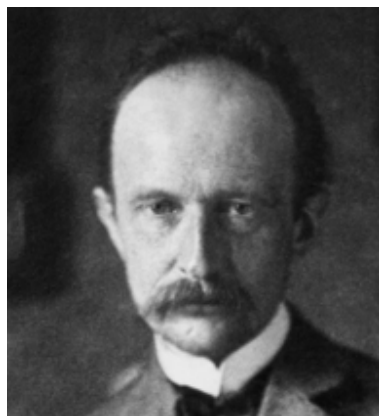


Квантовая механика за один час



Планк



Де Бройль



Паули



Шрёдингер



Гейзенберг



Дирак

Краткая история

- Зарождение представления о кванте излучения (1900, Планк)
- Гипотеза о волнах, связанных с каждой материальной частицей (1924, де Бройль)
- Введение понятия спина и формулировка принципа запрета для частиц с полуцелым спином (1925, Паули)
- Формулировка матричной квантовой механики (1925, Гейзенберг)
- Формулировка волновой квантовой механики и получение нерелятивистского волнового уравнения (1926, Шрёдингер)
- Установление принципа (соотношения) неопределённости (1927, Гейзенберг)
- Получение релятивистского квантового уравнения (1928, Дирак)

Нерелятивистское волновое уравнение (уравнение Шредингера) и операторы физических величин

Каждая частица с импульсом $\vec{p}$ это волна де Бройля с длиной волны $\lambda = \frac{h}{p}$, где h – постоянная Планка

($6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж·сек = $4,14 \cdot 10^{-21}$ МэВ·сек). Состояние частицы описывается волновой функцией $\Psi(\vec{r}, t)$.

Волновая функция свободной частицы с импульсом $\vec{p}$ и энергией E это плоская монохроматическая волна:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}, \quad (1)$$

где $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$, $E = \hbar\omega$, $\hbar = h/2\pi$ (приведённая постоянная Планка). Полагаем $A = 1$. Находим уравнение движения свободной частицы. Дифференцируем (1) по t и по x, y, z :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi \quad \text{или} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi \quad (2)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p_x \Psi, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} = \frac{i}{\hbar} p_y \Psi, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial z} = \frac{i}{\hbar} p_z \Psi. \quad (3)$$

Дифференцируем по x, y, z ещё раз и получаем

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2} \left[(p_x)^2 + (p_y)^2 + (p_z)^2 \right] \Psi. \quad (4)$$

Для свободной частицы

$$\frac{(p_x)^2 + (p_y)^2 + (p_z)^2}{2m} = E = T \quad (\text{кинетическая энергия}). \quad (5)$$

Сравнивая (2) и (4) с учётом (5), получаем уравнение Шредингера для свободной частицы

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi, \quad (6)$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ - оператор Лапласа (лапласиан).

Операторы физических величин

Соотношения (3): $\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p_x \Psi$, $\frac{\partial \Psi}{\partial y} = \frac{i}{\hbar} p_y \Psi$, $\frac{\partial \Psi}{\partial z} = \frac{i}{\hbar} p_z \Psi$

можно записать в виде

$$\hat{p}_x \Psi = p_x \Psi, \quad \hat{p}_y \Psi = p_y \Psi, \quad \hat{p}_z \Psi = p_z \Psi, \quad (7)$$

где вводятся операторы проекций импульса

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}, \quad (8)$$

а сами соотношения (7) это дифференциальные уравнения для нахождения волновых функций Ψ и собственных значений проекций импульса p_x , p_y и p_z в состояниях, описываемых волновыми функциями Ψ .

Такой подход это иллюстрация метода нахождения физических величин и состояний физических объектов (их волновых функций) в квантовой механике.

В общем виде, если речь идёт о физической величине A , которой отвечает оператор $\hat{A}$, то сами возможные значения этой физической величины и соответствующие им волновые функции Ψ подчиняются операторному уравнению (*уравнению на собственные значения*)

$$\hat{A}\Psi = A\Psi. \quad (9)$$

Помимо операторов проекций импульсов можно сразу записать вид операторов координаты, кинетической и полной энергии частицы. Оператор координаты $\hat{x}$ равен самой координате x , т.е. сводится к умножению на эту переменную: $\hat{x} = x$.

Оператор кинетической энергии частицы $\hat{E} \equiv \hat{T}$ должен иметь вид $\hat{E} \equiv \hat{T} = \hat{p}^2/2m$. Учитывая (4) и (5), получаем

$$\hat{E} \equiv \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta, \quad (10)$$

где Δ – лапласиан $(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2})$.

Если частица находится во внешнем не зависящем от времени поле, то она имеет некую потенциальную энергию $U(\vec{r}) \equiv U(x, y, z)$ и её полная энергия равна сумме кинетической T и потенциальной U энергий: $E = T + U$ или в операторном виде $\hat{E} = \hat{T} + \hat{U}$, т.е.

$$\hat{E} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}) . \quad (11)$$

Оператор потенциальной энергии равен самой этой энергии ($\hat{U} \equiv U$), так как зависит лишь от координат частицы.

Операторы остальных физических величин могут быть построены, используя операторы координаты и импульса и простое правило, которое выполняется в большинстве случаев:

В квантовой механике операторы физических величин выражаются друг через друга так же, как сами физические величины в классической физике.

Гамильтониан

Для классической частицы (системы частиц), которая находится в независящем от времени t (стационарном) потенциальном силовом поле, функция Гамильтона H равна сумме кинетической T и потенциальной $U(\vec{r})$ энергий:

$$H = T + U(\vec{r}), \quad (12)$$

т.е. совпадает с полной энергией E . В более общем случае нестационарного силового поля функция Гамильтона имеет вид $H = T + U(\vec{r}, t)$, где силовая функция $U(\vec{r}, t)$ - уже не является потенциальной энергией и поэтому функция Гамильтона не совпадает с полной энергией частицы (системы).

В квантовой механике аналогом классической функции Гамильтона является оператор Гамильтона (гамильтониан) $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$. Гамильтониан совпадает с оператором полной энергии частицы (системы) $\hat{E} = \hat{T} + \hat{U}$, если она находится во внешнем стационарном силовом поле.

Так для отдельной частицы во внешнем поле $U(\vec{r})$

$$\widehat{H} = \widehat{E} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}). \quad (13)$$

Для системы A частиц с парным взаимодействием $U_{\alpha\beta}(|\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta|)$ – такой системой является атом и атомное ядро –

$$\begin{aligned} \widehat{H} &= \sum_{\alpha=1}^A \frac{(\widehat{p}^2)_\alpha}{2m_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^A \sum_{\beta>\alpha}^A U_{\alpha\beta} = \\ &= \sum_{\alpha=1}^A \left(-\frac{\hbar^2}{2m_\alpha} \right) \Delta_\alpha + \sum_{\alpha=1}^A \sum_{\beta>\alpha}^A U_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (14)$$

Оператор Гамильтона (гамильтониан) является главным в квантовой механике, так как определяет все основные особенности рассматриваемой системы (вид её волновой функции). Успех рассмотрения зависит от того, насколько точно выбран гамильтониан (все ли основные взаимодействия в нём корректно учтены).

Для стационарного квантового состояния (когда гамильтониан не содержит времени явно) имеет место следующее операторное уравнение, определяющее вид волновой функции системы Ψ и её полную энергию E :

$$\hat{H}\Psi = E\Psi . \quad (15)$$

Поэтому вместо уравнения (2): $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi$ можем сразу записать

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad (16)$$

Это и есть основное уравнение Шредингера. Оно обобщается и на нестационарные квантовые системы, гамильтониан которых явно зависит от времени.

Так как уравнение Шредингера является линейным уравнением первого порядка по времени, то с его помощью по заданному значению волновой функции $\Psi(\vec{r}, t = 0)$ в момент времени $t = 0$ можно найти её значение в любой момент времени $\Psi(\vec{r}, t)$, где $t \neq 0$.

Стационарное уравнение Шредингера

Если гамильтониан частицы (системы) явно не зависит от времени (потенциальное силовое поле, входящее в его состав, стационарно), то энергия системы фиксирована и сохраняется. Гамильтониан $\hat{H}$ при этом совпадает с оператором полной энергии и имеет место операторное уравнение (15): $\hat{H}\Psi = E\Psi$. Ему удовлетворяет дискретный (или непрерывный) набор волновых функций Ψ и соответствующих им собственных значений энергий E . При этом уравнение Шредингера (16) возвращается к виду (2):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (17)$$

которое может быть непосредственно проинтегрировано по времени, что даёт

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \psi(\vec{r}) \cdot \phi(t). \quad (18)$$

Таким образом, зависимость от времени стационарного состояния даётся функцией

$$\phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad (19)$$

а для зависящей только от координат волновой функции $\psi(\vec{r})$ справедливо уравнение

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (20)$$

называемое *стационарным уравнением Шредингера*.

Один из примеров стационарного состояния – состояние (1) свободной частицы с импульсом $\vec{p}$ и энергией E :

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}. \quad (21)$$

Для пространственно ограниченных систем (атом, ядро атома и др.) уравнение (20) даёт спектр решений $\psi_n(\vec{r})$ с дискретным набором энергий E_n ($n = 1, 2, 3, \dots$).

Для неограниченных (т.е. нереальных) систем спектр решений (состояний) непрерывен. Пример – свободная частица в виде плоской монохроматической волны (21).

Волновая функция - амплитуда вероятности, (Макс Борн, 1927)

Вероятностная интерпретация волновой функции: $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\Psi(\vec{r}, t)^* \Psi(\vec{r}, t)|$ это вероятность найти частицу в единичном объёме вокруг точки $\vec{r}$ в момент времени t . Полная вероятность найти частицу во всём пространстве: $\iiint |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dx dy dz = 1$. Среднее значение $\langle A \rangle$ физической величины A , подчиняющейся операторному уравнению $\hat{A}\Psi = A\Psi$, даётся соотношением $\langle A \rangle = \iiint A |\Psi|^2 dx dy dz = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dv$.



Макс Борн

Волновая функция не является непосредственно наблюдаемой величиной. Такими величинами являются средние значения $\langle A \rangle$ физических величин A . Возникает своеобразное двухступенчатое описание физических объектов: сначала находят волновую функцию, а затем, по ней, определяют значения наблюдаемых.

Неопределённость квантового описания

Состояние частицы в классической физике в любой момент времени описывается заданием 6-ти величин – трёх координат и трёх проекций импульсов: (x, y, z, p_x, p_y, p_z) . Зная эти величины в момент времени t , можно однозначно описать эволюцию системы под действием известных сил во все последующие моменты времени. При этом координаты и импульсы частиц в классической физике сами являются непосредственно измеряемыми (наблюдаемыми) величинами.

В квантовом мире не все наблюдаемые величины могут иметь точно определённые значения. Так частица не может иметь одновременно определённые значения импульса и координат. Поэтому понятие движения частицы по строго определённой траектории лишено смысла. В состоянии $\Psi(\vec{r}, t)$ можно говорить лишь вероятностном распределении значений наблюдаемых. Также можно говорить лишь о вероятности реакции (или распада), а не об их протекании их наверняка.

Из-за того, что количество величин, характеризующих квантовую систему, сокращается вдвое по сравнению с классической (либо три координаты x, y, z , либо три проекции импульса p_x, p_y, p_z , и волновая функция может иметь вид либо $\Psi(\vec{r}, t)$, либо $\Psi(\vec{p}, t)$), квантовое описание выглядит существенно менее определённым и полным, чем классическое и приобретает статистический (вероятностный) характер. Пары величин, которые в квантовом мире не могут одновременно иметь определённые значения, называют **канонически сопряжёнными** (дополнительными, по терминологии Н.Бора). Помимо пар x и p_x , y и p_y , z и p_z , это z -компонента J_z момента количества движения и угол φ поворота в плоскости xy , энергия E частицы и момент времени t , в который она измеряется. В любом квантовом состоянии из каждой пары таких величин (x и p_x , J_z и φ , E и t) определённое значение может иметь только одна из них, либо обе не имеют определённого значения. Количественно это выражается **соотношениями неопределённости Гейзенберга**.

Соотношения неопределённости

Произведение неопределённостей Δ двух канонически сопряжённых величин должно быть не менее $\hbar$:

$$\begin{aligned}\Delta x \cdot \Delta p_x &\gtrsim \hbar, \\ \Delta \varphi \cdot \Delta J_z &\gtrsim \hbar, \\ \Delta t \cdot \Delta E &\gtrsim \hbar.\end{aligned}$$

В частности последнее из этих соотношений («время-энергия») означает, что определение энергии с точностью ΔE должно занять интервал времени не менее $\Delta t \approx \frac{\hbar}{\Delta E}$.

Пример: состояние свободного движения частицы

$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$. В этом состоянии импульс частицы $\vec{p}$ и её энергия E имеют определённые значения. В то же время координата частицы $\vec{r}$ и время t полностью неопределённые, т.е. могут иметь любые значения.

Иллюстрация справедливости соотношения неопределённости «координата-импульс»

Оценим точность одновременного определения x - координаты и компоненты импульса p_x частицы P , наблюдая рассеянный ею свет, сфокусированный на экране S линзой L . Из волновой оптики известно, что

разрешающая способность линзы в лучшем случае такова, что максимальная точность определения координаты составляет

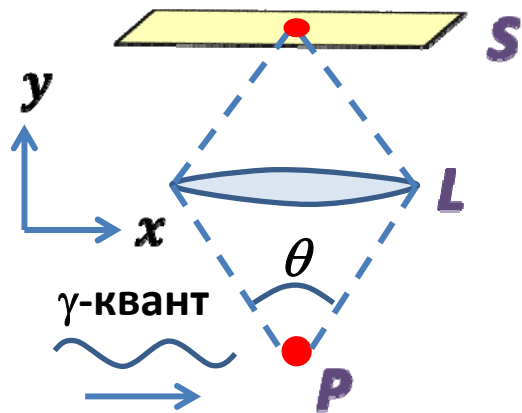
$$\Delta x \approx \frac{\lambda}{\sin(\theta/2)},$$

где λ – длина волны излучения,

падающего на линзу. Направление рассеянного фотона неопределено из-за конечной апертуры линзы. Его

импульс $p = \frac{h}{\lambda}$ и неопределённость в его x -компоненте

$$\Delta p_x = \frac{h}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}. \quad \text{Поэтому } \Delta x \cdot \Delta p_x \approx \frac{\lambda}{\sin(\theta/2)} \cdot \frac{h}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2} = h.$$



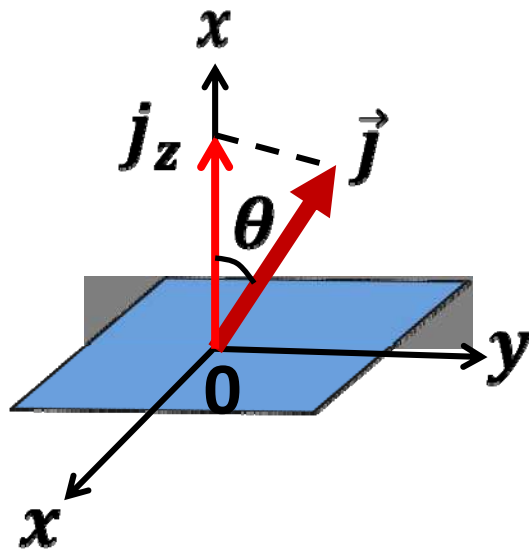
Принципиальная неполнота квантового описания по сравнению с классическим проявляется и в том, что

В квантовом мире есть виды, но нет индивидов

В классическом мире каждый представитель определённого вида или подвида (человек, собака, берёза, камень и др.) индивидуален, отличен от других представителей этого вида (подвида). В квантовом мире представители объекта определенного вида (протоны, нейтроны, ядра $^{40}_{20}\text{Ca}$ в фиксированном состоянии и др.) абсолютно неотличимы друг от друга, идентичны. В этой связи квантовый мир сводится к счётному числу объектов, т.е. более отчетливо структурирован, чем классический и поэтому, в отличие от последнего, обозрим.

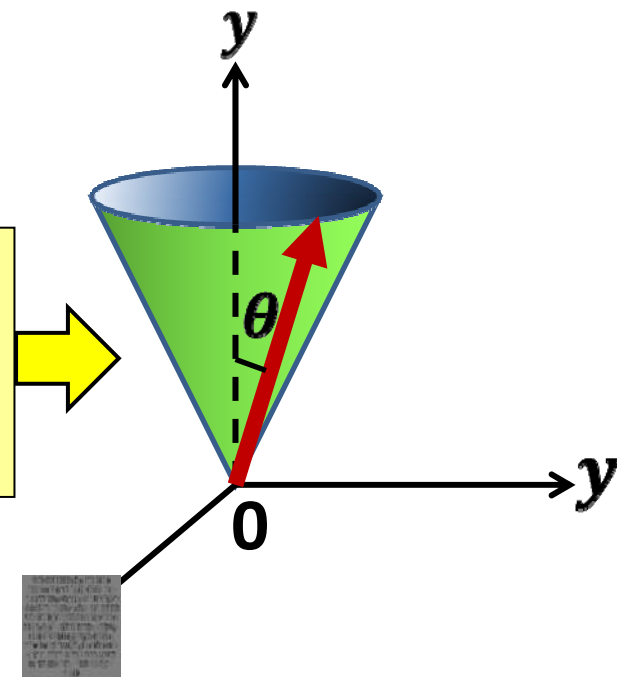
Геометрия квантовых векторов. Пространственное квантование

В частности последнее из этих соотношений («время-энергия») означает, что определение энергии с точностью ΔE должно занять интервал времени не менее $\Delta t \approx \frac{\hbar}{\Delta E}$.

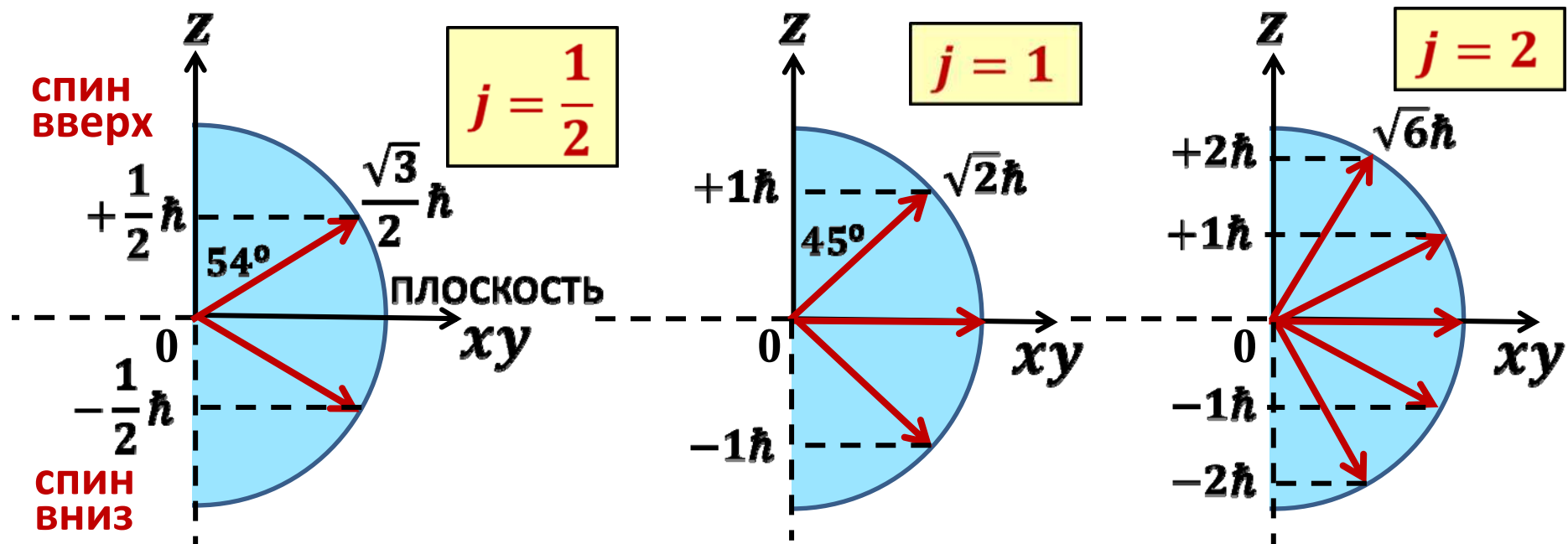


$$\cos\theta = \frac{j_z}{\hbar\sqrt{j(j+1)}}$$

Неопределённость
направления
квантового
вектора



Три примера ($j = 1/2, 1$ и 2)



Сложение квантовых векторов:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$$

$$j_z = l_z + s_z$$

$$\begin{array}{cc} \vec{l} \uparrow \downarrow \vec{s} & \vec{l} \uparrow \uparrow \vec{s} \\ |l - s| \leq j \leq l + s \end{array}$$



$$j = |l - s|, |l - s| + 1, |l - s| + 2, \dots, l + s - 1, l + s$$