ЧАСТЬ 2
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

1. Введение

Интерференция электронов

Представим себе мысленный эксперимент: S излучает электроны, а детектор D регистрирует их. Они попадают по отдельности на экран B, как отдельные частицы. Мы измеряем вероятность P попадания за 1 сек электронов в детектор на расстоянии x от оси.

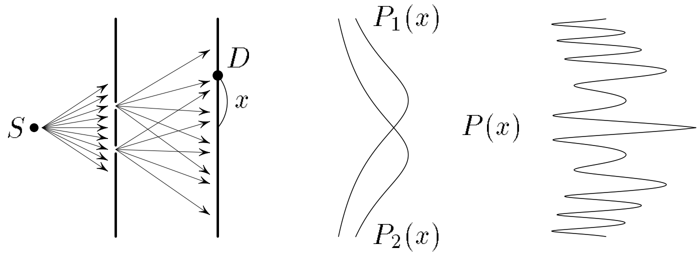

Рис. 2.1.

Поскольку электроны ведут себя как частицы, можно было бы предположить, что каждый проходит через одно из отверстий и в случае двух открытых отверстий вероятность попадания в точку x была бы суммой вероятностей $P_{\text{в}} = P_{\text{а}} + P_{\text{б}}$. Но опыт дает другую картинку. На самом деле $P(x)$ совпадает с распределением интенсивности при интерференции волн. Поэтому (по аналогии) можно предположить, что существует амплитуда вероятности $\varphi(x)$ такая, что

$$P(x) = |\varphi(x)|^2, \quad \varphi(x) = \varphi_1(x) + \varphi_2(x),$$
$$P_1(x) = |\varphi_1|^2, \quad P_2(x) = |\varphi_2|^2.$$

Мы вычисляем интенсивность волн, которые достигли бы прибора, а затем интерпретируем эту интенсивность как вероятность.

Как сказывается влияние наблюдения на этот эксперимент?

Попробуем определить, через какое отверстие проходит электрон, например, с помощью света. Свет рассеивается на электронах. Это явление называется *эффектом Комптона*.

В результате мы точно знаем, что электрон проходит либо через отверстие 1, либо через отверстие 2. В этом случае $P = P_1 + P_2$.

Но, используя свет, мы вносили возмущение в поведение электронов. Какова его интенсивность? Вспомним, что свет состоит из фотонов, каждый из которых имеет энергию $E = h\nu$ и импульс $p = h/\lambda$. Если мы зарегистрировали рассеянный на электроне фотон (и следовательно, узнали через какое отверстие прошел электрон), то фотон передал электрону импульс порядка h/λ и мы получили неопределенность такого же порядка в регистрации положения электрона. Ослабить влияние света на электрон можно увеличивая λ, но это приведет к уменьшению точности, с которой мы определяем, где проходит электрон. Неточности Δx и Δp в измерении координат и импульса электрона связаны поэтому соотношением неопределенности Гейзенберга $\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$.

Парадокса в утверждении, что электрон — это *частица–волна* не возникает, если любое физическое вмешательство с целью определить, через какое отверстие проходит электрон, приводит к искажению опыта и интерференция исчезает.

В силу этого с каждой постановкой опыта связан отказ от одной из двух сторон описания физического явления. Эти две стороны являются *дополнительными* одна к другой. Этот принцип называют *принципом дополнительности Бора*.

Применяя принцип неопределенности к атому водорода, можно оценить размер этого атома. Пусть a — размер атома водорода, $V(r)$ — потенциал кулоновского взаимодействия, T — кинетическая энергия, тогда

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}, \qquad \Delta x = a, \qquad \Delta p = \hbar/a,$$

$$p \sim \hbar/a, \qquad T = \frac{\hbar^2}{2ma^2}, \qquad E_{\text{полн}} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{e^2}{a}.$$

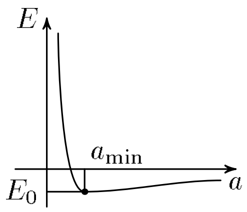

Рис. 2.2.

Получаем, что существует размер a, при котором $E_{\text{полн}}$ минимальна. Легко видеть, что $a_{\min} = \dfrac{\hbar^2}{me^2}$ — размер атома водорода в теории Бора, $E_0 = -\dfrac{me^4}{2\hbar^2}$ — энергия атома водорода в основном состоянии.

Увеличивая число отверстий и экранов в эксперименте по интерференции электронов, мы приходим к идее Р. Фейнмана интеграла по путям в квантовой теории. Можно считать, что пространство в каждом месте состоит из таких «отверстий».

Разбирая подобные задачи и сравнивая их решения с экспериментальными данными, создатели квантовой механики (Гейзенберг, Шредингер, Дирак, Бор, Борн, Де Бройль и др.) пришли к открытию — состояние частицы является вектором, наблюдаемая — это линейный оператор, действующий на таких векторах, и мы можем определять только собственные значения этих операторов.

Математика квантовой механики

В классической механике полное описание состояния физической системы осуществляется заданием всех ее координат и скоростей. По этим начальным данным уравнения движения полностью определяют поведение системы во все будущие моменты времени. В квантовой механике такое описание невозможно, поскольку координаты и соответствующие им скорости не измеримы одновременно. Описание состояния квантовой системы определяется меньшим числом величин, чем в классической механике, т. е. является менее подробным, чем классическое.

Определение. Наборы физических величин, обладающие тем свойством, что эти величины измеримы одновременно, причем если они имеют одновременно определенные значения, то уже никакая другая физическая величина (не являющаяся функцией от них) не может иметь в этом состоянии определенного значения, будем называть *полными наборами*.

Дадим набор основных принципов квантовой теории.

(1) *Состояние* квантовомеханической системы будем понимать как вектор в некотором (гильбертовом) пространстве. Обозначение: $|A\rangle$. Обычно это пространство функций.

Пусть в состоянии $|A\rangle$ некоторое измерение приводит с достоверностью к результату 1, а в состоянии $|B\rangle$ — к результату 2. Тогда принимается, что всякая линейная комбинация $\alpha|A\rangle+\beta|B\rangle$ описывает состояние, в котором то же измерение даст либо результат 1, либо результат 2. Иначе можно сказать, что некоторое состояние может быть рассмотрено как суперпозиция других состояний. (Пример — прохождение электрона через одну щель и через другую щель в описанном выше опыте.) Т. е. суперпозиция — это линейная комбинация.

Эти утверждения составляют содержание *принципа суперпозиции* — основного *положительного* принципа квантовой механики.

(2) Наблюдаемые, или физические величины, будут линейными операторами в упомянутом гильбертовом пространстве. (Операторы будут обозначаться буквами со шляпкой — $\widehat{f}$, а иногда и без шляпки, когда понятно, что f — оператор). Возможны состояния, значения величины в которых фиксированы: такими состояниями будут собственные векторы оператора. В других состояниях физическая величина не может иметь определенного значения.

(3) В пространстве введена *эрмитова метрика*. Считаем, что наблюдаемым отвечают самосопряженные операторы. Собственные значения такого оператора (значения наблюдаемой) вещественны. (Формально можно рассматривать также и комплексные физические величины.)

(4) Полный набор наблюдаемых соответствует такому набору коммутирующих между собой операторов, что набор их собственных значений полностью задает вектор пространства.

Более точно — состояние определяется не вектором, а направлением. В наших рассуждениях будем считать векторы нормированными (там, где это возможно).

Пусть $|\psi\rangle$ не является собственным вектором для наблюдаемой $\widehat{Q}$. Пусть ψ_n — набор ее собственных векторов: $\widehat{Q}\psi_n = q_n\psi_n$. Собственные векторы эрмитова оператора, отвечающие различным собственным значениям, ортогональны. Поэтому можно рассмотреть состояние ψ как суперпозицию $\psi = \sum c_n\psi_n$. Квадрат модуля $|c_n|^2$ каждого из коэффициентов данного разложения определяет вероятность соответствующего значения q_n величины $\widehat{Q}$.

Введем понятие *среднего значения* $\langle Q \rangle$ величины $\widehat{Q}$ в данном состоянии $|\psi\rangle$:

$$\langle Q \rangle = \sum q_n |c_n|^2 = (\psi, \widehat{Q}\psi),$$

где $(\,\cdot\,,\cdot\,)$ обозначает эрмитово скалярное произведение в нашем пространстве.

2. Общие принципы

Принцип детерминизма в квантовой механике

Зная в начальный момент времени $t = 0$ состояние $|\psi\rangle$ квантовой системы, мы должны уметь определять состояния $|\psi_t\rangle$, $t > 0$. Введем (линейный) оператор эволюции

$$|\psi_t\rangle = U(t, t_0)|\psi_0\rangle.$$

Поскольку мы считаем $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, оператор эволюции унитарен: $U^+U = I$.

Пусть в начальный момент времени t_a известна координата частицы x_a. (Будем обозначать символом $|x\rangle$ состояние с известной координатой, равной x.) $|\psi_t\rangle$ — состояние в некоторый последующий момент времени t. Представим его как суперпозицию всех возможных состояний с известными координатами:

$$|\psi_t\rangle = \int \left(\mathcal{K}(t_b, x_b; t_a, x_a)|x\rangle\right)\, dx,$$

где $\mathcal{K}(t_2, x_2; t_1, x_1)$ — амплитуда распространения от положения $|x_1\rangle$ в момент времени t_1 до положения $|x_2\rangle$ в момент времени t_2. Заметьте, что в аргументах некоторых величин время возрастает справа налево.

Динамический принцип

Динамический принцип квантовой механики заключается в том, что амплитуда перехода из $|x_0\rangle$ в $|x\rangle$ за время t получается суммированием