

ЛЕКЦИЯ 1

ВВЕДЕНИЕ

Квантовая механика родилась не на голом месте, а возникла в недрах классической физики. Последняя оказалась неспособной объяснить широкий круг физических явлений. Два ее основных составных элемента – ньютонова механика и максвеллова электродинамика – пришли в несоответствие друг с другом. Выявились особенности поведения объектов на микроскопическом уровне, не свойственные макроскопическим объектам.

КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ

В классической физике всякий процесс есть либо движение частицы, либо распространение волны. В микромире ситуация иная.

(а) В XIX в. распространение света считали волновым процессом (интерференция, дифракция, поляризация) и развитие этой точки зрения увенчалось построением электромагнитной теории света (Максвелл).

Однако, эта теория вместе с классической статистической физикой (прежде всего, с теоремой о равномерном распределении энергии по степеням свободы) для спектральной интенсивности излучения черного тела давала формулу Рэля-Джинса

$$I(\omega) = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \omega^2.$$

Она противоречила опыту (см. рис. 1) и приводила к “ультрафиолетовой” катастрофе.

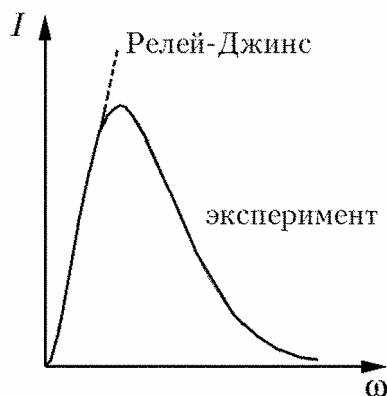


Рис. 1

Для полной плотности энергии излучения формула Рэля - Джинса дает:

$$u = \int_0^{\infty} I(\omega) d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \omega^2 d\omega = \infty !$$

В 1900 году М. Планк, пытаясь объяснить излучение черного тела, предположил, что энергия излучения испускается и поглощается веществом отдельными порциями - квантами. Энергия кванта света есть

$$\varepsilon = \hbar \omega, \quad \hbar \cong 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

Величина \hbar есть постоянная Планка (раньше вместо нее использовалась $h = 2\pi \hbar$). В 1905 году А. Эйнштейн объяснил законы фотоэффекта (в частности, существование красной границы), предположив, что свет не только испускается и поглощается, но и распространяется отдельными квантами. Их корпускулярные и волновые характеристики связаны соотношениями

$$\varepsilon = \hbar \omega, \quad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} = \frac{2\pi \hbar}{\lambda} \mathbf{n} \equiv \frac{\hbar}{\lambda} \quad (\lambda = \frac{2\pi}{k})$$

λ -длина волны.

Встал кардинальный вопрос: свет - волны или частицы? Возникла концепция корпускулярно-волнового дуализма.

(б) В 1924 г. Л. де Бройль предположил, что у всех микрообъектов, считавшихся ранее частицами (например, у электронов) должны быть не только корпускулярные характеристики ε и \mathbf{p} , но и волновые характеристики ω , \mathbf{k} , λ . Они связаны теми же соотношениями:

$$\omega = \frac{\varepsilon}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, \quad \lambda = \frac{\hbar}{p} \quad (\lambda = \frac{2\pi \hbar}{p}).$$

Корпускулярные характеристики выявляются, скажем, при детектировании частиц (появилось ли пятно на фотопластинке или нет, счетчик щелкнул или нет). Волновую природу электронов выявили экспериментально в 1927 году Дэвисон и Джермер, обнаружившие дифракцию электронов на кристалле.

Таким образом, все микрообъекты ведут себя в одном круге явлений как частицы, а в другом - как волны. Это и есть корпускулярно-волновой дуализм, не известный классической физике.

ДИСКРЕТНОСТЬ ЗНАЧЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

Классическая физика не могла объяснить основные атомные явления. В 1911 г. Э. Резерфорд установил планетарную модель атома. Но с классической точки зрения: (а) атомы Резерфорда неустойчивы; (б) атомы одного элемента не должны быть тождественными; (в) спектры атомов должны быть непрерывными. Это резко противоречило опыту.

В 1913 г. Н. Бор для "объяснения" свойств атомов предположил, что электроны могут двигаться не по любым орбитам, а лишь по избранным. Энергия электрона, в отличие от классической физики, может принимать лишь ряд дискретных значений. Эта гипотеза нашла прямое подтверждение в опытах Франка-Герца по неупругому рассеянию пучка электронов на атомарной ртути.

Рассмотрим другой пример дискретности, необходимый для дальнейшего. У электрона есть собственный магнитный момент μ , равный магнетону Бора:

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc}.$$

В классической физике его направление может быть произвольным, и проекция вектора $\boldsymbol{\mu}$ на внешнее магнитное поле может принимать любое значение от $-\mu$ и $+\mu$. Опыты Штерна-Герлаха показали, что эта проекция может принимать лишь два значения: $-\mu$ и $+\mu$.

Итак, в физике накопилось много экспериментальных данных, которые не объяснялись классической физикой. Нужна была новая теория. Ей стала КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА, которая была создана в 1925 г. и окончательно завершена в 1927г.

СОСТОЯНИЯ МИКРОСИСТЕМ ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Всякая физическая теория изучает определенный класс *физических систем*. Физическая система описывается характерными масштабами, скоростями и взаимодействиями. (Нерелятивистская) *квантовая механика* изучает системы малых масштабов ($R \leq 10^{-8}$ м), с малыми скоростями ($v \ll c$) и с частицами, подверженными, главным образом, электромагнитному взаимодействию. Задание системы подразумевает, что заданы ее частицы, в частности их внутренние характеристики (массы, заряды и т.п.), и законы взаимодействия между частицами.

Одно из основных понятий любой физической теории – понятие *состояния* физической системы, которое задается *переменными состояниями*. Здесь есть два аспекта – «статический» и «динамический».

(а) Если заданы переменные состояния в некоторый фиксированный момент времени, то мы имеем максимально возможную информацию о данной системе в этот момент времени. В частности, можем найти значения всех физических величин (энергии, импульса, координат и т. д.) – по крайней мере, их вероятностные распределения. Последняя оговорка очень существенна, ибо в квантовой механике мы обычно можем судить только о вероятностях распределения значений физических величин.

(б) Если заданы переменные состояния в некоторый момент времени t_0 , то можно найти переменные состояния этой системы и в произвольный момент времени t , а значит, получить максимально возможную информацию о системе в этот момент t . Это есть *принцип причинности* в его конструктивной формулировке.

В классической механике состояние системы из N частиц без связей задается набором $3N$ координат и $3N$ компонентов импульсов (скоростей) – всего $6N$ величинами, которые можно считать координатами точки фазового пространства.

В квантовой механике так задавать состояния нельзя, хотя бы потому, что соотношение неопределенностей запрещает координатам и импульсам иметь одновременно строго определенные значения. Рассмотрим примеры. Состоянию частицы с определенным импульсом $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ сопоставляется плоская монохроматическая волна – волна де Бройля:

$$A(\mathbf{r}, t) = A_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \quad \left(\omega = \frac{E}{\hbar} \right).$$

Здесь импульс определен, но про координату ничего сказать нельзя – частицу с равными вероятностями можно обнаружить где угодно. В квантовой механике допустимы и состояния, которые описываются не монохроматическими волнами:

$$A(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{k} f_0(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}.$$

В таких состояниях не имеют определенных значений ни координаты частицы, ни ее импульс.

Рассмотренный пример подводит нас к одному из самых фундаментальных положений квантовой механики - *принципу суперпозиции*. Немонохроматическая волна описывает суперпозицию состояний частицы с определенными значениями импульса (каждая гармоника). При измерении импульса мы получим не какое-то его усредненное значение, а одно из тех, которые входят в гармоники. В этом принципиальное отличие от классического принципа суперпозиции.

Рассмотрим еще один пример, обратившись к опыту Штерна-Герлаха.

У электрона есть состояние, в котором проекция магнитного момента μ на внешнее поле **Н** равна $-\mu$ (при ее измерении всегда получается $-\mu$). У него есть состояние и с проекцией $+\mu$. Но есть и бесконечно много других состояний - суперпозиций двух указанных. Что для них характерно? Если будем в таком состоянии измерять проекцию μ , то получим либо $+\mu$, либо $-\mu$, и ничего более, причем эти значения будем получать с определенными вероятностями, которые определяются состоянием. В классической физике мы получили бы какое-то значение проекции, промежуточное между $-\mu$ и $+\mu$.

Перейдем к описанию состояний в квантовой механике. Итогом огромной работы теоретиков и обобщения большого числа опытных данных явилась формулировка следующего утверждения.

Постулат. Состояниям квантовомеханической системы сопоставляются векторы гильбертова пространства \mathcal{H} .

Эти векторы будем обозначать как $|\dots\rangle$, и они иногда называются кет-векторами. Так как гильбертово пространство линейно (см. ниже), то векторы можно складывать и умножать на комплексные числа. Какой это имеет смысл? Он заложен в следующем постулате.

Постулат. Если состояние ψ является суперпозицией состояний ψ_1 и ψ_2 , то для соответствующих им векторов

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C}.$$

Примечание. Потом мы увидим, что c_1 и c_2 имеют вероятностный смысл. Пусть ψ_1 состояние электрона с проекцией $-\mu$, а ψ_2 - с проекцией $+\mu$, и пусть мы измеряем значение этой проекции. Тогда с вероятностью $|c_1|^2$ будем получать проекцию $-\mu$, а с вероятностью $|c_2|^2$ - проекцию $+\mu$. Поэтому должно быть

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

В пространстве векторов можно ввести не только операции умножения на числа и сложения, но и скалярное произведение любых двух векторов $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$, которое будем обозначать как $\langle\phi|\psi\rangle$.

Свойства:

(а) линейность по второму аргументу

$$\langle\phi|c_1\psi_1 + c_2\psi_2\rangle = c_1\langle\phi|\psi_1\rangle + c_2\langle\phi|\psi_2\rangle;$$

(б) эрмитовость

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*;$$

(в) положительная определенность

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0: \quad \langle\psi|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0.$$

Определение. Линейное бесконечномерное пространство, в котором введено скалярное произведение, называется гильбертовым пространством.

На самом деле в определение нужно включить еще требование полноты пространства (всякая последовательность Коши, или фундаментальная последовательность, сходится к некоторому вектору из \mathbf{H}), но это требование является математическим, и в физике оно обычно не нужно.

Символы $\langle \dots |$ также можно рассматривать как векторы некоторого пространства, которое называется сопряженным исходному. Величины $\langle \dots |$ именуется *совекторами*, или бра-векторами. Их можно складывать между собой, как и векторы, но нельзя сложить вектор с совектором.

Заметим, что из линейности скалярного произведения по второму аргументу и из его эрмитовости следует антилинейность по первому аргументу:

$$\langle c\phi | \psi \rangle = c^* \langle \phi | \psi \rangle .$$

Используется и другое обозначение – векторы без угловых скобок:

$$\langle \phi | \psi \rangle \equiv (\phi, \psi) .$$

$$(\phi, c\psi) = c(\phi, \psi); \quad (d\phi, \psi) = d^*(\phi, \psi) .$$

Положительная определенность скалярного произведения позволяет ввести неотрицательное число $\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$, называемое *нормой* вектора $|\psi\rangle$ (аналог обычной длины). Оно будет использоваться ниже.

Насколько однозначно определен вектор $|\psi\rangle$, сопоставляемый данному физическому состоянию ψ ? Для ответа заметим, что суперпозиция состояния с собой не приводит к новому состоянию. Обобщаем это.

РЕЗЮМЕ

Постулат I. Состояния ψ квантовой системы задаются векторами $|\psi\rangle \in \mathbf{H}$. Векторы $|\psi\rangle$ и $c|\psi\rangle$ с любым $c \in \mathbb{C}$ отвечают одному и тому же состоянию. Суперпозиции состояний отвечает линейная комбинация векторов.

Итак, вектор состояния можно умножать на произвольное комплексное число. Произвол уменьшится, если потребовать, чтобы векторы состояний были нормированными: $\|\psi\rangle\| = 1$. Но полностью произвол не устраняется: вектор еще может быть умножен на произвольный фазовый множитель:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = e^{i\alpha} |\psi\rangle, \quad \|\psi'\rangle\| = \|\psi\rangle\| .$$

Этот произвол устранить уже не удастся. Практически фазу α мы выбираем из соображения удобства.