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 по всем возможным траекториям, $x(\tau)$, ведущим из $x_0 = x(t_0)$ в $x = x(t)$:

$$\mathcal{K}(t_b, x_b; t_a, x_a) = \sum_{\text{по всем траекториям}} \mathcal{A}(x(\tau)),$$

где $\mathcal{A}$ — фаза вклада траектории:

$$\mathcal{A}(x(\tau)) = N \exp\left(\frac{iS[x(\tau)]}{\hbar}\right),$$

а функционал действия

$$S[x(\tau)] = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x})\, d\tau, \quad x(t_a) = x_a, \quad x(t_b) = x_b.$$

Континуальной сумме в определении фейнмановского пропагатора можно придать некоторую математическую строгость. Именно, вместо того чтобы рассматривать все непрерывные траектории, разобьем временной отрезок $[t_a, t_b]$ на N равных частей длины $\varepsilon = (t_b - t_a)/N$: $t_a = t_0 < t_1 < \ldots < t_{N-1} < t_N = t_b$, и ограничимся кусочно-линейными траекториями. Каждая такая траектория определяется выбором узловых точек (t_1, x_1), (t_2, x_2), ..., (t_{N-1}, x_{N-1}), где $x_1, \ldots, x_{N-1}$ — любые. Тогда

$$\mathcal{K}(t_b, x_b; t_a, x_a) \sim \\ \sim C \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \ldots \int dx_1 \exp\left(\frac{iS[x(t_0, t_1, \ldots, t_N)]}{\hbar}\right).$$

Увеличивая количество точек разбиения (уменьшая ε), мы сможем получить более полное представление множества всех траекторий. Необходимо определить нормировочный множитель C, который, на самом деле, зависит от ε.

Например, в случае лагранжиана вида $L = \dfrac{m\dot{x}^2}{2} - V(x, t)$ нормировочный множитель равен C^{-N}, где

$$C = \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2},$$

$$\mathcal{K}(t_b, x_b; t_a, x_a) = \frac{1}{C} \int \int \ldots \int e^{(i/\hbar)S[a,b]} \frac{dx_1}{C} \frac{dx_2}{C} \ldots \frac{dx_{N-1}}{C},$$

где $S[a,b] = \int_{t_a}^{t_b} L(x,\dot{x},t)\,dt$ представляет собой однократный интеграл вдоль кусочно-линейной траектории.

Возможны неудобства, связанные с нашим определением суммы по траекториям. Тем не менее идея сохраняет смысл, несмотря на недостатки отдельных построений.

Уравнение Шредингера

Пусть

$$\psi(x,t+\varepsilon) = \int \frac{1}{C}\,\exp\left(\frac{i\varepsilon}{\hbar} L\left(\frac{x+y}{2}, \frac{x-y}{\varepsilon}\right)\right)\psi(y,t)\,dy$$

(здесь y — координата на прямой в момент t). Применяя это к частице в потенциале $V(x)$, т. е. при $L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x)$, получим

$$\psi(x,t+\varepsilon) = \int \frac{1}{C}\,e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m(x-y)^2}{2\varepsilon}} \exp\left(\frac{-i\varepsilon V\left(\frac{(x+y)}{2}\right)}{\hbar}\right)\psi(y,t)\,dy.$$

Из-за быстрой осцилляции первой экспоненты y близко к x. Пусть $y = x+\eta$,

$$\psi(x,t+\varepsilon) = \int \frac{1}{C}\,e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\eta^2}{2\varepsilon}}\,e^{\frac{-i\varepsilon V(x+\eta/2)}{\hbar}}\psi(x+\eta,t)\,d\eta.$$

Основной вклад в интеграл вносят $\eta \sim \sqrt{\frac{\varepsilon\hbar}{m}}$. Функцию ψ нужно разложить в ряд и удержать лишь члены порядка ε, т. е. разложить до второго порядка по η. Получаем

$$\begin{aligned}\psi(x,t) + \varepsilon\frac{\partial\psi}{\partial t} &= \\ &= \frac{1}{C}\int e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\eta^2}{2\varepsilon}}\left(1 - \frac{i\varepsilon V(x)}{\hbar}\right)\left(\psi(x,t) + \eta\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{1}{2}\eta^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)\,d\eta.\end{aligned}$$

Сравнение членов нулевого порядка дает $C = \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2}$. В первом порядке по ε получаем

$$\varepsilon\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{C}\int \eta^2 e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}}\,d\eta\right)\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}V\psi,$$

или

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

Окончательно

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \widehat{H}\psi, \quad \text{где} \quad \widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V. \tag{2.1}$$

Это уравнение называется *уравнением Шредингера*. Оно было получено Шредингером из других соображений. Вывод уравнения (2.1), приведенный здесь, принадлежит Р. Фейнману.

Движение свободной частицы по прямой

Рассмотрим лагранжиан $L = \frac{m\dot{x}^2}{2}$. Амплитуда распространения

$$\mathcal{K}(x_2, t_2; x_1, t_1) = \int\limits_{x(t_1)=x_1,\ x(t_2)=x_2} Dx(t) e^{i\frac{S}{\hbar}}.$$

Пусть $x_0(t)$ — решение классического уравнения $\delta S = 0$ с начальными условиями $x_0(t_1) = x_1$, $x_0(t_2) = x_2$. В нашем случае имеем уравнение $m\ddot{x} = 0$, значит, $x_0(t)$ линейна, а постоянные интегрирования находятся из граничных условий $x_0(t) = \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1}t + \frac{x_1 t_2 - x_2 t_1}{t_2 - t_1}$. Представим $x(t) = x_0(t) + \eta(t)$. Элемент объема не меняется при сдвиге, значит, $Dx(t) = D\eta(t)$. Тогда для действия имеем:

$$S(x) = S(x_0) + S(\eta), \quad \text{где} \quad S(x_0) = \frac{m}{2}\frac{(x_2 - x_1)^2}{t_2 - t_1},$$

$$S(\eta) = \int\limits_{t_1}^{t_2} \frac{m\dot{\eta}^2}{2}\, dt, \quad \text{при условии } \eta(t_1) = \eta(t_2) = 0.$$

Следовательно,

$$\mathcal{K}(x_2, t_2; x_1, t_1) = \exp\left(\frac{im(x_2 - x_1)^2}{\hbar\,(t_2 - t_1)}\right) \int e^{\frac{i}{\hbar}S(\eta)}\, D\eta = \\ = \exp\left(\frac{im(x_2 - x_1)^2}{\hbar(t_2 - t_1)}\right) \mathcal{A}(t_1, t_2).$$

Для того чтобы найти $\mathcal{A}(t_1,t_2)$, рассмотрим групповое соотношение, которому удовлетворяет функция распространения

$$U(t_2,t_1) = U(t_2,t)U(t,t_1).$$
$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_2,t_1)|\psi(t_1)\rangle, \quad t_1 < t_2,$$

где $U(t_2,t_1)$ — оператор эволюции. Тогда

$$\mathcal{K}(x_2,t_2;x_1,t_1) = \int \mathcal{K}(x_2,t_2;x,t)\mathcal{K}(x,t;x_1,t_1)\,dx,\ t_1 < t < t_2. \tag{2.2}$$

Вспоминая вид функции распространения и замечая, что

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha x^2}\,dx = \sqrt{\frac{i\pi}{\alpha}},$$

получаем такое уравнение:

$$\mathcal{A}(t_1,t)\mathcal{A}(t,t_2)\sqrt{\frac{2\pi i\hbar}{m}}\sqrt{\frac{(t_2-t)(t-t_1)}{t_2-t_1}} = \mathcal{A}(t_1,t_2). \tag{2.3}$$

Положим $F(t_1,t_2) = \mathcal{A}(t_1,t_2)\sqrt{\dfrac{2\pi i\hbar(t_2-t_1)}{m}}$. Тогда уравнение (2.3) эквивалентно уравнению $F(t_1,t)F(t,t_2) = F(t_1,t_2)$, решения которого даются формулой

$$F(t_1,t_2) = \frac{f(t_2)}{f(t_1)},$$

где $f(t)$ — *нормировка*. Можно сделать замену и считать, что

$$\psi(t) \mapsto f(t)\psi(t), \quad U(t_2,t_1) \mapsto \frac{f(t_2)}{f(t_1)}U(t_2,t_1).$$

Тогда

$$\mathcal{K}(x_2,t_2;x_1,t_1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_2-t_1)}}\exp\left(\frac{im(x_2-x_1)^2}{2\hbar(t_2-t_1)}\right),$$

т. е. $|\mathcal{K}(x_2,t_2;x_1,t_1)|^2 \sim 1/(t_2-t_1)$.

Следствие. Плотность вероятности того, что частица останется в точке x_1, обратно пропорциональна времени.

Уравнения движения

Мы знаем, что в классическом случае уравнения движения имеют вид

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0,$$

что эквивалентно $\delta S = 0$.

Сделаем в выражении для амплитуды замену переменной интегрирования $X(t) \to X(t) + \eta(t)$, $\eta(t_1) = \eta(t_2) = 0$, $\eta \ll \hbar$. Здесь $X(t)$ — произвольная траектория, по которой идет интегрирование, а $\eta(t)$ — фиксированная «малая» траектория с соответствующими условиями. Поскольку мера $\mathcal{D}X(t)$ не меняется при сдвигах, мы получаем

$$\int \mathcal{D}X(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[X]} = \int \mathcal{D}X(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[X+\eta(t)]}, \qquad \text{или}$$

$$\int \mathcal{D}X(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[X]} =$$

$$= \int \mathcal{D}X(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[X]} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int\left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\eta(t)\,dt\right),$$

$$\int \mathcal{D}X(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[X]} =$$

$$= \int \mathcal{D}X(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[X]} \left(1 + \frac{i}{\hbar}\int\left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\eta(t)\,dt\right) + o\left(\left\|\frac{\eta}{\hbar}\right\|\right).$$

Следовательно, в первом порядке малости по $\left\|\frac{\eta}{\hbar}\right\|$ получаем

$$\int \mathcal{D}X(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[X]} \int \left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\eta(t)\,dt = 0,$$

или, поменяв порядок интегрирования,

$$\int \left(\int \mathcal{D}X(t) e^{\frac{i}{\hbar}S[X]} \left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\right)\eta(t)\,dt.$$

В силу произвольности $\eta(t)$ окончательно имеем

$$\left\langle \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x}\right\rangle := \int \mathcal{D}X(t)\left(\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x}\right) e^{\frac{i}{\hbar}S[x]} = 0.$$

Симметрии и интегралы движения

В классической механике с симметриями связана теорема Нётер.

Предположим, что функция Лагранжа $L(x, \dot{x}, t)$ не меняется при таких заменах $x \to h(x, s)$ (s — параметр), что $h(x, 0) = x$ и $h(x, s) \sim \sim x + s\eta(x)$ при $s \ll 1$ (т. е. $\frac{\partial h}{\partial s}\,\big|_{s=0} = \eta$).

Тогда в классическом случае (для истинных траекторий) существует первый интеграл $I(x, \dot{x}) = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\eta(x)$ (см. с. 28) и $\frac{d}{dt}I = 0$. Рассмотрим вариацию вида

$$x \to x + s(t)\eta(x); \;\; S \to S(x + s(t)\eta(x)) = S(x) + \int \dot{S}(t)I(x)\,dt.$$

Тогда на классической траектории

$$\int \dot{S}(t)I(x)\,dt = \int S(t)\dot{I}(x)dt = 0, \quad \text{для} \quad S(t_1) = S(t_2) = 0,$$

откуда $\dot{I} = 0$.

В квантовом случае, как и в предыдущем пункте, верно, что

$$\frac{d}{dt}\langle I\rangle = 0, \quad \text{где } \langle I\rangle := \int \mathcal{D}x(t)\left(\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\eta(x)\right)e^{\frac{i}{\hbar}S[x]} = 0.$$

Действительно, в квантовом случае вариацию $x \to x + s(t)\eta(x(t))$ можно рассматривать как замену переменной в фейнмановском интеграле. Как и в предыдущем пункте, получаем наше утверждение.

Следствие. Вариациям функционалов в классическом случае соответствует замена переменной интегрирования в фейнмановском интеграле.

Импульс

В классике, если частица свободная ($L(x, \dot{x}) = \frac{m\dot{x}^2}{2}$), то $L(x, \dot{x}) = = L(x+\varepsilon, \dot{x})$ и импульс $p = m\dot{x} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ является первым интегралом. То же самое происходит в случае замкнутой системы нескольких частиц, если взаимодействие зависит только от $|x_i - x_j|$. В квантовом случае

$$\psi(x, t) = \int \mathcal{D}x(\tau)e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}\psi(x, 0).$$

Сделаем замену

$$x(\tau) \to x(\tau) + \eta(\tau), \quad \eta(0) = 0, \quad \eta(t) = \varepsilon.$$

Тогда

$$\begin{aligned}
\psi(x+\varepsilon, t) &= \int\limits_{x(t)=x+\varepsilon} \mathcal{D}x(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}\psi(x,0) \\
&= \int\limits_{x(t)=x} \mathcal{D}x(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}S[x(\tau)+\eta(\tau)]}\psi(x,0) \\
&= \psi(x,t) + \frac{i\varepsilon}{\hbar}\int \mathcal{D}x(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}S[x(\tau)]}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\psi(x,0) \\
+\int \mathcal{D}x(\tau) &\left(\int \left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{d\tau}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\eta(\tau)\, d\tau\right) e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}\psi(x,0).
\end{aligned}$$

В силу квантовых уравнений движения последний член равен нулю и мы получаем

$$\begin{aligned}
\psi(x+\varepsilon, t) = \psi(x,t) + \varepsilon\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} = \\
= \psi(x,t) + \frac{i\varepsilon}{\hbar}\int \mathcal{D}x(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}S[x(\tau)]}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\psi(x,0).
\end{aligned}$$

Исходя из классической ситуации, естественно считать, что последнее слагаемое определяет оператор импульса

$$\widehat{p}\psi(x,t) := \int \mathcal{D}x(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}S[x(\tau)]}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\psi(x,0).$$

Получаем, что

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}\widehat{p}\psi, \quad \text{или} \quad \widehat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}.$$

Мы получили замечательный факт

Импульс пропорционален генератору сдвига, т. е. генератору симметрии, при которой он сохраняется.

Собственные функции импульса

Рассмотрим задачу на собственные значения и вектора оператора импульса:

$$\widehat{p}\psi_p = p\psi_p, \qquad \text{или} \qquad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_p}{\partial x} = p\psi_p.$$

Следовательно, собственные функции $\psi_p = ce^{\frac{i}{\hbar}px}$ — плоские волны. Кроме того, длина волны $\lambda = \dfrac{h}{p}$, а вероятность найти частицу в любом месте $|\psi|^2 = c^2$ не зависит от x.

Нормировка $\psi_p = ce^{\frac{i}{\hbar}px}$ получается из соотношения

$$\int \psi_p^*(x)\psi_{p'}\,dx = \delta(p - p').$$

Таким образом,

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\frac{i}{\hbar}px}.$$

Разложение произвольной волновой функции $\psi(x)$ по собственным функциям ее импульса, называемое *импульсным представлением*, — это просто разложение в интеграл Фурье

$$\psi(x,t) = \int c(p,t)\psi_p(x)\,dp, \ \text{где} \ c(p,t) = \int \psi(x,t)\psi_p^*\,dx.$$

Коммутационные соотношения и соотношение неопределенности

Для операторов координаты $\widehat{x}$ и импульса $\widehat{p}$ выполнено следующее коммутационное соотношение: $[\widehat{x}, \widehat{p}] = i\hbar$. Это означает, что импульс и координату нельзя измерить одновременно.

Определим *неопределенность в измерении* наблюдаемой q как среднеквадратичное отклонение наблюдаемой от своего среднего, т. е. как квадрат дисперсии: $\left\langle(\widehat{q} - \overline{\widehat{q}}\,)^2\right\rangle$.

Дальше следует стандартное доказательство неравенства между квадратом скалярного произведения и квадратами длин двух векторов.

Пусть $\langle\widehat{x}\rangle = \langle\widehat{p}\,\rangle = 0$ (в общем случае то же самое). Рассмотрим

$$\langle(\alpha\widehat{x} + i\widehat{p})(\alpha\widehat{x} - i\widehat{p})\rangle \geqslant 0,$$

где $H = \alpha\widehat{x} - i\widehat{p}$, $H^+ = \alpha\widehat{x} + i\widehat{p}$, H^+H — эрмитов и положителен. Действительно, $\|H\psi\|^2 = \langle\psi H^+H\psi\rangle \geq 0$. Следовательно, $\alpha^2\langle\widehat{x}^2\rangle + \alpha\hbar + \langle\widehat{p}^2\rangle \geq 0$, откуда из условия на дискриминант получаем соотношение неопределенности $\langle\widehat{x}^2\rangle\langle\widehat{p}^2\rangle \geq \dfrac{\hbar^2}{4}$.

Минимизация соотношения неопределенности. Волновые пакеты

Из предыдущих рассмотрений следует, что минимум достигается при $\alpha = -\dfrac{\hbar}{2\langle\widehat{x}^2\rangle}$ (это корень последнего квадратного уравнения при нулевом дискриминанте). В этом случае получаем, что $\|H\psi\|^2 = 0$, $H\psi = 0$, т. е.

$$(\alpha\widehat{x} - i\widehat{p})\psi = 0, \quad \text{или} \quad -\frac{\hbar}{2\langle\widehat{x}^2\rangle}x\psi = \hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}, \quad \psi = Ne^{-\frac{x^2}{4\langle\widehat{x}^2\rangle}}.$$

Обозначим $\langle\widehat{x}^2\rangle = \dfrac{a^2}{2}$, тогда $\psi = Ne^{-\frac{x^2}{2a^2}}$. При этом можно посчитать среднее значение операторов $\widehat{x}^2$ и $\widehat{p}^2$ в состоянии ψ. По определению получаем $\langle\widehat{x}^2\rangle = \langle\psi|\widehat{x}^2\psi\rangle = a^2/2$ и $\langle\widehat{p}^2\rangle = \langle\psi|\widehat{p}^2\psi\rangle = \dfrac{\hbar^2}{2a^2}$.

В случае $\overline{p} = p_0 \neq 0$ и $\overline{x} = x_0 \neq 0$ волновая функция удовлетворяет уравнению

$$i(\widehat{p} - p_0)\psi = -\frac{\hbar}{a^2}(x - x_0)\psi.$$

Решая это уравнение, получаем, что

$$\psi = Ne^{\frac{ip_0(x-x_0)}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}}.$$

Движение волнового пакета

Пусть свободная частица находилась при $t = 0$ в состоянии

$$\psi = Ne^{\frac{ip_0(x-x_0)}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}}.$$

Найдем, в какое состояние она перейдет через время t.

$$\psi(x,t) = \int K(x,t;y,0)\psi(y,0)\,dy =$$
$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\frac{N}{\sqrt{t}}\int e^{\frac{im(x-y)^2}{2\hbar t}} e^{\frac{ip_0(y-x_0)}{\hbar}-\frac{(y-x_0)^2}{2a^2}}\,dy = \ldots$$

(закончите вычисления самостоятельно).

Другой способ понять движение волнового пакета — это разложить волновую функцию по плоским волнам:

$$\psi(x,0) = \int c(p,0)e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,dp,$$

где величина $|c(p,0)|^2$ равна вероятности иметь импульс p. Тогда из уравнения Шредингера в импульсном представлении

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{p^2}{2m}\psi$$

с начальным условием $\psi(p,0) = c(p,0)$ следует, что

$$c(p,t) = c(p,0)e^{-i\frac{p^2 t}{2m\hbar}}, \quad \psi(x,t) = \int c(p,0)e^{-i\frac{p^2 t}{2m\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,dp.$$

Отсюда видно, что распределение по импульсам со временем не меняется: $|c(p,0)|^2 = |c(p,t)|^2$, а распределение по координатам расплывается, поскольку частица с бо́льшим импульсом уходит за время t дальше.

Гамильтониан

Пусть лагранжиан $L(x,\dot{x})$ не зависит от времени явно (однородность по времени). Тогда

$$S[x(t)] = \int\limits_{t_1}^{t_2} L(x(t),\dot{x}(t))\,dt = \int\limits_{t_1+\varepsilon}^{t_2+\varepsilon} L(x(t-\varepsilon),\dot{x}(t-\varepsilon))\,dt.$$

Разложим последний интеграл по ε до членов первого порядка, в том числе по верхнему и нижнему пределам:

$$S[x(t)] = S + \varepsilon\left(L(x(t),\dot{x}(t))|_{t_1}^{t_2} - \int\left[\frac{\partial L}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\ddot{x}\right]\,dt\right) =$$

$$= S + \varepsilon\left(L(x(t),\dot{x}(t)) - \dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\Bigg|_{t_1}^{t_2} - \varepsilon\left(\int \dot{x}\left[\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right]\,dt\right).$$

В классике отсюда следует, что гамильтониан $H \equiv \dot{x}\dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}} - L$ является первым интегралом, т. е. сохраняется.

В квантовом случае

$$\psi(x,t) = \int \mathcal{D}x(\tau)e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}\psi(x,0).$$

Сделаем замену

$$x(\tau) \to x(\tau+\varepsilon), \quad x(t+\varepsilon) = x, \quad t = \tau+\varepsilon, \quad \tau = t-\varepsilon \quad \varepsilon \ll 1.$$

Тогда

$$\psi(x,t+\varepsilon) = \int\limits_{x(t+\varepsilon)=x} \mathcal{D}x(t)e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}\psi(x,0) =$$

$$= \int\limits_{x(t+\varepsilon)=x} \mathcal{D}x(t)e^{\frac{i}{\hbar}\int_{\varepsilon}^{t+\varepsilon} L(x(t-\varepsilon),\dot{x}(t-\varepsilon))\,dt}\psi(x,0) =$$

$$= \int \mathcal{D}x(t)e^{\frac{i}{\hbar}\left[S+\varepsilon\left(L(x(t),\dot{x}(t)) - \int\left[\frac{\partial L}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\ddot{x}\right]\,dt\right)\right]}\psi(x,0) =$$

$$= \int \mathcal{D}x(t)e^{\frac{i}{\hbar}\left[S+\varepsilon\left(L(x(t),\dot{x}(t)) - \dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \varepsilon\left(\int \dot{x}\left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\,dt\right)\right]}\psi(x,0) =$$

$$= \int \mathcal{D}x(t)e^{\frac{i}{\hbar}}[S]\Bigg(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\left(\dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - L\right) -$$

$$- \int \dot{x}\left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\,dt\Bigg)\psi(x,0) =$$

$$= \psi(x,t) - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\int \mathcal{D}x(t)e^{\frac{i}{\hbar}[S]}\left(\dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\psi(x,0) -$$

$$- \frac{i\varepsilon}{\hbar}\left(\int\left(\mathcal{D}x(t)e^{\frac{i}{\hbar}[S]}\left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\right)\dot{x}\,dt\right)\psi(x,0).$$

В силу квантовых уравнений движения последний член равен нулю, и мы получаем

$$\psi(x, t+\varepsilon) = \psi(x,t) + \varepsilon \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \\ = \psi(x,t) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \int \mathcal{D}x(t) e^{\frac{i}{\hbar}[S]} \left(\dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - L \right) \psi(x,0).$$

Как в случае с импульсом, исходя из классической ситуации, естественно считать, что последнее слагаемое определяет оператор гамильтониана $\widehat{H}$

$$\widehat{H}\psi(x,t) := \int \mathcal{D}x(t) e^{\frac{i}{\hbar}[S]} \left(\dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - L \right) \psi(x,0).$$

Получаем, что

$$\varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i\varepsilon}{\hbar} \widehat{H}\psi, \quad \text{или} \quad \widehat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

Итак, мы получили второй замечательный факт:

Гамильтониан пропорционален генератору симметрии, при которой он сохраняется.

Квантовые скобки Пуассона

Скобками Пуассона в классической теории называется

$$\{u, v\} := \sum_k \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{\partial v}{\partial q_k} \right).$$

Выполняются следующие свойства скобок Пуассона:

1) $\{u, v\} = -\{v, u\}$;
2) $\{u, \mathrm{const}\} = 0$;
3) $\{u_1 + u_2, v\} = \{u_1, v\} + \{u_2, v\}$;
4) $\{u, v_1 + v_2\} = \{u, v_1\} + \{u, v_2\}$;
5) $\{u_1 u_2, v\} = \{u_1, v\} u_2 + u_1 \{u_2, v\}$;
6) $\{u, v_1 v_2\} = \{u, v_1\} v_2 + v_1 \{u, v_2\}$;
7) $\{u, \{v, w\}\} + \{v, \{w, u\}\} + \{w, \{u, v\}\} = 0$.

Наблюдаемые в квантовой теории не коммутируют, поэтому попробуем найти условия на скобки Пуассона, считая, что в квантовой теории должны выполняться те же свойства. Рассмотрим выражение $\{u_1u_2, v_1v_2\}$. Его можно вычислить двумя способами. Сравнивая результаты, получаем

$$\{u_1, v_1\}(u_2v_2 - v_2u_2) = (u_1v_1 - v_1u_1)\{u_2, v_2\}.$$

Поскольку все эти наблюдаемые независимы, естественно положить

$$i\hbar\{u, v\} = uv - vu.$$

Представление Гейзенберга

Сравним два представления Шредингера

$$\begin{cases} \psi(t) = U(t)\psi_0, \\ i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \quad \psi(0) = \psi_0. \end{cases}$$

Последнее уравнение можно формально решить: $\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi_0$. Отсюда получаем, что оператор эволюции $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$, $U^{-1}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$. Пусть $\widehat{q}(t) = U(t)\widehat{q}\,U^{-1}(t)$, где наблюдаемая $\widehat{q}$ не зависит от времени. Тогда

$$i\hbar\frac{\partial\widehat{q}\,(t)}{\partial t} = \left[\widehat{H}(t), \widehat{q}\,(t)\right], \qquad \text{или} \quad \frac{\partial\widehat{q}\,(t)}{\partial t} = \{\widehat{H}(t), \widehat{q}\,(t)\},$$

$$\text{где} \quad i\hbar\{\widehat{H}(t), \widehat{q}\,(t)\} = [\widehat{H}(t), \widehat{q}\,(t)].$$

Следовательно, $\widehat{H}$ — оператор энергии. Мы получили, что при $\hbar \to 0$ квантовая теория переходит в классическую (уравнения движения по форме остаются теми же, а наблюдаемые начинают коммутировать между собой).

Стационарные состояния

Пусть в начальный момент ψ_0 — собственная функция гамильтониана ($\widehat{H}\psi_0 = E\psi_0$). Тогда $\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi_0$. При этом $|\psi|^2$ не зависит от времени. Такие состояния называют *стационарными*. E называют *уровнем энергии*. Если данному значению E соответствует не одна, а несколько собственных функций, то такой уровень называют *вырожденным*.

Основные свойства уравнения Шредингера

Из уравнения Шредингера не следует никаких ограничений на волновую функцию ψ. Обычно выдвигают следующие физические требования:

1) волновая функция однозначна и непрерывна во всем пространстве (даже при разрывности потенциала V);
2) в области, где $V = \infty$, $\psi \equiv 0$;
3) в области, где $V \neq \infty$, должны быть непрерывны и производные волновой функции.

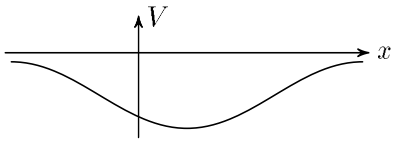

Рис. 2.3.

Из требования (1) следует, что на границе области $\{V = \infty\}$ волновая функция должна быть непрерывна, но этого нельзя сказать об ее производных.

Энергетические уровни системы больше минимального значения потенциала, т. е. $E_n > V_{\min}$.

Если V имеет вид, как на рис. 2.3, то спектр отрицательных собственных значений энергии дискретен, а положительных — непрерывен.

Вариационный принцип

Уравнение $H\psi = E\psi$ при условии $\int \psi\psi^* \, dx = 1$ можно получить как уравнение Эйлера–Лагранжа в задаче на условный экстремум функционала $S_1[\psi, \psi^*] = \int \psi^* H \psi \, dx$ при условии $\int \psi\psi^* \, dx = 1$. При этом E можно рассматривать как множитель Лагранжа в этой задаче.

Предыдущие рассуждения являются основой для прямого вариационного метода. Сужение класса функций до явно заданного и зависящего от параметра превращает решение уравнения Шредингера в задачу на отыскание минимума функционала.

Если известны волновые функции $\psi_0, \psi_1, \ldots, \psi_{n-1}$ первых n состояний, расположенных в порядке возрастания энергии, то на волновой функции ψ следующего состояния достигается минимум функционала $\int \psi^* H \psi\, dx$, при условиях $\int \psi\psi^*\, dx = 1$ и $\int \psi^* \psi_k\, dx = 0$, $k = 0, 1, \ldots, n-1$.

3. Одномерное движение

Пусть потенциальная энергия частицы зависит только от одной координаты: $V(x, y, z) = V(x)$. Тогда волновую функцию $\psi(x, y, z)$ можно искать в виде $\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y, z)$, где $\psi_2(y, z)$ удовлетворяет уравнению Шредингера для свободной двумерной частицы, а $\psi_1(x)$ — одномерному уравнению Шредингера:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi_1 = 0.$$

Если потенциальная энергия частицы $V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$, то волновую функцию можно искать в виде $\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z)$, где каждая из ψ_i удовлетворяет одномерному уравнению Шредингера

$$\frac{d^2\psi_i(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V_i(x)]\psi_i = 0. \tag{2.4}$$

Покажем, что в одномерной задаче волновые функции финитных состояний имеют различные собственные значения (или, что то же самое, что «энергетические уровни дискретного спектра невырождены»).

Действительно, пусть есть два решения (2.4) ψ_1 и ψ_2 с одним значением E. Тогда

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)] = \frac{\psi_2''}{\psi_2}.$$

Следовательно, $\psi_1''\psi_2 - \psi_1\psi_2'' = 0$. Интегрируя это уравнение, получаем $\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = c$. Поскольку $\psi_1 = \psi_2 = 0$ при $x \to \infty$, то константа $c = 0$. Следовательно, $\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = 0$, и, еще раз интегрируя, получаем $\psi_1 = c\psi_2$.