся своими алгебраическими свойствами, а именно: операторы эрмитово сопряжённые, самосопряжённые (эрмитовы), антиэрмитовы, унитарные, положительно определённые; операторы проектирования, коммутаторы. Наиболее важные из перечисленных типов линейных операторов будут рассмотрены в последующих параграфах.

§ 2.4. Сопряжённые операторы. Правила сопряжения для векторов и операторов

Пусть A — линейный оператор и $|v\rangle = A|u\rangle$. Так как $|v\rangle^+ = \langle v|$, то $\langle v| = \langle u|A^+$, где A^+ — линейный оператор, сопряжённый оператору A . Ясно, что если $A = 0$, то и $A^+ = 0$. Образует скалярное произведение:

$$\begin{aligned}\langle t|v\rangle &= \langle t|A|u\rangle; \\ \langle v|t\rangle &= \langle u|A^+|t\rangle.\end{aligned}$$

В силу известного свойства скалярного произведения $\langle t|v\rangle = \langle v|t\rangle^*$, из последних двух равенств следует

$$\langle t|A|u\rangle = \langle u|A^+|t\rangle^* \quad (2.28)$$

Это чрезвычайно важное равенство может рассматриваться как определение эрмитово сопряжённого оператора. Из него видно, что для любых $|u\rangle, |t\rangle$, кет – вектор, сопряжённый $\langle u|A^+$, есть $A|u\rangle$, а кет – вектор, сопряжённый $\langle t|A$ есть $A^+|t\rangle$. Операторы A, A^+ выступают в (2.28) как совершенно равноправные. Безразлично, какой из них обозначается как сопряжённый. Эти обозначения можно поменять, приняв, например, $A^+ \equiv B$ и $A \equiv B^+$. Тогда (2.28) приобретет вид

$$\langle t|B^+|u\rangle = \langle u|B|t\rangle^* \quad (2.29)$$

Соотношения (2.28), (2.29) эквивалентны друг другу. Они могут рассматриваться как две формы записи определения эрмитово сопряжённого оператора.

Операция сопряжения линейных операторов подчинена следующим фундаментальным соотношениям:

$$(A^+)^+ = A \quad (2.30)$$

$$(cA)^+ = c^* A^+ \quad (2.31)$$

$$(A + B)^+ = A^+ + B^+ \quad (2.32)$$

$$(AB)^+ = B^+ A^+ \quad (2.33)$$

Можно сформулировать общие правила выполнения операции сопряжения в алгебраических выражениях, содержащих комплексные числа, бра – и кет – векторы и линейные операторы в обозначениях Дирака: *все числа заменяются на комплексно сопряжённые, все бра на*

сопряжённые кет и наоборот, все операторы — на эрмитово сопряжённые, а порядок символов в каждом слагаемом меняется на противоположный.

Приведём несколько примеров.

$$(|u\rangle \langle v|)^+ = |v\rangle \langle u|$$

$$(AB|u\rangle \langle v|C)^+ = C^+|v\rangle \langle u|B^+A^+$$

$$(AB|u\rangle \langle v|C|\omega\rangle)^+ = \langle \omega|C^+|v\rangle \langle u|B^+A^+$$

$$(\langle t|AB|u\rangle \langle v|C|\omega\rangle)^+ = \langle \omega|C^+|v\rangle \langle u|B^+A^+|t\rangle$$

§ 2.5. Эрмитовы (самосопряжённые) операторы, положительно определённые операторы, унитарные операторы

Линейный оператор H называется **эрмитовым**, если он является сопряжённым самому себе:

$$H = H^+$$

Оператор I называется **антиэрмитовым**, если

$$I = -I^+$$

Из этих определений нетрудно получить следующие свойства операторов.

Всякий линейный оператор A может быть представлен (и единственным образом) в виде суммы эрмитового H_A и антиэрмитового I_A .

$$A = H_A + I_A \quad (2.34)$$

причём

$$H_A = \frac{A + A^+}{2}; \quad I_A = \frac{A - A^+}{2} \quad (2.35)$$

Всякая линейная комбинация эрмитовых операторов с **вещественными** коэффициентами есть эрмитов оператор.

Произведение HK двух эрмитовых операторов не обязательно эрмитово, т.к. $(HK)^+ = KH$. Это произведение эрмитово в случае, если операторы H и K коммутируют.

Коммутатор $[H, K]$ есть **антиэрмитов оператор**. Говорят, что эрмитов оператор H является **положительно определённым**, если

$\langle u|H|u\rangle \geq 0$ для всех возможных $|u\rangle$. Для такого оператора имеет место обобщённое неравенство Шварца

$$|\langle u|H|v\rangle|^2 \leq \langle u|H|u\rangle \langle v|H|v\rangle$$

Кроме того, из равенства $\langle u|H|u\rangle = 0$ следует $H|u\rangle = 0$.

Оператор U называется унитарным, если он является обратным к своему сопряжённому:

$$UU^+ = U^+U = 1$$

Произведение $W = UV$ двух унитарных операторов U и V есть унитарный оператор:

$$W^{-1} = V^{-1}U^{-1} = V^+U^+ = W^+$$

Доказательство этого соотношения основано на учёте свойств (2.27) и (2.39).

§ 2.6. Собственные значения операторов. Связь собственных значений с результатами измерений динамических переменных

Чтобы связать операторы с численными значениями физических величин, получаемыми при измерениях, в квантовой механике формулируется аксиома о связи собственных значений эрмитовых операторов с результатами измерений. Прежде, чем эта аксиома будет сформулирована, рассмотрим необходимые понятия и суть проблемы собственных значений.

Пусть A — линейный оператор. Тогда, по определению, комплексное число a есть собственное значение оператора A , а $|u\rangle$ есть собственный кет-вектор, принадлежащий a , если

$$A|u\rangle = a|u\rangle \quad (2.36)$$

Множество возможных значений числа a , при которых уравнение (2.36) имеет решения, образует спектр собственных значений оператора A . Аналогично $\langle u'|$ есть собственный бра-вектор, принадлежащий собственному значению a' , если

$$\langle u'|A = a'\langle u'| \quad (2.37)$$

Если существует несколько линейно независимых векторов, относящихся к одному собственному значению, то это множество векторов

образует векторное пространство, называемое *подпространством, относящимся к собственному значению a* . Если это подпространство одномерно, то его называют простым или *невыврожденным*. В противном случае имеет место *вырождение*, порядок (кратность) которого равен числу измерений соответствующего подпространства. Кратность вырождения может иметь любое значение от единицы до бесконечности. Рассмотренные понятия одинаково относятся как к кет-, так и к бра-векторам.

Если A — произвольный линейный оператор, то никакой связи между проблемой собственных значений, принадлежащих кет-векторам, и проблемой собственных значений, принадлежащих бра-векторам, не существует.

Однако, если A — эрмитов оператор, то

- 1) оба спектра собственных значений идентичны;
- 2) все собственные значения вещественны;
- 3) подпространство собственных бра-векторов дуально подпространству собственных кет-векторов.

Докажем сначала свойство 2. Если $A = A^+$ и $A|u\rangle = a|u\rangle$, то

$$\langle u|A|u\rangle = a\langle u|u\rangle \quad (2.38)$$

Поскольку

$$\langle u|A|u\rangle^* = \langle u|A^+|u\rangle = \langle u|A|u\rangle,$$

то скалярное произведение $\langle u|A|u\rangle$ вещественно для всякого эрмитова оператора A . То же и $\langle u|u\rangle$. Но тогда из (2.38) следует, что собственное значение a эрмитова оператора A вещественно.

Вещественность a означает, что равенству $A|u\rangle = a|u\rangle$ соответствует сопряжённое равенство $\langle u|A = a\langle u|$ и обратно. Эти равенства доказывают существование свойств 1 и 3.

Рассмотренные свойства позволяют связать понятие эрмитова оператора динамической переменной с возможными результатами её измерений, сформулировав следующую аксиому (аксиома 3 квантовой механики): *единственными возможными результатами измерений динамической переменной F в каком-либо состоянии $|\Psi\rangle$ квантовой си-*

стемы являются собственные значения f оператора F этой динамической переменной. Иными словами, чтобы установить, какие значения в принципе можно получить при измерении динамической переменной F , следует найти все возможные собственные значения её оператора F , решив для этого уравнение

$$F|f\rangle = f|f\rangle \quad (2.39)$$

Заметим, что эрмитовость операторов квантовой механики выступает в качестве необходимого условия возможности измерения соответствующих динамических переменных. Принято говорить, что динамическая переменная, которой соответствует эрмитов линейный оператор, является *наблюдаемой*. *Наблюдаемым* называют и соответствующий эрмитов оператор.

Четвёртым важнейшим свойством собственных векторов является свойство их ортогональности. Докажем это свойство. Пусть

$$\begin{aligned} A|u\rangle &= a|u\rangle \\ \langle v|A &= b\langle v| \end{aligned}$$

Умножим первое равенство на $\langle v|$ слева, а второе на $|u\rangle$ справа и вычтем одно из другого. Получим

$$0 = (a - b)\langle v|u\rangle$$

Поскольку $a \neq b$ по условию, то $\langle v|u\rangle = 0$, что и означает ортогональность собственных векторов.

Так как векторы состояния определены с точностью до произвольного численного множителя, то они всегда могут быть нормированы.

Ещё одно свойство собственных векторов $|f\rangle$ эрмитова оператора F состоит в том, что они линейно независимы и образуют *полную* систему. Это обстоятельство позволяет принимать полную систему ортонормированных собственных векторов за базис пространства векторов состояний и разлагать всякий вектор состояния в ряд (или интеграл) по собственным векторам (ортам). Любой вектор $|\Psi\rangle$ можно разложить по базисным ортам $|b\rangle$ для всех значений f :

$$|\Psi\rangle = \sum_f \Psi_f |f\rangle \quad (2.40)$$

или (если спектр значений f непрерывен)

$$|\Psi\rangle = \int \Psi_f |f\rangle df \quad (2.41)$$

При этом как в (2.40), так и в (2.41), численные коэффициенты разложения равны

$$\Psi_f = \langle f | \Psi \rangle \quad (2.42)$$

Соотношение (2.42) доказывается, если учесть ортогональность и нормировку собственных векторов $|f\rangle$. С учётом (2.42), разложения (2.40), (2.41) для всех значений f запишутся в виде

$$|\Psi\rangle = \sum_f |f\rangle \langle f | \Psi \rangle \quad (2.43)$$

или

$$|\Psi\rangle = \int |f\rangle \langle f | \Psi \rangle df \quad (2.44)$$

Эти соотношения допускают простую геометрическую интерпретацию. Действительно, $\langle f | \Psi \rangle$ есть проекция вектора $|\Psi\rangle$ на орт $|f\rangle$, а $|f\rangle \langle f | \Psi \rangle$ есть составляющая вектора $|\Psi\rangle$, направленная вдоль $|f\rangle$. При этом $|f\rangle \langle f |$ может рассматриваться как оператор, выделяющий из вектора $|\Psi\rangle$ составляющую, направленную вдоль орта $|f\rangle$. Этот оператор может быть назван **оператором проектирования** (или проектором) вектора $|\Psi\rangle$ на орт $|f\rangle$. Оператор $(\sum_f |f\rangle \langle f |)$ может рассматриваться как оператор проектирования вектора $|\Psi\rangle$ на себя. Очевидно, что это единичный оператор:

$$\sum_f |f\rangle \langle f | = 1 \quad (2.45)$$

или

$$\int |f\rangle \langle f | df = 1 \quad (2.46)$$

Соотношения (2.45), (2.46) называют также условиями **полноты** системы базисных векторов, так как получить вектор $|\Psi\rangle$ можно только осуществив полное (без исключений!) суммирование всех его составляющих.

Как известно, в процессе квантово-механического измерения динамической переменной F прибор переводит состояние, предшествовавшее

измерению, в новое состояние, в котором величина F имеет с той или иной вероятностью то или иное из возможных значений. Нетрудно видеть, что то же самое делает оператор проектирования $\sum_f |f\rangle\langle f|$. Этот оператор переводит исходное состояние $|\Psi\rangle$ в суперпозицию собственных состояний $|f\rangle$ с поддающимся измерению спектром собственных значений f оператора F измеряемой динамической переменной.

Точно также элементарный оператор проектирования $|f\rangle\langle f|$ переводит исходное состояние $|\Psi\rangle$ в одно из собственных состояний $|f\rangle$ с поддающимся измерению собственным значением f .

Нетрудно осознать, что коэффициенты $\langle f|\Psi\rangle$ в разложениях (2.43), (2.44) как-то определяют плотность вероятности, с которой в состоянии $|\Psi\rangle$ присутствует собственное состояние $|f\rangle$ и, следовательно, вероятность появления в результатах измерений определённого собственного значения f . Так как коэффициент $\langle f|\Psi\rangle$ является скалярной **комплексной** величиной, то сам он не может быть приравнен упомянутой вероятности. Однако если считать этот коэффициент **амплитудой вероятности**, то можно принять за очередную аксиому (аксиому 4) квантовой механики следующее утверждение: **плотность вероятности того, что в состоянии $|\Psi\rangle$ в результате измерения динамической переменной F будет обнаружено её собственное значение f , равна $|\langle f|\Psi\rangle|^2$, где $|f\rangle$ или $\langle f|$ — собственный вектор оператора F , принадлежащий собственному значению f** . Функции $|\Psi\rangle, |f\rangle$ — нормированные.

С учётом этой аксиомы, вероятность обнаружения частицы в состоянии $|\Psi\rangle$ должна быть равна сумме вероятностей обнаружения частицы в каждом из «базисных» состояний $|f\rangle$. Это утверждение действительно вытекает из разложений (2.43), (2.44). Чтобы в этом убедиться, умножим (2.43) слева на $\langle\Psi|$ и осуществим несложные преобразования

$$\begin{aligned}\langle\Psi|\Psi\rangle &= \langle\Psi|\sum_f |f\rangle\langle f|\Psi\rangle; \\ \langle\Psi|\Psi\rangle &= \sum_f \langle\Psi|f\rangle\langle f|\Psi\rangle.\end{aligned}$$

Так как $\langle\Psi|f\rangle = \langle f|\Psi\rangle^*$, то

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_f \langle f|\Psi\rangle^* \langle f|\Psi\rangle = \sum_f |\langle f|\Psi\rangle|^2$$

Если вектор $|\Psi\rangle$ нормирован на единицу, то $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ и это означает, что вероятность обнаружить рассматриваемую частицу в рассматриваемом состоянии $|\Psi\rangle$ равна единице. Вероятность $|\langle f|\Psi\rangle|^2$ того, что в состоянии $|\Psi\rangle$ присутствует то или иное базисное состояние $|f\rangle$ принадлежащее собственному значению f , разумеется, будет меньше единицы.

§ 2.7. Средние значения динамических переменных

Поставим задачу получить общую формулу, позволяющую находить среднее значение $\langle F \rangle$ динамической переменной F в некотором состоянии $|\Psi\rangle$. Оператор F и состояние $|\Psi\rangle$ считаем известными.

Прежде всего, для оператора F найдём его собственные векторы $|f\rangle$, принадлежащие собственным значениям f , и вероятности $|\langle f|\Psi\rangle|^2$ с которыми собственные состояния $|f\rangle$ присутствуют в рассматриваемом состоянии $|\Psi\rangle$. Далее по найденным собственным значениям f и вероятностям $|\langle f|\Psi\rangle|^2$ появления значений f в результатах измерений вычислим среднее значение $\langle F \rangle$ следующим очевидным образом:

$$\langle F \rangle = \sum_f f |\langle f|\Psi\rangle|^2 \quad (2.47)$$

Чтобы ввести в рассмотрение оператор F , преобразуем (2.47):

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \sum_f f \langle f|\Psi\rangle^* \langle f|\Psi\rangle = \sum_f \langle\Psi|f\rangle f \langle f|\Psi\rangle = \sum_f \langle\Psi|f\rangle \langle f|F|\Psi\rangle = \\ &= \langle\Psi|\{\sum_f |f\rangle \langle f|\}F|\Psi\rangle; \end{aligned}$$

Учитывая условие полноты $\sum_f |f\rangle \langle f| = 1$ системы собственных функций оператора F , получаем окончательно

$$\langle F \rangle = \langle\Psi|F|\Psi\rangle \quad (2.48)$$

Это и есть искомая формула, позволяющая по известному оператору F найти среднее значение динамической переменной F для заданного состояния $|\Psi\rangle$.

Из проделанного расчёта видно также, что среднее значение $\langle F \rangle$ вещественно, так как оно получено суммированием слагаемых вида $f|\langle f|\Psi\rangle|^2$, каждое из которых вещественно, если оператор F эрмитов.

Покажем также, что если состояние, в котором находится квантовая система, есть собственное состояние $|f\rangle$ оператора F то среднее значение $\langle F \rangle$ совпадает с собственным. Будем исходить из (2.45), приняв $|\Psi\rangle = |f\rangle$.

Тогда в состоянии $|f\rangle$

$$\langle F \rangle = \langle f|F|f\rangle = f\langle f|f\rangle = f$$

что и требовалось доказать.

§ 2.8. Коммутационные соотношения

Основное отличие линейных эрмитовых операторов квантовой механики от динамических переменных классической механики заключается в том, что операция умножения квантовых операторов не коммутативна. Поэтому в квантовой механике необходимо получить соотношения, заменяющие собою коммутативный закон умножения. Только тогда можно говорить о законченности алгебры квантовомеханических операторов.

Коммутатор двух линейных эрмитовых операторов есть некий третий оператор. Если его не подчинить некоторым специальным условиям, то может статься, что такой оператор вообще не будет укладываться в какие-либо физические представления, а его появление будет препятствовать построению законченной логической схемы квантовой механики. Интересующие нас специальные условия, называемые **квантовыми условиями** или **перестановочными соотношениями**, могут быть получены путём обобщения известных результатов классической механики.

Рассмотрим вывод перестановочных соотношений по П. Дираку.

Важным понятием в классической механике являются скобки Пуассона. Любой паре динамических переменных g и f можно сопоставить **скобки Пуассона**:

$$\{g, f\}_{\text{кл}} = \sum_i \frac{\partial g}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial p_i} - \frac{\partial g}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial x_i} \quad (2.49)$$

где g и f рассматриваются как функции канонических координат x_i и импульсов p_i .

Главные свойства скобок Пуассона таковы:

$$\{g, f\} = -\{f, g\} \quad (2.50)$$

$$\{g, c\} = 0, \text{ если } c \text{ — число} \quad (2.51)$$

$$\{g_1 + g_2, f\} = \{g_1, f\} + \{g_2, f\} \quad (2.52)$$

$$\{g, f_1 + f_2\} = \{g, f_1\} + \{g, f_2\} \quad (2.53)$$

$$\{g_1 g_2, f\} = \{g_1, f\} g_2 + g_1 \{g_2, f\} \quad (2.54)$$

$$\{g, f_1 f_2\} = \{g, f_1\} f_2 + f_1 \{g, f_2\} \quad (2.55)$$

$$\{g, \{f, u\}\} + \{f, \{u, g\}\} + \{u, \{g, f\}\} = 0 \quad (2.56)$$

Чтобы ввести квантовый аналог скобки Пуассона, предположим, что квантовая скобка Пуассона удовлетворяет всем соотношениям (2.50) — (2.56), причём динамические переменные f, g, u должны быть заменены на соответствующие операторы F, G, U , а порядок сомножителей не должен меняться. Вычислим далее двумя разными способами скобки Пуассона вида $\{G_1 G_2, F_1 F_2\}$.

Из свойства (2.51) получаем:

$$\begin{aligned} \{G_1 G_2, F_1 F_2\} &= \{G_1, F_1 F_2\} G_2 + G_1 \{G_2, F_1 F_2\} = (\{G_1, F_1\} F_2 + \\ &+ F_1 \{G_1, F_2\}) G_2 + G_1 (\{G_2, F_1\} F_2 + F_1 \{G_2, F_2\}) = \{G_1, F_1\} F_2 G_2 + \\ &+ F_1 \{G_1, F_2\} G_2 + G_1 \{G_2, F_1\} F_2 + G_1 F_1 \{G_2, F_2\}. \end{aligned}$$

С другой стороны, из свойства (2.55) вытекает

$$\begin{aligned} \{G_1 G_2, F_1 F_2\} &= \{G_1 G_2, F_1\} F_2 + F_1 \{G_1 G_2, F_2\} = \\ &= \{G_1, F_1\} G_2 F_2 + G_1 \{G_2, F_1\} F_2 + F_1 \{G_1, F_2\} G_2 + F_1 G_1 \{G_2, F_2\}. \end{aligned}$$

Приравняв оба результата, получаем

$$\{G_1, F_1\} (G_2 F_2 - F_2 G_2) = (G_1 F_1 - F_1 G_1) \{G_2, F_2\}$$

Поскольку все четыре оператора никак не связаны друг с другом, то полученное равенство возможно, если

$$G_1 F_1 - F_1 G_1 = i\hbar \{G_1, F_1\}$$

$$G_2 F_2 - F_2 G_2 = i\hbar \{G_2, F_2\}$$

Множитель $i\hbar$ введён из тех соображений, что скобка Пуассона должна быть* эрмитовым оператором, а коммутатор $[G, F]$ должен обращаться в нуль при переходе к классическому пределу $\hbar \rightarrow 0$.

Выражение вида

$$GF - FG = i\hbar\{G, F\} \quad (2.57)$$

есть искомое коммутационное соотношение для операторов G и F в самой его общей форме. Из него видно, что коммутатор $[G, F]$ равен квантовой скобке Пуассона $\{G, F\}$, умноженной на мнимое число $i\hbar$. Значение квантовой скобки Пуассона определяет не коммутативный закон умножения двух операторов, который в пределе $\hbar \rightarrow 0$ переходит в классический коммутативный закон умножения динамических переменных.

Простейшими скобками Пуассона являются те, в которые входят сами канонические координаты и импульсы. Классические скобки Пуассона для этих величин, согласно определению (2.49), имеют вид:

$$\{x_i, x_k\}_{\text{кл}} = \{p_i, p_k\}_{\text{кл}} = 0; \quad \{x_i, p_k\}_{\text{кл}} = \delta_{ik}$$

Постулируется, что при переходе от этих классических соотношений к соответствующим квантовым операторным соотношениям, вид соотношений не меняется; то есть:

$$\{X_i, X_k\} = \{P_i, P_k\} = 0; \quad \{X_i, P_k\} = \delta_{ik} \quad (2.58)$$

Учитывая (2.58), можно записать коммутационное соотношение (2.57) для координат и импульсов в виде

$$X_i P_k - P_k X_i = i\hbar I \quad (2.59)$$

где I — единичный оператор.

* Квантовая скобка Пуассона входит как слагаемое в выражение $\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, \hat{I}\}$, где $\hat{I}$ — оператор Гамильтона. Это выражение определяет быстроту изменения во времени среднего значения $\langle \Psi | F | \Psi \rangle$ динамической переменной F , так как среднее значение переменной F вещественно, то оператор $\frac{dF}{dt}$ есть эрмитов оператор. Следовательно и $\{F, \hat{I}\}$ тоже эрмитов оператор.

Утверждение, что произведения линейных эрмитовых операторов квантовой механики всегда подчиняются коммутационным соотношениям вида (2.57) или, в частном случае, (2.59), может рассматриваться как **аксиома 5** квантовой механики.

Замена классических скобок Пуассона квантовыми позволяет перейти к квантовому описанию системы, имеющей классический аналог. Получаемые при этом перестановочные соотношения для операторов канонических переменных X_i, P_i дают возможность установить явный вид оператора одной канонической переменной, если задан оператор другой.

В случае если какие-либо квантовые физические величины не имеют классического аналога, квантовые скобки Пуассона для операторов соответствующих величин имеют смысл.

Таким образом, все физические величины в квантовой механике можно разделить на два класса. В один класс входят величины, операторы которых попарно коммутируют, а соответствующие квантовые скобки Пуассона равны нулю. В другой класс входят величины, операторы которых образуют попарно коммутаторы, не равные нулю. Эти коммутаторы имеют вид соотношений (2.59) или, в общем случае, (2.57). Коммутационные соотношения способствуют установлению явного вида квантовомеханических операторов.

§ 2.9. Условия, при которых несколько физических величин могут одновременно иметь определённые значения

Ранее было показано, что если вектор состояния $|f\rangle$ является собственным вектором эрмитова оператора F , то в этом состоянии динамическая переменная F имеет определённое значение f , которое вещественно и может быть измерено. Очевидно, что если вектор состояния является одновременно собственным вектором нескольких эрмитовых операторов, то в этом состоянии имеют определённое значение все физические величины, соответствующие этим операторам.

Докажем теорему, что если две физические величины F и M одновременно имеют определённые значения, то их операторы коммутируют.

Из предыдущего следует, что численные значения таких величин есть собственные значения f и m операторов F и M , а собственный вектор состояния $|f\rangle$ является собственным вектором обоих операторов, то есть

$$\begin{aligned} F|f\rangle &= f|f\rangle \\ M|f\rangle &= m|f\rangle \end{aligned} \quad (2.60)$$

«Умножим» первое из (2.60) на M , а второе — на F слева и вычтем из первого второе. Получим

$$(MF - FM)|f\rangle = fM|f\rangle - mF|f\rangle = (fm - mf)|f\rangle$$

Так как m и f есть числа, то очевидно, что

$$(MF - FM)|f\rangle = 0 \quad (2.61)$$

Теперь проверим, а будет ли

$$(MF - FM)|\Psi\rangle = 0 \quad (2.62)$$

если $|\Psi\rangle$ — вектор произвольно выбранного, а не собственного состояния. Воспользуемся тем, что собственные состояния образуют полную ортонормированную систему и разложим $|\Psi\rangle$ по собственным состояниям $|f\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_f a_f |f\rangle,$$

где a_f — численные коэффициенты.

Подставив это разложение в (2.62), получим

$$(MF - FM)|\Psi\rangle = (MF - FM) \sum_f a_f |f\rangle$$

Так как a_f являются просто числами, коммутатор $(MF - FM)$ может быть внесён под знак суммы:

$$(MF - FM)|\Psi\rangle = \sum_f a_f (MF - FM) |f\rangle$$

Учитывая (2.61), получаем, что правая часть последнего соотношения равна нулю и справедливость (2.62) доказана.

Запишем (2.62) в операторной форме:

$$M F - F M = 0 \quad (2.63)$$

Это операторное равенство можно рассматривать как условие того, что физические величины F и M могут быть одновременно измерены.

Иными словами, измерения величин, операторы F и M которых коммутируют, совместны в том смысле, что опыты по измерению этих величин не мешают друг другу и могут рассматриваться как составляющие одного общего опыта по одновременному измерению этих величин.

Можно доказать и обратную теорему: если выполняется условие (2.63) одновременной измеримости (совместности) двух физических величин F и M , то операторы этих величин имеют (по крайней мере одну) общую систему собственных функций.

Для случая невырожденных состояний, образующих дискретную последовательность, доказательство осуществим следующим образом:

Пусть выполнено условие одновременной измеримости величин F и M (2.63) и пусть собственные векторы $|f\rangle$ оператора F образуют полную ортонормированную систему, то есть

$$F|f\rangle = f|f\rangle \quad (2.64)$$

Подействуем на (2.64) слева оператором M и, учитывая (2.63), получим

$$M F |f\rangle = f M |f\rangle; \quad F (M |f\rangle) = f (M |f\rangle) \quad (2.65)$$

Из последнего равенства следует, что вектор $M |f\rangle$ есть собственный вектор оператора F , то есть один из полного множества векторов $|f\rangle$. Сопоставляя (2.64) и (2.65), нетрудно увидеть, что вектор $M |f\rangle$ может отличаться от $|f\rangle$ только численным множителем m :

$$M|f\rangle = m|f\rangle \quad (2.66)$$

Этот численный множитель есть *вещественное* число, так как оператор M по условию эрмитов. Сравнивая (2.64) и (2.66) убеждаемся, что коммутирующие операторы F и M имеют общую систему собственных функций. Теорема доказана.

Если операторы F и M имеют вырожденные состояния, то собственные векторы $|f_k\rangle$ оператора F не будут в общем случае собственными векторами оператора M . Однако из векторов $|f_k\rangle$ всегда можно составить линейные комбинации $|f_\ell\rangle = \sum_k |f_k\rangle a_{k\ell}$, которые будут собственными векторами оператора M .

Принято говорить, что последовательность $A, B, C \dots$ эрмитовых операторов составляет *полный набор коммутирующих наблюдаемых*,

если эти операторы попарно коммутируют друг с другом и если их общая базисная система определена единственным образом. Каждому множеству собственных значений a, b, c соответствует только один собственный вектор, который может рассматриваться как функция собственных значений $a, b, c \dots$ и который обычно обозначают $|a, b, c \dots\rangle$.

§ 2.10. Соотношения неопределённостей

Если двум динамическим переменным соответствуют некоммутирующие операторы A и B , то есть если

$$A B - B A = i\hbar C \quad (2.67)$$

где C — квантовая скобка Пуассона для операторов A и B , то такие динамические переменные не могут иметь в одном состоянии определённых значений. При квантовых измерениях величины A (или B) всегда возникает разброс результатов измерений относительно среднего значения $\langle A \rangle$ (или $\langle B \rangle$). Примем за численные характеристики этого разброса дисперсию $\ddot{A}_A$ и среднее квадратичное отклонение $\Delta A = \ddot{A}_A^{1/2}$.

Дисперсия, по определению, равна:

$$\ddot{A} \equiv \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2) \rangle = \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle\langle A \rangle + \langle A \rangle^2$$

Здесь учтено, что среднее значение (обозначается знаком $\langle \dots \rangle$) от среднего $\langle A \rangle$ снова равно $\langle A \rangle$, то есть $\langle \langle A \rangle \rangle = \langle A \rangle$. Точно также $\langle \langle A^2 \rangle \rangle = \langle A^2 \rangle$. Окончательно для дисперсии $\ddot{A}_A$ имеем:

$$\ddot{A}_A = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (2.68)$$

Соответственно, среднее квадратичное отклонение определяется как

$$\Delta A = \ddot{A}_A^{1/2} = (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)^{1/2} \quad (2.69)$$

$$\Delta B = \ddot{A}_B^{1/2} = (\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2)^{1/2}$$

Введём ради сокращений эрмитовы операторы

$$\hat{A} = A - \langle A \rangle, \quad \hat{B} = B - \langle B \rangle \quad (2.70)$$

Непосредственной подстановкой (2.70) в (2.67) легко убедиться, что новые операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ удовлетворяют коммутационному соотношению вида (2.67):

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hbar C \quad (2.71)$$

Кроме того, из (2.69) и (2.70) следует, что

$$\Delta A = \Delta \hat{A} = \langle \hat{A}^2 \rangle^{1/2}; \quad \Delta B = \Delta \hat{B} = \langle \hat{B}^2 \rangle^{1/2} \quad (2.72)$$

Пусть измерения величин $\hat{A}, \hat{B}$ (или A, B) производятся в состоянии $|\Psi\rangle$. В процессе измерений величины $\hat{A}$ или $\hat{B}$ состояние $|\Psi\rangle$ переводится прибором в состояние $|u\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle$ или $|v\rangle = \hat{B}|\Psi\rangle$. Применим к векторам $|u\rangle, |v\rangle$ неравенство Шварца:

$$|\langle u|v\rangle|^2 \leq \langle u|u\rangle \langle v|v\rangle$$

Введём в запись этого неравенства операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$$|\langle \Psi|\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle|^2 \leq \langle \Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle \langle \Psi|\hat{B}^2|\Psi\rangle \quad (2.73)$$

Величины в правой части неравенства (2.70), по определению, есть средние значения величин $\hat{A}^2$ и $\hat{B}^2$

$$\langle \Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle; \quad \langle \Psi|\hat{B}^2|\Psi\rangle = \langle \hat{B}^2 \rangle$$

Если, кроме того, учесть (2.72), то неравенству (2.73) можно придать вид:

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq |\langle \Psi|\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle|^2 \quad (2.74)$$

Выделим в операторе $\hat{A}\hat{B}$ эрмитову и антиэрмитову часть:

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} + \frac{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}{2} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} + \frac{i\hbar C}{2};$$

Это позволяет выделить в $\langle \Psi|\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle$ вещественную и мнимую части:

$$\langle \Psi|\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle = \left\langle \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} \right\rangle + i \frac{\hbar}{2} \langle C \rangle$$

Соответственно, неравенство (2.74) приобретёт вид:

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \left\langle \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} \right\rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4} \langle C \rangle^2$$

Отсюда сразу видно, что в состоянии $|\Psi\rangle$

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{\hbar}{2} \langle C \rangle \quad (2.75)$$

Это и есть соотношение неопределённостей для динамических переменных A и B . Оно записано в самом общем виде. Напомним, что ΔA и

ΔB есть средние квадратичные отклонения значений соответствующих динамических переменных.

Ранее уже указывалось, что в простейших частных случаях, когда операторы A и B есть операторы канонических координат и импульсов, соответствующая им скобка Пуассона равна единице. Приняв $A \equiv x, B \equiv p_x, \langle C \rangle = 1$ получим из (2.75)

$$\begin{aligned}\Delta x \Delta p_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \Delta p_y &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \Delta p_z &\geq \frac{\hbar}{2}\end{aligned}\tag{2.76}$$

§ 2.11. Динамические уравнения квантовой механики

Для того чтобы предсказывать эволюцию динамической переменной F во времени, в квантовой механике необходимо ввести оператор $\dot{F}$, соответствующий производной по времени от динамической переменной F . Совершенно ясно, что обычное определение производной от функции неприменимо к оператору. Для определения понятия производной по времени от оператора F воспользуемся принципом соответствия и получим искомое определение путём перехода от классических соотношений к операторным квантовым соотношениям.

Как известно, в классической механике полная производная по времени от динамической переменной f являющейся функцией обобщенных координат x_i и импульсов p_i , равна

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right)\tag{2.77}$$

Согласно уравнениям Гамильтона

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}\tag{2.78}$$

где H — функция Гамильтона для рассматриваемой системы.

Подставляя (2.78) в (2.77), получим:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}_{\text{кл}} \quad (2.79)$$

где

$$\{f, H\}_{\text{кл}} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial x_i} \right) \quad (2.80)$$

Вычислим далее производную $\frac{d\langle F \rangle}{dt}$, определяющую быстроту изменения среднего квантового значения $\langle F \rangle$ динамической переменной F во времени.

Будем исходить из определения (2.48) квантового среднего значения динамической переменной. Будем также считать, что зависимость оператора F от времени есть функциональная зависимость (то есть время входит в выражение оператора как аргумент функции). Примем также во внимание, что и вектор состояния $|\Psi\rangle$ или $\langle\Psi|$ есть функция времени. Исходное выражение запишем в виде

$$\frac{d\langle F \rangle}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | F | \Psi \rangle \quad (2.81)$$

Рассматривая $\langle \Psi | F | \Psi \rangle$ как произведение трёх функций времени, преобразуем (2.81) к виду

$$\frac{d\langle F \rangle}{dt} = \left\langle \Psi \left| \frac{\partial F}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle + \left\{ \langle \Psi | F | \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle \Psi |}{\partial t} F | \Psi \rangle \right\} \quad (2.82)$$

В согласии с принципом соответствия потребуем сходства по форме между (2.82) и классическим соотношением (2.79). Соответствие будет иметь место, если фигурная скобка в правой части (2.82) будет равна среднему значению квантовой скобки Пуассона:

$$\langle \Psi | F | \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle \Psi |}{\partial t} F | \Psi \rangle = \langle \{F, H\} \rangle \quad (2.83)$$

Учитывая определение (2.57) квантовой скобки Пуассона, запишем (2.83) более подробно:

$$\langle \Psi | F | \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle \Psi |}{\partial t} F | \Psi \rangle = \langle \Psi | \frac{1}{i\hbar} (FH - HF) | \Psi \rangle \quad (2.84)$$

Легко проверить, что соотношение (2.84) будет выполнено, если выполняются соотношения:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} &= H|\Psi\rangle \\ -i\hbar \frac{\partial \langle\Psi|}{\partial t} &= \langle\Psi|H \end{aligned} \quad (2.85)$$

Первое из соотношений (2.85) есть временное уравнение Шрёдингера, а второе соотношение является сопряжённым первому.

Приняв, что уравнение Шрёдингера всегда определяет эволюцию во времени вектора состояния ($|\Psi\rangle$ или $\langle\Psi|$), запишем (2.82) в виде:

$$\frac{d\langle F\rangle}{dt} = \left\langle \Psi \left| \frac{\partial F}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle + \langle \Psi | \{F, \hat{I}\} | \Psi \rangle \quad (2.86)$$

или короче

$$\frac{d\langle F\rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial F}{\partial t} \right\rangle + \langle \{F, H\} \rangle \quad (2.87)$$

где $\{F, H\}$ — квантовые скобки Пуассона для операторов F, H .

Объединим сумму средних в правой части (2.86) в одно среднее:

$$\frac{d\langle F\rangle}{dt} = \left\langle \Psi \left| \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} \right| \Psi \right\rangle \quad (2.88)$$

Введём понятие производной $\frac{\partial F}{\partial t}$ от оператора F по времени, определив его соотношением:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, \hat{I}\} \quad (2.89)$$

Это определение позволяет записать (2.88) в виде:

$$\frac{d\langle F\rangle}{dt} = \left\langle \frac{dF}{dt} \right\rangle \quad (2.90)$$

Последнее означает, что быстрота изменения среднего значения $\langle F \rangle$ динамической переменной совпадает с понятием среднего значения динамической переменной (оператора) $\frac{dF}{dt}$.

Общеизвестна фундаментальная роль интегралов движения (законов сохранения) в классической механике. Интегралы движения имеются и в квантовой механике. Определение квантовомеханического интеграла движения таково: если среднее значение динамической переменной, вычисленное в произвольном состоянии, не зависит от времени, то есть если для всех состояний $|\Psi\rangle$ выполняется равенство

$$\frac{d\langle F \rangle}{dt} = 0 \quad (2.91)$$

то динамическая переменная F *сохраняется во времени* или *является интегралом движения*.

Из (2.87) и (2.89) следует, что для сохранения динамической переменной F необходимо (и достаточно) чтобы

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} (F \hat{I} - \hat{I} F) = \Theta \quad (2.92)$$

где Θ — нулевой оператор. В частности, энергия сохраняется, если гамильтониан $\hat{I}$ не зависит явно от времени.

В большинстве случаев операторы не содержат время как параметр, так что условие сохранения соответствующих физических величин сводится к коммутативности соответствующего оператора с гамильтонианом. Кроме того, это означает возможность одновременного измерения динамической переменной, являющейся интегралом движения, вместе с энергией.

Несмотря на то, что (2.87) получено на основе некоторых частных предположений (предположение о зависимости от времени как векторов состояний, так и операторов; предположение о том, что эволюция во времени векторов состояний подчинена уравнению Шредингера) можно утверждать, что это соотношение имеет характер общей динамической закономерности, поскольку оно может быть получено из классического соотношения (2.80) непосредственно на основе принципа соответствия (заменой классических величин на средние квантовые; заменой классических скобок Пуассона квантовыми). В связи с этим можно постулировать (аксиома 6 квантовой механики), что *быстрота изменения во времени среднего значения динамической переменной, которой соответствует оператор F , в состоянии $|\Psi\rangle$ определяется выражением вида (2.87), а именно:*

$$\frac{d\langle F \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial F}{\partial t} \right\rangle + \langle \{F, \hat{I}\} \rangle$$

Это динамическая аксиома квантовой механики может быть выполнена и при других (помимо рассмотренного) способах введения временной зависимости в общую схему квантовой механики. Способы описания

эволюции квантовой системы носят названия *представлений эволюции*. Все эти способы с физической и формальной точек зрения одинаковы. Переход от одного способа к другому осуществляется с помощью унитарных преобразований векторов состояний и операторов. В перечень этих представлений входят представления Шредингера, Гейзенберга, представление взаимодействия.

Вопросы для самопроверки

1. Принцип суперпозиции состояний и аксиома 1 квантовой механики о кет- и бра-векторах. Свойства кет- и бра-векторов.
2. Антилинейный характер взаимно-однозначного соответствия между кет- и бра-векторами одного и того же состояния.
3. Линейные операторы (в том числе обратные операторы). Основные операции алгебры линейных операторов.
4. Определение сопряжённого оператора. Свойства операции сопряжения для операторов.
5. Общие правила сопряжения для векторов состояний и линейных операторов.
6. Определения самосопряжённого (эрмитова), антиэрмитова, унитарного операторов.
7. Доказать, что если коммутатор $[F, P]$ эрмитовых операторов есть антиэрмитов оператор, то эрмитовым является оператор K , удовлетворяющий условию $[F, P] = iK$.
8. Собственные значения и собственные векторы линейных эрмитовых операторов (определения, свойства). Аксиома 3 квантовой механики о связи результатов измерения динамических переменных с собственными значениями линейных эрмитовых операторов.
9. Свойства собственных векторов линейных эрмитовых операторов.

10. Разложение вектора состояния по собственным векторам линейного самосопряжённого оператора. Коэффициенты разложения и аксиома 4 квантовой механики о вероятности обнаружения собственного значения динамической переменной в результатах её измерений.

11. Формулы для вычисления среднего значения динамической переменной. Вещественность средних значений.

12. Аксиома 5 квантовой механики о квантовых условиях (перестановочных соотношениях). Роль перестановочных соотношений в алгебре линейных эрмитовых операторов.

13. Квантовые скобки Пуассона и их основные свойства.

14. Условия, при которых несколько физических величин могут одновременно иметь определённые значения. Роль полных наборов коммутирующих наблюдаемых.

15. Соотношения неопределённостей.

16. Аксиома 6 квантовой механики, определяющая временную эволюцию средних значений динамических переменных.

17. Интегралы движения в квантовой механике.

18. Вывод уравнения Шрёдингера из аксиомы 6 квантовой механики о временной эволюции средних значений динамических переменных.

Глава 3. Классические задачи квантовой механики

§ 3.1. Одномерное движение

В ситуации одномерного движения частицы с массой m в поле $U(x)$ стационарное уравнение Шрёдингера принимает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_E(x) + U(x) \Psi_E(x) = E \Psi_E(x) \quad (3.1)$$

Граничные условия к уравнению определяются характером движения, постановкой задачи и стандартными условиями.

В случае *инфинитного* движения энергетический спектр непрерывен, так что граничные условия, то есть $\Psi_E(\pm\infty)$, выбираются конечными, однозначными, непрерывными и учитывающими постановку задачи (например, о прохождении микрочастиц через потенциальный барьер).

В случае *финитного* движения граничные условия берутся нулевыми

$$\Psi_E(\pm\infty) = 0, \quad (3.2)$$

чтобы обеспечить конечное значение нормировочного интеграла. В данном разделе мы будем рассматривать только финитное движение.

Сформулируем общие свойства одномерного финитного движения.

1. *Энергетические уровни не вырождены.* Для доказательства предположим противное, и пусть Ψ_1 и Ψ_2 — две различные (*линейно независимые*) собственные функции, соответствующие одному и тому же значению энергии. Поскольку обе они удовлетворяют одному и тому же уравнению (3.1), то имеем:

$$\frac{\Psi_1''}{\Psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E] = \frac{\Psi_2''}{\Psi_2}, \quad (3.3)$$

Или $\Psi_1''\Psi_2 - \Psi_1\Psi_2'' = 0$ (штрих означает дифференцирование по x).

Интегрируя это соотношение, находим:

$$\Psi_1'\Psi_2 - \Psi_1\Psi_2' = \text{const} \quad (3.4)$$

Поскольку в соответствии с (3.2) $\Psi_1(\pm\infty) = \Psi_2(\pm\infty) = 0$, то константа в (3.4) должна тоже быть равной нулю, так что $\Psi'_1/\Psi_1 = \Psi'_2/\Psi_2$. Интегрируя еще раз, получим $\Psi_1 = \text{const} \cdot \Psi_2$, т.е. *линейную зависимость* функций Ψ_1 и Ψ_2 . А это противоречит исходному предположению, т.е. Ψ_1 и Ψ_2 задают *одно и то же* состояние.

2. Волновые функции стационарных состояний вещественны.

Для координатных частей волновых функций всегда можно выбрать постоянный фазовый множитель так, чтобы их мнимые части обратились в нуль. Доказательство данного утверждения также проводится от противного. Предположим, что функция $\Psi_E(x)$ остаётся комплексной при любом выборе нормировочной константы. Тогда, вследствие вещественности $U(x)$ и E , её вещественная и мнимая части тоже будут *линейно независимыми* собственными функциями, соответствующими одному и тому же значению энергии E . Но это означает вырождение энергетического уровня E , что противоречит ранее доказанному утверждению. На основании формулы плотности потока вероятности в состоянии волновой функции $\Psi(r, t)$:

$$j(r, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^*(r, t) \nabla \Psi(r, t) - \Psi(r, t) \nabla \Psi^*(r, t)]$$

можно заключить, что *при одномерном движении в связных стационарных состояниях потоки отсутствуют*.

3. *Выполняется осцилляционная теорема.* Если основное состояние нумеровать нулём, первое возбуждение — единицей и т.д., то внутри области движения частицы (за исключением границ) её координатная волновая функция, соответствующая n -му возбуждённому состоянию, обратится в нуль ровно n раз. Данное нетривиальное свойство доказывается в курсе функционального анализа.

4. *При симметричной (относительно $x = 0$) потенциальной энергии, $U(x) = -U(x)$, все волновые функции стационарных состояний являются либо чётными ($\Psi_E(-x) = \Psi_E(x)$), либо нечётными ($\Psi_E(-x) = -\Psi_E(x)$).* Действительно, в силу симметрии гамильтониана, если $\Psi_E(x)$ есть решение, то таковым является и $\Psi_E(-x)$, а вследствие

невырожденности спектра они могут отличаться лишь на численный фактор: $\Psi_E(-x) = c\Psi_E(x)$. Меняя в этом соотношении ещё раз знак x функции $\Psi_E(x)$ получаем: $(\Psi_E(x) = c\Psi_E(-x))$, имеем $c^2 = 1$, откуда $c = \pm 1$, что и доказывает сделанное утверждение.

К таким же **одномерным** уравнениям (3.1) приводится, очевидно, задача о *трёхмерном* движении в поле с потенциальной энергией $U(x, y, z) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$, разбивающейся на сумму функций, каждая из которых зависит только от одной из координат.

§ 3.2. Линейный гармонический осциллятор

Рассмотрим одномерную потенциальную яму

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (3.5)$$

с параметром ω (рис.4). Точнее, параметром является коэффициент упругости k : $U(x) = \frac{1}{2} k x^2$; циклическая частота $\omega = \sqrt{k/m}$, где m — масса частицы, вводится для удобства. Такой потенциал называется **осцилляторным**.

Примерами классических осцилляторов являются пружинный, математический и физический маятники, совершающие малые колебания. Движение частиц в таком потенциале всегда **финитное**.

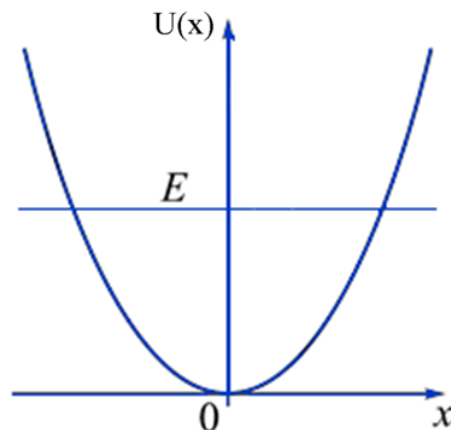


Рис. 4. Одномерная потенциальная яма с параметром ω .

В классической механике частица с массой m в поле (3.5) совершает *гармонические колебания*:

$$x(t) = A \cos(\omega t + \alpha), \quad (3.6)$$

где ω — циклическая частота, A — амплитуда, α — начальная фаза.

В квантовой механике линейными гармоническими осцилляторами моделируются колебания ионов в узлах кристаллической решетки, а также колебательные степени свободы в многоатомных молекулах при достаточно малых амплитудах колебаний (т.е. когда межатомный потенциал можно считать квадратичным). Отметим важность модели одномерного линейного гармонического осциллятора для построения формализма вторичного квантования и квантовой теории поля.

Гамильтониан одномерного квантового осциллятора с потенциалом (3.5)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (3.7)$$

инвариантен относительно отражения $x \rightarrow -x$, поэтому, помимо полной энергии, интегралом состояния будет также и чётность. Для нахождения дискретных значений энергии $E \geq 0$ и волновых функций стационарных состояний осциллятора необходимо решить стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (3.8)$$

с граничными условиями:

$$\Psi(\pm\infty) = 0 \quad (3.9)$$

вследствие финитного характера движения.

Прежде всего, перейдём в (3.8) к безразмерной координате $\xi = x/x_0$ (константа x_0 с размерностью длины будет определена ниже; это «естественная» единица длины для осциллятора, позволяющая существенно упростить все математические выкладки):

$$\frac{d^2 \Phi}{d\xi^2} - \left(\frac{m \omega x_0^2}{\hbar} \right)^2 \xi^2 \Phi(\xi) + \frac{2m x_0^2}{\hbar^2} E \Phi(\xi) = 0, \quad (3.10)$$

где $\Phi(\xi) = \Psi(x)$. Константу x_0 определим, потребовав обращения в единицу безразмерного множителя ξ^2 . Постоянный коэффициент перед $\Phi(\xi)$

тоже будет безразмерен. Обозначим его λ . Таким образом, в безразмерных переменных:

$$\Phi(\xi) = \Psi(x); \quad \xi = \frac{x}{x_0}; \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}; \quad \lambda = \frac{2mx_0^2}{\hbar^2} E = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (3.11)$$

краевая задача (3.8), (3.9) принимает вид:

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\Phi(\xi) = 0 \quad (3.12)$$

$$\Phi(\pm\infty) = 0 \quad (3.13)$$

Неизвестными в ней являются λ и $\Phi(\xi)$, связанные с исходными неизвестными E и $\Psi(x)$ соотношениями (3.11). Решение задачи всегда будет удовлетворять стандартному условию непрерывности вследствие непрерывности коэффициентов уравнения (3.12).

Уравнение вида (3.12) является частным случаем вырожденного гипергеометрического уравнения, сводимое к уравнению Вебера*. Решение которого может быть представлено в виде:

$$\Phi(\xi) = v(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad (3.14)$$

где $v(\xi)$ некоторая неизвестная функция.

Подстановка (3.14) в (3.12) приводит к следующему уравнению для $v(\xi)$, уже не содержащему особых точек (коэффициент при $v(\xi)$ конечен):

$$v''(\xi) - 2\xi v'(\xi) + (\lambda - 1)v(\xi) = 0 \quad (3.15)$$

Граничные условия $v(\xi)$ формулируются, исходя из (3.13) и (3.18)

$$v(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}} \Big|_{\xi \rightarrow \pm\infty} = 0 \quad (3.16)$$

Для данных краевых условий собственные значения равны:

$$\lambda = \lambda_n = 2n + 1, n = 0, 1, \dots, \quad (3.17)$$

а нормированные собственные функции определяются через полиномы Эрмита $H_n(\xi)$ следующим образом:

$$v_n(\xi) = \frac{e^{-\xi^2/2}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) \quad (3.18)$$

* С общим видом решения можно ознакомиться в Справочнике по обыкновенным дифференциальным уравнениям Э. Камке 1971 г.

Здесь

$$H_n(\xi) = a_0 \left(1 - \frac{2n}{1 \cdot 2} \xi^2 + \frac{2n(2n-4)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4} \xi^4 - \dots \right) \quad (3.19)$$

При n чётном и

$$H_n(\xi) = a_1 \left(\xi - \frac{2n-2}{2 \cdot 3} \xi^3 + \frac{(2n-2)(2n-6)}{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5} \xi^5 - \dots \right) \quad (3.20)$$

при n нечётном. Постоянные a_0 и a_1 принято определять так, чтобы коэффициент при старшей степени ξ был равен 2^n . Для этого нужно положить:

$$a_0 = (-1)^{\frac{n}{2}} \frac{n!}{\left(\frac{n}{2}\right)!} \quad (n - \text{чётное}) \quad (3.21)$$

$$a_1 = 2(-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{n!}{\left(\frac{n-1}{2}\right)!} \quad (n - \text{нечётное}) \quad (3.22)$$

Выясним смысл значений λ . Этот безразмерный параметр связан с энергией соотношением (3.11), поэтому с помощью (3.17) находим значения энергий стационарных состояний осциллятора:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (3.23)$$

Таким образом, энергия осциллятора **квантуется** вследствие финитного характера движения. Число энергетических уровней бесконечно. Уровни расположены **эквидистантно** на расстоянии $\hbar\omega$ друг от друга (рис. 5, а).

Ненормированные волновые функции стационарных состояний можно получить перейдя к исходным обозначениям (3.11), учтя (3.18) - (3.22):

$$\Psi_n(x) = \frac{e^{-x^2/2x_0^2}}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}} H_n(x/x_0) \quad (3.24)$$

Таким образом, **чётность** стационарных состояний определяется энергией (или, что то же самое, значением **квантового числа осциллятора** n). Нетрудно убедиться, что для энергий стационарных состояний осциллятора (3.23) и соответствующих им волновых функций (3.24) вы-

полняются все свойства одномерного финитного движения. Графики некоторых волновых функций $\Psi_n(x)$ представлены на рисунке 5б (цифры у кривых показывают значения n).

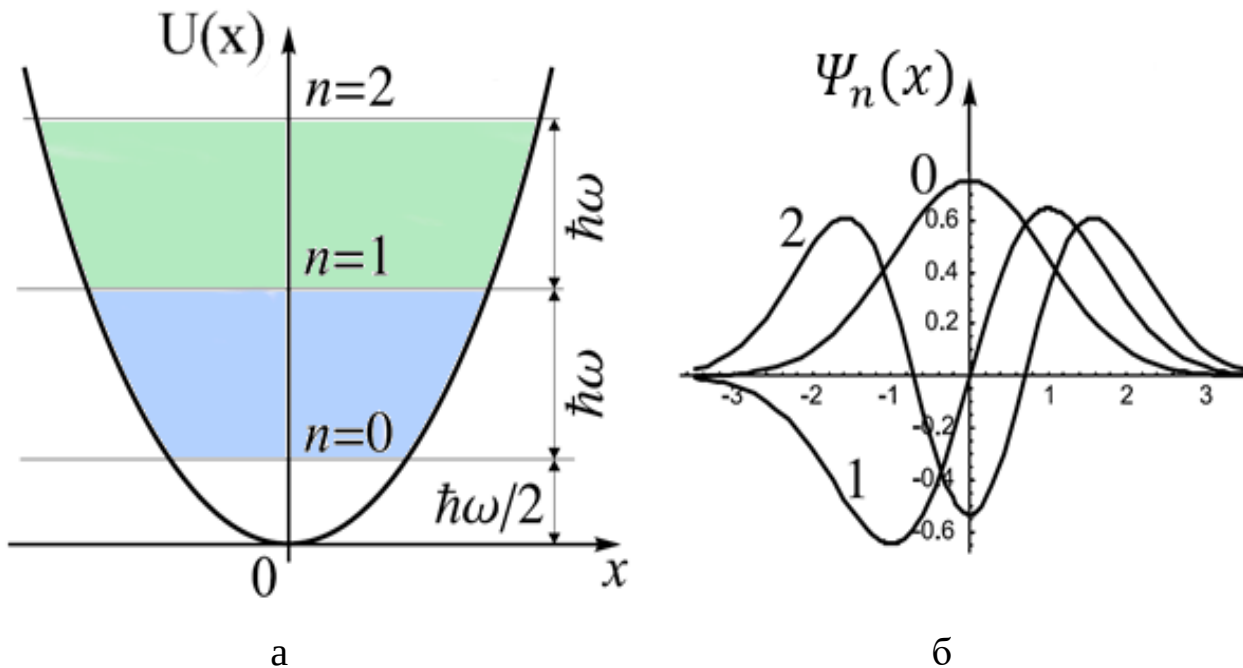


Рис. 5. а) эквидистантное расположение энергетических уровней; б) графики волновых функций $\Psi_n(x)$.

Основное состояние осциллятора имеет ненулевую энергию $E_n = \hbar\omega/2$ (которая отсчитывается от «дна» потенциальной ямы). Это так называемая **энергия нулевых колебаний**. Наличие нулевых колебаний не противоречит **принципу** неопределённостей, не позволяющему частице опуститься на «дно». Существование таких колебаний экспериментально подтверждается, например, при исследовании рассеяния электронов на ионах кристаллической решетки при температурах вблизи абсолютного нуля. Основному состоянию соответствует волновая функция

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) \quad (3.25)$$

Поскольку при удалении от положения равновесия потенциальная энергия монотонно возрастает непрерывным образом, волновые функции будут ненулевыми и в классически недоступной области, хотя они и быстро (экспоненциальным образом) затухают с увеличением $|x|$.

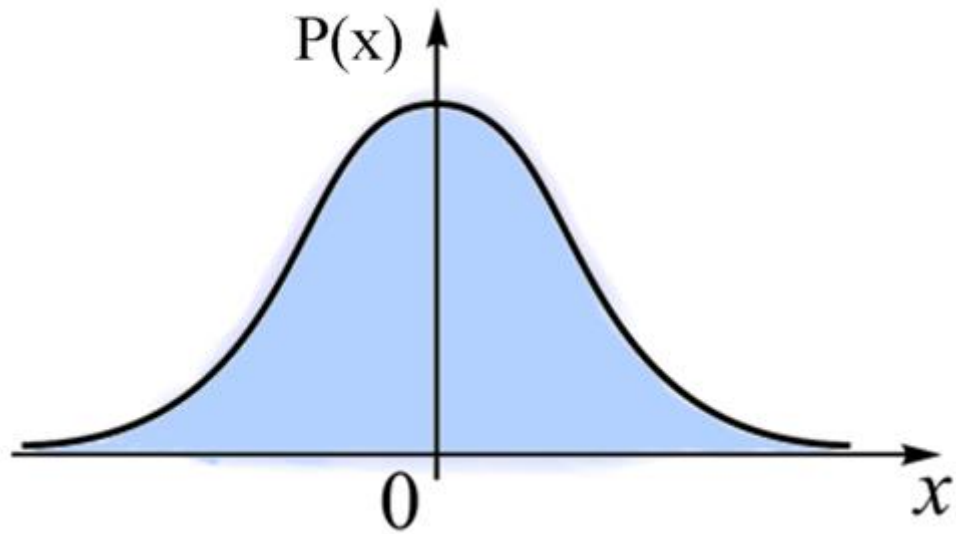


Рис. 6. График плотности вероятности в основном состоянии.

График плотности вероятности в основном состоянии даётся в качестве примера на рис. 6. Он представляет собой гауссову кривую.

§ 3.3. Одномерное движение в однородном поле

Рассмотрим одномерное движение частицы с массой m под действием постоянной силы F . Потенциальная энергия частицы в этом случае имеет вид

$$U(x) = -Fx \quad (3.26)$$

Определим энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в поле (3.26).

Стационарное уравнение Шрёдингера для такого движения имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - Fx\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3.27)$$

Классическое движение частицы в потенциале (3.26) ограничено только слева точкой поворота $a = -E/F$ (рис. 7). Поэтому движение инфинитивно в одну сторону ($x \rightarrow +\infty$), а энергетический спектр непрерывный и невырожденный. Граничные условия, налагаемые на $\Psi(x)$:

$$\Psi(-\infty) = 0; \quad \Psi(+\infty) \text{ ограничено.}$$

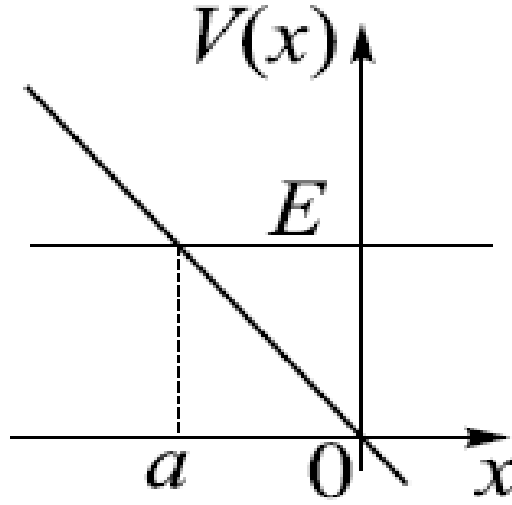


Рис. 7. График классического движения частицы в потенциале

Заменой переменных $\xi = \left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(x + \frac{E}{F}\right)$ при заданном E уравнение (3.27) приводится к уравнению Эйри

$$\Phi''(\xi) + \xi\Phi(\xi) = 0 \quad (3.28)$$

с граничными условиями

$$\Phi(-\infty) = 0; \quad \Phi(+\infty) \text{ ограничено,} \quad (3.29)$$

где $\Phi(\xi) = \Psi(x)$.

Решение уравнения (3.28) с граничными условиями (3.29) выражается через функцию Эйри:

$$\Phi(\xi) = C \text{Ai}(-\xi) \quad (3.30)$$

Мы не будем здесь выписывать явный вид нормировочной константы C .

В дальнейшем нам понадобится асимптотический вид (3.30) вдали от точек поворота ($|\xi| \gg 1$), который может быть получен из известных асимптотических выражений для функций Бесселя:

$$\text{при } \xi \rightarrow -\infty \quad \Phi(\xi) \simeq \frac{C}{2|\xi|^{1/4}} \exp\left[-\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right];$$

$$\text{при } \xi \rightarrow +\infty \quad \Phi(\xi) \simeq \frac{C}{\xi^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}\xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right].$$

§ 3.4. Момент количества движения

Трёхмерное движение в микромире, как и в классической механике, не всегда можно свести к трём независимым одномерным движениям. В микромире трёхмерное движение имеет некоторые качественные отличия от классической механики.

Момент количества движения материальной точки в классической механике выражается через координату и импульс соотношением:

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}].$$

В квантовой механике соответствующая величина называется также орбитальным моментом, и ей соответствует эрмитов оператор:

$$\hat{L} = [\vec{r} \times \hat{p}] \quad (3.31).$$

В квантовой механике невозможно указать определённые значения L ввиду совместной неизмеримости его декартовых компонент:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z; \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x; \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y.$$

Совместно измеримыми здесь оказываются только лишь L^2 и проекция L на выделенное направление, например, L_z . Собственные значения $\hat{L}_z$ квантуются и равны целому числу постоянных Планка: $L_z = m\hbar, m = 0, \pm 1, \dots$. Соответствующие собственные функции также известны в полярных координатах. Ниже мы рассмотрим задачу нахождения определённых координат L^2 .

Рассмотрение удобно провести в сферических координатах (r, θ, φ) , связанных с декартовыми известными соотношениями:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi; \quad y = r \sin \theta \sin \varphi; \quad z = r \cos \theta,$$

где

$$r \geq 0; \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi; \quad 0 \leq \theta \leq \pi.$$

В сферических координатах оператор орбитального момента содержит только угловые переменные:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.32)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta\varphi}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (3.33)$$

где $\nabla_{\theta\varphi}^2$ — угловая часть оператора Лапласа.

Запишем уравнение для собственных функций и собственных значений оператора $\hat{L}^2$ в сферических координатах:

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Psi(\theta, \varphi) = (L^2) \Psi(\theta, \varphi) \quad (3.34)$$

Собственное значение здесь следует понимать как единый символ, а не « L в квадрате». Поэтому оно взято в скобки.

Граничные условия к уравнению (3.34) сводятся к периодичности (для обеспечения однозначности):

$$\Psi(\theta, \varphi) = \Psi(\theta, \varphi + 2\pi); \quad \Psi(\theta, \varphi) = \Psi(\theta + \pi, \varphi) \quad (3.35)$$

Условие однозначности требует *регулярности* $\Psi(\theta, \varphi)$ в особых точках $\theta = 0, \pi$.

Решение уравнения (3.34) целесообразно искать с учётом определённых значений L_z вследствие его совместной измеримости с L^2 , т.е. в факторизованном виде:

$$\Psi(\theta, \varphi) = \Psi_{m_l}(\theta, \varphi) = \Theta_{m_l}(\theta) e^{im_l \varphi} \quad (3.36)$$

где m_l — так называемое **магнитное квантовое число**, соответствующее значению $L_z = m_l \hbar$.

Подстановка (3.36) в (3.34) приводит к обыкновенному дифференциальному уравнению для $\Theta(\theta)$:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{m_l}}{d\theta} \right) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \Theta_{m_l}(\theta) + \lambda \Theta_{m_l}(\theta) = 0 \quad (3.37)$$

где

$$\lambda(L^2)/\hbar^2 \quad (3.38)$$

Заменой переменных $t = \cos \theta$ (при этом из требования периодичности по θ получаем, что $\sin \theta = +\sqrt{1-t^2}$) это уравнение преобразуем к виду:

$$\left[\frac{d}{dt} (1-t^2) \frac{d}{dt} - \frac{m_l^2}{1-t^2} + \lambda \right] Q_{m_l}(t) = 0 \quad (3.39)$$

где $Q_{m_l}(t) = \Theta_{m_l}(\theta)$, $|t| \leq 1$. Непрерывность его решений следует из непрерывности коэффициентов при $\Theta_{m_l}(t)$.

Уравнение (3.39) имеет регулярные в особых точках $t = \pm 1$ решения при дискретных значениях λ :

$$\lambda = \lambda_l = l(l+1), \quad \text{где } l = |m_l|, |m_l| + 1, \dots$$

Это присоединённые функции Лежандра $P_l^{|m_l|}(t)$.

Собственные значения L^2 выражаются через λ в соответствии с (3.38):

$$(L^2)_l = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, \dots \quad (3.40)$$

Квантовое число l называется *орбитальным*.

Нормированные на единичной сфере собственные функции L^2 называются *сферическими функциями*:

$$Y_{lm_l}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!}} P_l^{|m_l|}(\cos \theta) e^{im_l \varphi} \quad (3.41)$$

При заданном орбитальном квантовом числе l магнитное квантовое число m_l может принимать значения $0, \pm 1, \dots, \pm l$. Собственные значения $\hat{L}^2$ *не зависят от магнитного квантового числа*, поэтому они будут *вырожденными* с кратностью

$$g_l = 2l + 1 \quad (3.42)$$

Магнитное квантовое число m соответствует определённым значениям L_z . Поэтому собственные значения $\hat{L}^2$ вырождены по величине L_z . Данный феномен есть следствие инвариантности оператора $\hat{L}^2$ относительно поворотов системы координат вокруг начала координат.

Состояния с определёнными значениями L^2 обладают и определённой чётностью:

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \text{т.е. } P_l = (-1)^l \quad (3.43)$$

Таким образом, величина чётности полностью определяется величиной L^2 через орбитальное квантовое число.

Сферические функции образуют на единично сфере полную ортонормированную систему — базис:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (3.44)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta(\cos \theta' - \cos \theta) \delta(\varphi' - \varphi) \quad (3.45)$$

Приведём явный вид некоторых сферических функций, часто используемых в приложениях:

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \quad Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta;$$

$$Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \quad (3.46)$$

Отметим следующий интересный факт: при $|m| = l$ равенство $(L^2)l = \max L_z^2 = \hbar^2 l^2$, очевидное из классических соображений, **не выполняется**. Это прямое следствие совместной неизмеримости декартовых компонент $\vec{L}$. Невозможно подобрать такое состояние, в котором вектор $\vec{L}$ был бы ориентирован строго вдоль оси O_z (рис. 8). В противном случае это привело бы к нулевым (т.е. вполне определённым) значениям проекций L_x и L_y наряду с L_z , что невозможно в силу их совместной неизмеримости. Таким образом, в любом состоянии вектор $\vec{L}$ с ненулевой вероятностью отклоняется от оси O_z , так что $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \hbar^2 l/2$. Это и есть наглядное проявление совместной неизмеримости проекций L . С ростом орбитального квантового числа такая неопределённость сказывается всё слабее: $(L^2 - L_z^2)/L^2 \sim l^{-1}$. В классическом пределе ($\hbar \rightarrow 0$) этот эффект становится исчезающе малым.

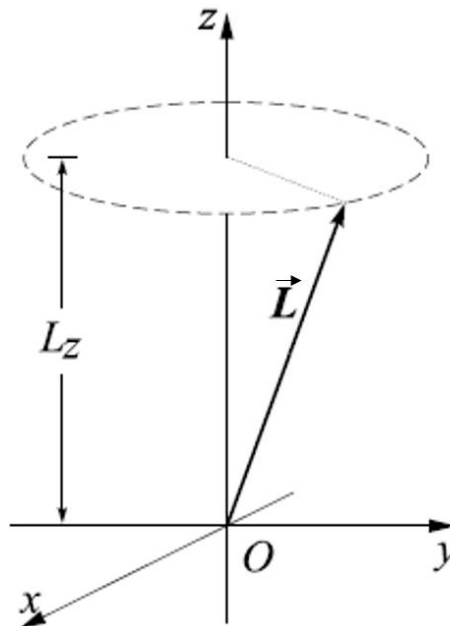


Рис. 8. Вектор момента импульса.

Квантовая теория углового момента чрезвычайно удобна для изучения движения в центральном поле.

§ 3.5. Общие свойства движения в центральном поле.

Центральным называется поле, в котором потенциальная энергия частицы *зависит только от расстояния до силового центра и не зависит от направления радиуса вектора $\vec{r}$* : $U(\mathbf{r}) = U(|\mathbf{r}|)$.

Задача о движении микрочастицы в постоянном центральном поле является трёхмерной и требует решения стационарного уравнения Шрёдингера в частных производных. Однако сферическая симметрия гамильтониана позволяет кардинально упростить задачу.

Исследуем движение точечной частицы с массой m в центральном поле. Гамильтониан удобно представить в сферических координатах. Вспоминая вид оператора Лапласа в сферической системе координат, имеем:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r) \quad (3.47)$$

Данная форма гамильтониана представляется наиболее удобной для исследования общих свойств движения в центральном поле.

Прежде всего, найдём интегралы состояния. *Полная энергия E* является интегралом состояния для всякого стационарного состояния. В сферической системе координат операторы $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ действуют только на *угловые переменные* (см. (3.32), (3.33)). Поэтому *специфическими для центрального поля* интегралами состояния будут также L^2 и L_z вследствие коммутации соответствующих операторов с гамильтонианом (3.47). Таким образом, в центральном поле имеется три интеграла состояния. Число указанных интегралов состояния равно числу степеней свободы частицы. Все они независимы и измеримы совместно. Поэтому данные интегралы состояния образуют *полный набор*. Их достаточно для максимально полного описания движения частицы в центральном поле.

Стационарное уравнение Шрёдингера с гамильтонианом (3.47)

$$\hat{H}\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.48)$$

является трёхмерным дифференциальным уравнением в частных производных. Стандартным математическим методом разделения переменных все три переменные можно разделить. Здесь, однако, более удобным будет отделение угловых переменных из *физических соображений*.

Поскольку операторы (3.47), $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ коммутируют друг с другом, у них есть общие собственные функции. Поэтому будем искать такие решения уравнения Шредингера (3.48), которые автоматически удовлетворяют и уравнению (3.34). Так как $Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$ — собственные функции и для $\hat{L}^2$ и для $\hat{L}_z$, решение (3.48) следует искать в виде:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} R(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \quad (3.49)$$

где $R(r)$ — неизвестная *радиальная волновая функция*. Множитель r^{-1} введён для дальнейшего удобства (исключения первой производной в уравнении) для $R(r)$. При выборе функции φ в виде (3.49) автоматически фиксируются определённые значения $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$.

После подстановки (3.49) в (3.48) и преобразований с учётом (3.34) приходим к *радиальному уравнению Шрёдингера* для функции $R(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} R_{El}(r) + \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) \right] R_{El}(r) = E R_{El}(r) \quad (3.50)$$

По своей структуре оно является уравнением Шредингера для *более простого одномерного движения* этой частицы в поле с эффективной потенциальной энергией

$$U_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) \quad (3.51)$$

отличающейся от $U(r)$ дополнительным центробежным отталкиванием (рис. 9).

Эффективный потенциал (3.51) не зависит от магнитного квантового числа m_l , поэтому радиальная волновая функция в уравнении (3.50) определяется только полной энергией и квадратом орбитального момента, но не его проекцией (в уравнении (3.50) к функции добавлены соответствующие квантовые числа). Полная энергия, в свою очередь, тоже не будет зависеть от магнитного квантового числа, так что в центральном

поле все стационарные состояния оказываются всегда вырожденными по величине L_z с кратностью $2l + 1$.

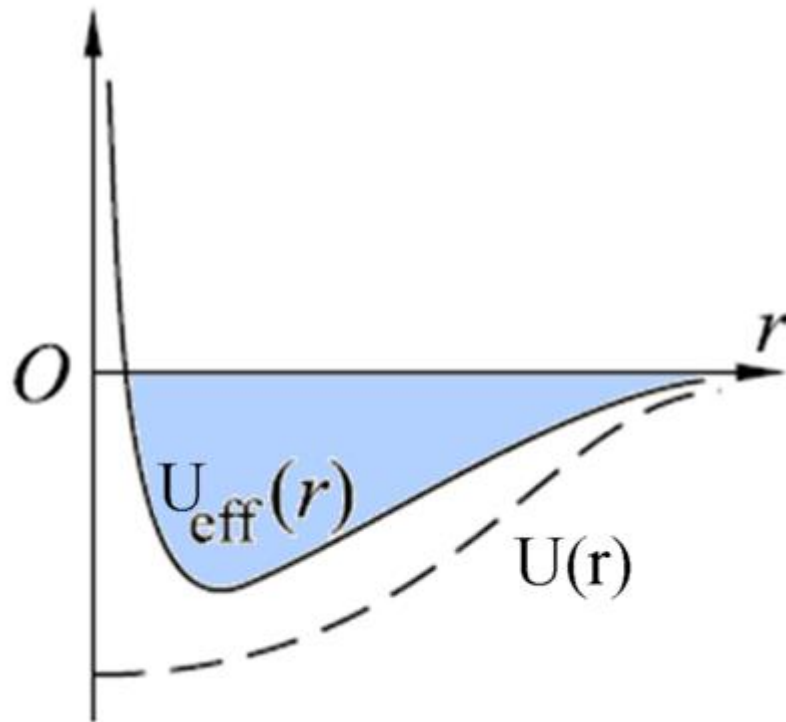


Рис. 9. Зависимость энергии от расстояния.

Важная роль величины L^2 делает целесообразной классификацию стационарных состояний в центральном поле по величине орбитального квантового числа l (такие состояния называют иногда *орбиталями*). При этом используются спектроскопические обозначения. Так, например, состояния с $l = 0$ называются s-состояниями, состояния с $l = 1$ — p-состояниями и т.д. (табл. 1). Данные символы являются первыми буквами соответствующих английских терминов, используемых в описании оптических спектров.

Таблица 1. Спектроскопические символы

l	0	1	2	3	4	...
символ	s	p	d	f	g	...
расшифровка	sharp	principal	diffuse	fundamental	—	—

Всё дальнейшее рассмотрение базируется теперь на уже известных свойствах одномерного движения.

Сформулируем, например, граничные условия к уравнению (3.50). Его особой точкой является $r = 0$. Поэтому для ограниченности полной волновой функции $\psi(r, \theta, \varphi)$ в начале координат необходимо потребовать выполнение *первого* граничного условия (см. формулу (3.49), где в знаменателе стоит r)

$$R_{El}(0) = 0 \quad (3.52)$$

Данный факт согласуется с наличием центробежного отталкивания.

Второе граничное условие формулируется для случая $r \rightarrow \infty$ и определяется характером одномерного движения. В случае **финитного** движения частица не может уйти на бесконечность, так что

$$R_{El}(r)|_{r \rightarrow \infty} = 0 \quad (3.53)$$

В случае **инфинитного** движения условие (3.53) заменяется условием **конечности**, т.е. **ограниченности** решения при всех r .

Структура **энергетического спектра** определяется как видом потенциала $U(r)$, так и характером движения (финитное или инфинитное).

Условие ортонормировки для радиальных функций $R_{El}(r)$ наиболее просто формулируется опять же с использованием аналогии эффективного потенциала (3.51) с потенциалом одномерного движения. Исходя из свойств радиального уравнения Шредингера (3.50), получаем для финитного движения (дискретного спектра энергий)

$$\int_0^\infty R_{E_{n'},l}(r)R_{E_n,l}(r)dr = \delta_{E_{n'},E_n} \quad (3.54)$$

(в этом случае функции можно выбрать вещественными); для инфинитного движения (непрерывный спектр энергий)

$$\int_0^\infty R_{E',l}^*(r)R_{El}(r)dr = \delta(E' - E) \quad (3.55)$$

Заметим также, что гамильтониан (3.47), не изменяется при *инверсии* системы координат ($r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi, \varphi \rightarrow \pi + \varphi$), так что интегралом состояния в центральном поле будет и **чётность**. Однако, для заданного значения квадрата момента импульса чётность не является независимой

величиной, а однозначно определяется орбитальным квантовым числом l (см. (3.43)).

Таким образом, решение квантовомеханической задачи в центральном поле базируется на той же идее, что и в соответствующей классической задаче: вместо трёхмерного исследуется более простое одномерное движение в эффективном потенциале. Наиболее существенное физическое различие состоит в том, что значения квантовых интегралов состояния образуют дискретный набор чисел.

Помимо волновой функции свободного движения с определённым импульсом (волна де Бройля: $\Psi_p(r, t) = C \exp\left[i\frac{pr - Et}{\hbar}\right]$) существуют также и состояния свободного движения с определёнными энергией, L^2 и L_z . Волновые функции таких состояний имеют следующий вид:

$$\Psi_{Elm_l}(r) = A j_l(kr) Y_{lm_l}(\theta, \varphi),$$

где $k = p/\hbar$, $p = \sqrt{2mE}$, $j_l(x)$ — сферическая функция Бесселя. Состояния с определённым импульсом и состояния с определёнными E , L^2 и L_z связаны друг с другом соотношением:

$$e^{ipr/\hbar} = 4\pi \sum_{lm_l} i^l j_l(kr) Y_{lm_l}^*(\theta_p, \varphi_p) Y_{lm_l}(\theta, \varphi),$$

где углы θ_p, φ_p задают направление вектора $\vec{p}$. Данное соотношение наглядно иллюстрирует совместную неизмеримость импульса и квадрата орбитального момента.

§ 3.6. Задача двух тел

Рассмотрим две материальные точки с массами m_1 и m_2 в силовом поле с потенциальной энергией $U(r_1, r_2)$ (включающей и взаимодействие частиц друг с другом). В общем случае в стационарном уравнении Шрёдингера для такой системы

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 \Psi(r_1, r_2) - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 \Psi(r_1, r_2) + U(r_1, r_2) \Psi(r_1, r_2) = E \Psi(r_1, r_2)$$

где $\nabla_1 \equiv \nabla_{r_1}$, $\nabla_2 \equiv \nabla_{r_2}$, переменные r_1 и r_2 разделить невозможно. Если же частицы взаимодействуют только друг с другом, т.е. внешние силы отсутствуют, то $U(r_1, r_2)$ зависит только от расстояния между частицами,

$$U(r_1, r_2) = U(r_1 - r_2) \quad (3.56)$$

и ситуация существенно упрощается. Исследуем именно этот случай.

Рассмотрим двухчастичное уравнение Шрёдингера с потенциалом (3.56):

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 \Psi(r_1, r_2) - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 \Psi(r_1, r_2) + U(r_1, r_2) \Psi(r_1, r_2) = E \Psi(r_1, r_2) \quad (3.57)$$

В нём удобно перейти к новым переменным r, R , связанным с r_1, r_2 соотношениями:

$$r = r_1 - r_2, \quad R = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2} \quad (3.58)$$

В классической механике r является относительной **координатой материальных точек**, R — координатой их **центра масс**; преобразование (3.58) называется переходом в **систему центра масс**.

Запишем уравнение (3.57) в системе центра масс. Для этого выразим операторы ∇_1 и ∇_2 через ∇_r и ∇_R :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r_1} &= \frac{\partial r}{\partial r_1} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial R}{\partial r_1} \frac{\partial}{\partial R} = \frac{\partial}{\partial r} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial R}, \\ \frac{\partial}{\partial r_2} &= \frac{\partial r}{\partial r_2} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial R}{\partial r_2} \frac{\partial}{\partial R} = \frac{\partial}{\partial r} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial R}, \end{aligned}$$

откуда, в силу независимости частных производных от порядка дифференцирования, имеем:

$$\begin{aligned} \nabla_1^2 &= \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial r \partial R} + \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial R^2}, \\ \nabla_2^2 &= \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial r \partial R} + \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial R^2} \end{aligned} \quad (3.59)$$

Будем искать решение уравнения (3.57) в виде

$$\Psi(r_1, r_2) = \psi(r) \Phi(R) \quad (3.60)$$

После подстановки (3.59) и (3.60) в (3.57) и деления обеих частей уравнения на (3.60) получаем уравнение с **разделёнными** переменными r и R :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla_r^2 \psi(r)}{\psi(r)} + U(r) = \frac{\hbar^2}{m_1 + m_2} \frac{\nabla_R^2 \Phi(R)}{\Phi(R)} - E \quad (3.61)$$

где

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (3.62)$$

— соответственно *полная* и *приведённая* массы частиц. Независимость координат r и R приводит к тому, что обе части уравнения (3.61) обращаются в некоторую константу ε . В результате приходим к двум *независимым* уравнения для функций $\psi(r)$ и $\Phi(R)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \psi(r) + U(r) \psi(r) = \varepsilon \psi(r) \quad (3.63)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \Phi(R) = \varepsilon' \Phi(R) \quad (3.64)$$

$$E = \varepsilon + \varepsilon'$$

Мы получаем существенное упрощение задачи по сравнению с (3.57).

Дадим интерпретацию уравнений (3.63), (3.64). Уравнение (3.63) является *одночастичным* стационарным уравнением Шрёдингера для *фиктивной* частицы с массой m (уравнение движения частицы с приведённой массой). Уравнение (3.64) — это тоже одночастичное стационарное уравнение Шрёдингера, но для свободного движения фиктивной частицы с массой $m_1 + m_2$ (уравнение движения центра масс, или переносного движения). Таким образом, в квантовой механике задача двух тел решается в полной аналогии с задачей двух тел в классической механике, т.е. переходом из лабораторной системы отсчёта в систему центра масс, только вместо уравнения Ньютона используется уравнение Шрёдингера.

Отметим в заключение, что если массы частиц различаются существенно (например, $m_1 \ll m_2$), то влияние лёгкой частицы на движение тяжёлой будет пренебрежимо малым: $m \approx m_1$ и $m_1 + m_2 \approx m_2$.

§ 3.7. Движение в кулоновском поле притяжения. Атом водорода

Рассмотрим движение двух точечных частиц: электрона с массой m_e и зарядом $-e$ ($e > 0$) и ядра с массой M и зарядом $+Ze$. Они взаимодействуют по закону Кулона:

$$U(r) = \frac{Ze^2}{r}, \quad (3.65)$$

где r — относительное расстояние. Для исследования такого движения можно использовать результаты, полученные в предыдущих разделах. После подстановки (3.49) в (3.48) и преобразований (3.34) приходим к радиальному уравнению Шрёдингера для функции $R(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} R_{El}(r) + \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] R_{El}(r) = ER_{El}(r) \quad (3.66)$$

где $l = 0, 1, \dots$

Уравнение (3.66) описывает одномерное движение в эффективном потенциале

$$U_{\text{eff}}(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (3.67)$$

График $U_{\text{eff}}(r)$ даётся на рис. 10.

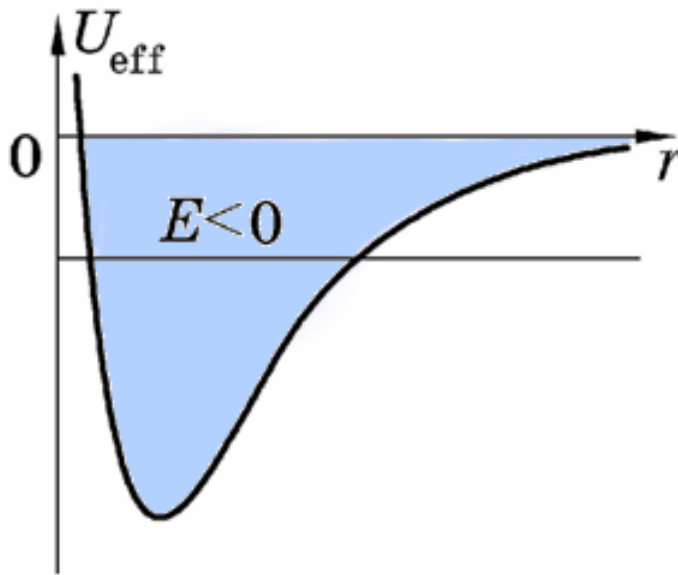


Рис. 10. Зависимость $U_{\text{eff}}(r)$.

При $E < 0$ движение будет финитным, так как электрон находится в «потенциальной яме», образованной возрастающим кулоновским потенциалом и квадратично убывающим центробежным отталкиванием; при $E > 0$ — инфинитным. Мы будем рассматривать случай финитного

движения, т.е. связанных состояний с дискретным спектром энергии. Таким образом, электрон и атомное ядро с зарядом Z образуют связную атомную систему с одним электроном: случай $Z = 1$ соответствует атому водорода, $Z = 2$ — иону He^+ , $Z = 3$ — иону Li^{2+} и т.д. В дальнейшем мы будем использовать также понятие «водородоподобный ион».

Будем искать энергии стационарных состояний и волновые функции относительного движения в водородоподобном ионе. Для связанных состояний граничные условия к уравнению (3.66) даются выражениями (3.52) и (3.53). Неизвестными являются E и $R_{El}(r)$.

Для решения уравнения (3.66) используем тот же самый метод, что и в случае осциллятора. Прежде всего, перейдём в (3.66) к безразмерной координате $\rho = rZ/a_0$ (константа a_0 с размерностью длины будет определена позднее; это «естественная» единица длины для атома, позволяющая существенно упростить все математические выкладки):

$$\frac{d^2 \mathcal{R}_{\varepsilon l}}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) + \frac{ma_0 e^2}{\hbar^2} \frac{2}{\rho} \mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) + 2 \frac{ma_0^2}{\hbar^2 Z^2} E \mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) = 0,$$

где $\mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) = \mathcal{R}_{El}(r)$. Константу a_0 определим, потребовав обращения в единицу множителя перед $2/\rho$. Если в качестве ядра рассматривать протон, то приведённая масса m будет слабо отличаться от массы электрона ($m_p/m_e \approx 1836$). Для электрона $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$ — так называемый **боровский радиус**, или **атомная единица длины**. Соответственно величина $\hbar^2/ma_0^2 = e^2/a_0 = 27,24 \text{ эВ}$ называется **атомной единицей энергии**. постоянный коэффициент перед $\mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho)$ тоже будет безразмерным. Обозначим его ε . Таким образом, в безразмерных переменных

$$\mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) = \mathcal{R}_{El}(r); \quad \rho = \frac{r}{Za_0}; \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}; \quad \varepsilon = \frac{E}{Z^2 E_0}; \quad E_0 = \frac{e^2}{a_0} \quad (3.68)$$

краевая задача (3.66), (3.52), (3.53) принимает вид:

$$\frac{d^2 \mathcal{R}_{\varepsilon l}}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) + \frac{2}{\rho} \mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) + 2\varepsilon \mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) = 0; \quad (3.69)$$

$$\mathcal{R}_{\varepsilon l}(0) = 0; \quad (3.70)$$

$$\mathcal{R}_{\varepsilon l}(\infty) = 0. \quad (3.71)$$

Неизвестными в ней являются ε и $\mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho)$, связанные с E и $R_{El}(r)$ соотношениями (3.68). Решение задачи всегда будет удовлетворять стандартному условию непрерывности вследствие непрерывности коэффициентов уравнения (3.69).

Исследуем решение уравнения (3.69) в особых точках $\rho = 0, \infty$.

При $\rho \ll 1$ в (3.69) достаточно ограничиться центробежным слагаемым:

$$\frac{d^2 \mathcal{R}_{\varepsilon l}}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) = 0 \quad (3.72)$$

и искать решение (3.72) в виде $\mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) = \rho^\lambda$ с неизвестным λ . После соответствующей подстановки в (3.72) находим:

$$\lambda = l + 1, -l.$$

Второе решение не удовлетворяет граничному условию (3.70) и должно быть исключено. Таким образом, в окрестности нуля решение уравнения (3.69) имеет вид:

$$\mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) \sim \rho^{l+1}. \quad (3.73)$$

При $\rho \gg 1$ в (3.69) можно пренебречь и кулоновским и центробежным слагаемыми:

$$\frac{d^2 \mathcal{R}_{\varepsilon l}}{d\rho^2} + 2\varepsilon \mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) = 0 \quad (3.74)$$

и искать решение (3.74) в виде $\mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) = e^{-\alpha\rho}$ с неизвестным α . После соответствующей подстановки в (3.74) находим

$$\alpha = \sqrt{-2\varepsilon}. \quad (3.75)$$

Решение с $\alpha = -\sqrt{-2\varepsilon}$ необходимо исключить, так как оно противоречит граничному условию (3.71) (напомним, что $\varepsilon > 0$).

Таким образом, решение уравнения (3.69) следует искать в виде:

$$\mathcal{R}_{\varepsilon l}(\rho) = v(\rho)e^{-\alpha\rho}, \quad (3.76)$$

где неизвестная функция $v(\rho)$, с одной стороны, при $\rho \ll 1$ должна иметь вид (3.73), а с другой, вследствие (3.71), должна удовлетворять условию:

$$v(\rho)e^{-\alpha\rho}|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \quad (3.77)$$

Функцию $v(\rho)$ удобно представить в виде ряда

$$v(\rho) = \sum_{v=0}^{\infty} \beta_v \rho^{v+l+1} \quad (3.78)$$

с неизвестными коэффициентами β_v .

Подстановка (3.76) и (3.78) в (3.69) приводит к следующему рекуррентному соотношению для коэффициентов β_v :

$$\beta_{v+1} = \frac{2[\alpha(v+l+1) - 1]}{(v+l+2)(v+l+1) - l(l+1)} \beta_v, \quad (3.79)$$

позволяющему выразить все слагаемые ряда (3.78) через произвольное β_0 , которое может быть определено из условия нормировки.

При $v \gg 1$

$$\frac{\beta_v}{\beta_{v-1}} \simeq \frac{2\alpha}{v}.$$

Это означает, что при произвольном α ряд (3.78) ведёт себя как $e^{2\alpha\rho}$, что противоречит граничному условию (3.71). Параметр α в рекуррентном соотношении (3.79) является неизвестным, поскольку он связан с подлежащей определению энергией E соотношениями (3.75) и (3.68). Поэтому, если выбрать этот параметр в виде

$$\alpha = \alpha_{n_r} l = (n_r + l + 1)^{-1}, \quad n_r = 0, 1, \dots, \quad (3.80)$$

ряд (3.78) оборвётся, превратившись в полином. Соответственно из (3.80), (3.75), (3.68) находим энергии стационарных состояний электрона в водородоподобном ионе:

$$E_{n_r l} = -\frac{Z^2}{2(n_r + l + 1)^2} \frac{e^2}{a_0}, \quad l, n_r = 0, 1, \dots \quad (3.81)$$

Параметр n_r называется **радиальным квантовым числом**. Оно нумерует состояния одномерного движения в эффективном потенциале (3.67) при заданном значении орбитального квантового числа l и **число нулей (узлов)** соответствующей радиальной волновой функции.

Как видно из (3.81), энергии $E_{n_r l}$ зависят только от суммы квантовых чисел n_r и l , но не от них самих по отдельности. Это означает, что после введения обозначения

$$n = n_r + l + 1$$

спектр (3.81) примет вид:

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2n^2 a_0}, n = 1, 2, \dots \quad (3.82)$$

Мы получили формулу Бора. Так как радиальное квантовое число n_r принимает значения $0, 1, \dots$, то квантовое число l при фиксированном n будет принимать значения $l = n - n_r - 1 = 0, 1, \dots, n - 1$, то есть всего n значений. Таким образом, энергетические уровни (3.82) вырождены по величине L^2 с кратностью $l + 1$. Это так называемое «случайное» вырождение обусловлено спецификой кулоновского потенциала, а именно наличием дополнительного интеграла движения – вектора Рунге-Ленца, которому соответствует оператор

$$\hat{A} = \frac{r}{r} - \frac{[\hat{p} \times \hat{L}] - [\hat{L} \times \hat{p}]}{\mu Z e^2}.$$

Учитывая вырождение каждого значения L^2 по величине L_z , получаем кратность вырождения уровней (3.82):

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2, \quad (3.83)$$

которая, как и энергия, определяется одним лишь главным квантовым числом. Спектр (3.82) называется водородным, или **ридберговским**. Число его уровней бесконечно. Ограничивающее его сверху нулевое значение энергии является **точкой сгущения** уровней:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E_n = -0.$$

Радиальные волновые функции стационарных состояний $R_{nl}(r)$ можно выразить через вырожденную гипергеометрическую функцию ${}_1F_1$:

$$R_{nl}(r) = N_{nl} r \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l \exp \left(-\frac{Zr}{na_0} \right) {}_1F_1 \left(-n + l + 1; 2l + 2; \frac{2Zr}{na_0} \right), \quad (3.84)$$

где

$$N_{nl} = \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^{3/2} \frac{1}{(2l + 1)!} \sqrt{\frac{(n + l)!}{2n(n - l - 1)!}}$$

— нормировочный множитель. При заданном l и различных n волновые функции (3.84) взаимно ортогональны и нормированы на единицу условием (3.54).

Как и в любом центральном поле, функции (3.84) параметрически зависят от орбитального квантового числа l . Поэтому для классификации состояний радиального движения в водородоподобном ионе существует система специальных обозначений — *спектроскопических символов*. Они состоят из двух частей: на первом месте ставится главное квантовое число, на втором — буква, соответствующая орбитальному квантовому числу.

Таким образом, волновые функции орбитальных состояний водородоподобного иона имеют вид:

$$\Psi_{nlm_l}(r) = \frac{1}{r} R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi), \quad (3.85)$$

где $R_{nl}(r)$ дается соотношением (3.84). Они определяются тремя квантовыми числами: главным $n = 1, 2, \dots$, орбитальным $l = 0, 1, \dots, n - 1$ и магнитным $m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$.

Основным состоянием атома водорода является $1s$ -состояние. Его волновая функция в сферических координатах имеет вид:

$$\Psi_{1s}(r) = \Psi_{100}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right), \quad (3.86)$$

а энергия

$$E_{1s} = -\frac{Z^2 e^2}{2 a_0}. \quad (3.87)$$

Для атома водорода ($Z = 1$) $E_{1s} = 13,6$ эВ.

В классической постановке задачи движущийся по орбите электрон, непрерывно теряя энергию на излучение электромагнитных волн, должен был бы упасть на ядро, т.е. тогда бы $E \rightarrow -\infty$. По законам же микромира, **энергия электрона в атоме ограничена снизу**, что согласуется с принципом неопределенности. Плотность вероятности распределения электрона в соответствии с общими свойствами стационарных состояний не зависит от времени. Поэтому атом в основном состоянии может существовать сколь угодно долго. Таким образом, последовательная квантовая теория позволяет предсказать стабильность атома и дискретность его уровней энергии без использования таких гипотез, как постулаты Бора.

Заключение

Квантовая механика является крайне обширным разделом современной физики. В данном пособии нами рассмотрены лишь предпосылки возникновения данного направления, математический формализм и примеры некоторых классических задач. Охватить основные разделы квантовой механики в рамках учебного пособия не представляется возможным. Сложность квантовой механики для восприятия привела к тому, что возникло сразу несколько версий её интерпретации (Копенгагенская, Теория скрытых параметров, Многомировая, Теория де Бройля-Бома). С этой сложностью сопряжены ее увлекательность и интерес. Всё это в совокупности с огромнейшим фундаментальным и прикладным значением делает эту теорию одной из самых важных во всех областях науки.

На данный момент квантовая механика является законченной теорией и позволяет решать научные и технические задачи в рамках своей применимости. При этом классическая квантовая механика дала толчок к развитию многих современных направлений, среди них квантовая теория поля, квантовая теория гравитации, теория струн и суперструн, квантовая электродинамика и ряду других.

Однажды умудренный опытом профессор Филипп Жолли сказал Макс Планку, что занятие теоретической физикой дело бесперспективное, т.к. все что возможно там уже открыли, но он рискнул и первым произнес слово «квант». Так и сейчас не смотря на свою законченность, квантовая механика манит умы и сулит новые открытия.

Предметный указатель

амплитуда вероятности 22
атомная единица энергии 103
боровский радиус (атомная единица длины) 103
бра-вектор 53
вектор состояния 30
величина достоверная 44
вероятность перехода 45
волновая функция в координатном представлении 22
волновая функция в импульсном представлении 23
волновая функция в энергетическом представлении 23
дельта-функция 19
детерминизм по Лапласу 47
дисперсия 21
измерения идеальные 9
интеграл движения 79
кет-вектор 51
математическое ожидание 21
механика волновая 8
механика матричная 8
неравенство Шварца 62
оператор
- антиэрмитов 61
- импульса 33
- координаты 33
- наблюдаемый 64
- положительно определённый 61
- унитарный 62
- энергии (Гамильтона) 33
- эрмитов (сопряженный) 61
орбиталь 97
переменные дополнительные 41

переменные совместные 40
полиномы Эрмита 86
плотность распределения вероятности 18
принцип
- дополнительности 40
- линейной суперпозиции 14
- неопределённости 36
- причинности в квантовой механике 47
- причинности в классической механике 47
- соответствия 37, 46
- суперпозиции 14
результаты измерений 9
- достоверные 12
- случайные 12
система макроскопическая 8
символы спектроскопические 97
скобки Пуассона 68
«случайное» вырождение 106
соотношения неопределённостей 74
среднеквадратичное отклонение 21
уравнение
- Шрёдингера 78
- Вебера 86
теория классическая физическая 6
энергия нулевых колебаний 88
число
- квантовое главное 107
- квантовое магнитное 92
- квантовое орбитальное 93
- квантовое радиальное 106
функция вырожденная гипергеометрическая 86, 106

Указатель важнейших обозначений**Латинский алфавит**

$c(E_n) = c_n$ волновая функция в энергетическом (дискретном) представлении

D – дисперсия

E – полная механическая энергия

$\vec{e}_i$ – базисный вектор

${}_1F_1$ – вырожденная гипергеометрическая функция

$I(x)$ – распределение интенсивности величины x

H – оператор энергии или оператор Гамильтона

$h = 2\pi\hbar$ – постоянная Планка

$\hbar$ – постоянная Планка

M – масса ядра;

m – масса частицы

m_p – масса протона

m_l – магнитное квантовое число;

N – число измерений

n – главное квантовое число

n_r – радиальное квантовое число

P – оператор импульса

$p = \{p_1, p_2, \dots p_n\}$ – обобщённые импульсы

$p(x)$ – плотность вероятности случайной величины x

S – действие

V – скорость частицы;

$U(x)$ – потенциальная энергия

X – оператор координаты

$x = \{x_1, x_2, \dots x_n\}$ – обобщённые координаты

$\langle x \rangle$ – математическое ожидание

Греческий алфавит

δ – функция

σ – среднеквадратичное отклонение

$\varphi(p)$ волновая функция в импульсном представлении

$\psi(x)$ – волновая функция в координатном представлении

Список литературы

1. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Курс теоретической физики. В 10 т. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория). 6-е изд. М.: Физматлит, 2008. 800 с.
2. Балашов В.В., Долинов В.К. Курс квантовой механики. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. 336 с.
3. Сивухин Д.В. Атомная и ядерная физика: Учебное пособие. В 2-х ч. Ч. 1. Атомная физика. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1986. 416 с.
4. Парфенов П.С. Квантовая механика. Методическое пособие к практикуму по квантовой физике. СПб: НИУ ИТМО, 2012. 133 с.
5. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. В 9 т. Т. 8, 9. М.: Мир, 1978. 524 с.
6. Савельев И.В. Курс общей физики. В 3 т. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твёрдого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. 2-е изд., испр. М.: Наука. Главная редакция физикоматематической литературы, 1982. 304 с.
7. Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В. Квантовая физика: учеб. пособие. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2012. 527 с.
8. Клаудер Дж., Сударшан Э. Основы квантовой оптики. М.: Мир, 1970. 428 с.
9. Орир Дж. Физика. В 2 т. Т. 2. М.: Мир, 1981. 622 с.
10. Эткинс П. Кванты. Справочник концепций. М: Мир, 1977. 496 с
11. Двайт Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы. М.: Наука, 1973. 228 с.
12. Иродов И.Е. Задачи по квантовой физике: учеб. пособие для физ. специальностей вузов. М.: Высшая школа, 1991. 175 с.
13. Сборник задач по общему курсу физики. Атомная физика, физика ядра и элементарных частиц / под ред. Д.В. Сивухина. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1981. 224 с.

14. Парфёнов П.С. Квантовая механика. Методическое пособие к практикуму по специальным разделам физики. СПб: Университет ИТМО, 2018. 117 с.
15. Барабанов А.Л. Квантовая механика (конспект лекций). Часть 1. М.: МФТИ, 2005. 97 с.
16. Барабанов А.Л. Квантовая механика (конспект лекций). Часть 1. 2-я редакция. М.: МФТИ, 2015. 90 с.
17. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Наука. 1973. 704 с.
18. Иванов М.Г. Как понимать квантовую механику. М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2012. 516 с.
19. Дунаевский С.М. Лекции по квантовой механике и статистической физике. Квантовая механика: учеб. пособие. СПб: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2012. 68 с.
20. Сасскинд Л., Фридман А. Квантовая механика. Теоретический минимум. СПб: «Питер», 2015. 400 с.
21. Чернов П.С. Квантовая механика. Конспект лекций (избранные вопросы). Пенза: ПГУ, 2013. 126 с.

Захаров Павел Васильевич
Ерёмин Александр Михайлович
Манаков Николай Александрович
Апушкинский Евгений Геннадиевич
Еремеев Евгений Алексеевич

ВВЕДЕНИЕ

В КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

Учебное пособие

Налоговая льгота – Общероссийский классификатор продукции
ОК 005-93, т. 2; 95 3005 – учебная литература

Подписано в печать 11.01.2022. Формат 60×84/16. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 7,25. Тираж 100. Заказ 0016.

Отпечатано с готового оригинал-макета, предоставленного авторами,
в Издательско-полиграфическом центре Политехнического университета.
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
Тел.: (812) 552-77-17; 550-40-14.