Лекция 8. Основные положения квантовой теории. Волновая функция

1 Основные положения квантовой теории

1.1 Состояние квантовой частицы. В квантовой механике состояние частицы или системы частиц задается *волновой функцией* Ψ. Волновая функция в координатном представлении зависит от координат частиц, составляющих систему и времени:

$$\Psi = \Psi(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N, t), \tag{1}$$

где $\mathbf{r}_i$ – радиус-вектор i-ой частицы, N – общее число частиц в системе. Существуют и другие представления, например импульсное. Волновая функция *комплексна,* и ее можно представить в виде

$$\Psi = \tilde{A}(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N, t) e^{i\Phi(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N, t)} = \tilde{A}(\cos\Phi + i\sin\Phi), \tag{2}$$

где i – мнимая единица, $\tilde{A}$ – комплексная амплитуда, медленная функция координат и времени; Φ – фаза, функция $e^{i\Phi(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N, t)}$ быстро меняется с изменением координат и времени. Например, в случае плоской волны де Бройля для одной частицы, фаза

$$\Phi = \omega t - \mathbf{kr}, \tag{3}$$

где $\omega = d\Phi/dt$ – циклическая частота волны, $\mathbf{k} = \nabla\Phi$ – волновой вектор, а длина волны де Бройля определяется как $\lambda = 2\pi/k$.

1.2 Принцип суперпозиции. Если система может находиться в состояниях, которые описываются волновыми функциями Ψ_1 и Ψ_2, то эта система также может находиться в состоянии, соответствующая волновая функция которого есть суперпозиция (линейная комбинация) волновых функций Ψ_1 и Ψ_2:

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2, \tag{4}$$

где C_1 и C_2 – комплексные числа.

Вероятность обнаружить систему в одном из состояний, составляющих суперпозицию, определяется удельным весом состояния в суперпозиции:

$$P_1 = \frac{|C_1|^2}{|C_1|^2 + |C_2|^2}, \; P_2 = \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2 + |C_2|^2}; \tag{5}$$

где P_1, P_2 – вероятность состояния, определяемого Ψ_1, Ψ_2.

В классической физике физическая величина, которая получается в результате суперпозиции, является комбинацией исходных величин, вступающих в суперпозицию. Например, напряженность поля в точке, создаваемая несколькими телами, есть сумма напряженностей полей от каждого тела. В квантовой физике ситуация совершенно другая. Рассмотрим состояние, которое описывается волновой функцией Ψ_1 (состояние Ψ_1). Причем в этом состоянии некоторая физическая величина имеет значение L_1, то есть в результате измерения этой величины в системе в состоянии Ψ_1 всегда получается L_1. Рассмотрим также состояние Ψ_2, в котором физическая величина имеет значение L_2. Если измерить эту физическую величину в системе в состоянии суперпозиции $\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2$, то с классической точки зрения должна получится некая комбинация L_1 и L_2. Однако, в квантовой механике, при измерении физической величины в системе в состоянии Ψ, получается одно из двух значений L_1 или L_2, каждое со своей вероятностью, которая зависит от C_1 и C_2.

Принцип суперпозиции выполняется для любого числа функций составляющего суперпозицию. Рассмотрим набор некоторых линейно-независимых функций $\{\Psi_i\}$. Если он является полным в области изменения независимых переменных, тогда любую функцию можно представить в виде суперпозиции:

$$\Psi = \sum_{j=1}^{\infty} C_j \Psi_j \, . \tag{6}$$

А вероятность обнаружить систему в состоянии Ψ_j запишется как

$$P_j = \frac{\left|C_j\right|^2}{\sum_{k=1}^{\infty}\left|C_k\right|^2} \, . \tag{7}$$

1.3 Уравнение движения. Уравнение движения описывает *эволюцию системы* – изменение состояния системы со временем. В квантовой механике уравнением движения является *уравнение Шредингера:*

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\ \Psi \, , \tag{8}$$

где $\hbar$ – постоянная Планка, $\hat{H}$ – оператор полной энергии или *гамильтониан* (оператор Гамильтона).

Оператор – это правило или алгоритм, согласно которому одной функции сопоставляется другая функция. Операторы обозначаются буквами с значком ^ сверху, например $\hat{A}, \hat{B}$. Если оператор $\hat{A}$ выражает правило, согласно которому функции u сопоставляется функция v, то это записывается следующим образом

$$\hat{A}u = v \, . \tag{9}$$

Например, если $\hat{A}$ – оператор дифференцирования:

$$\hat{A} = \frac{d}{dx} \, ,$$

тогда функция v является производной от функции u:

$$v = \hat{A}u = \frac{d}{dx}u = \frac{du}{dx} \, . \tag{10}$$

Гамильтониан для одной нерелятивистской частицы записывается следующим образом:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}(\mathbf{r},t), \tag{11}$$

где m – масса частицы, $\hat{U}(\mathbf{r},t)$ – оператор потенциальной энергии, $\Delta \equiv \nabla^2$ – оператор Лапласа или лапласиан. В декартовых координатах выражение для лапласиана следующее:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{12}$$

1.4 Физические величины. В квантовой механике каждой физической величине соответствует оператор этой величины. Выражения для операторов некоторых физических величин приведены в таблице 1.

Таблица 1

Название физической величины	Физическая величина	Оператор физической величины
Координата x	x	$\hat{x}$
Радиус-вектор	$\mathbf{r}$	$\hat{\mathbf{r}}$
Проекция импульса на ось x	p_x	$\hat{p}_x \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
Импульс	$\mathbf{p}$	$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$
Кинетическая энергия	$T = \frac{p^2}{2m}$	$\hat{T} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$
Потенциальная энергия	U	$\hat{U}$
Полная энергия	E	$\hat{H}$

При измерении физической величины f, соответствующей оператору $\hat{F}$, получается одно из чисел f_1, f_2, …, f_n, …, которые являются собственными значениями оператора $\hat{F}$. Собственные значения и собственные функции оператора $\hat{F}$ определяются уравнением:

$$\hat{F}\Psi_n = f_n\Psi_n, \tag{13}$$

где Ψ_n – собственная функция оператора $\hat{F}$, соответствующая собственному числу f_n. Если представить волновую функцию Ψ состояния системы как суперпозицию собственных функций оператора $\hat{F}$:

$$\Psi = \sum_{j=1}^{\infty} C_j\Psi_j, \tag{14}$$

тогда вероятность того, что при измерении физической величины f в состоянии Ψ получится величина f_n, определится удельным весом Ψ_n в суперпозиции Ψ, то есть выражением (7):

$$P_j = |C_j|^2 \Big/ \sum_{k=1}^{\infty} |C_k|^2 .$$

1.5 Средние значения наблюдаемых физических величин. Если физической величине f соответствует оператор $\hat{F}$, тогда среднее значение физической величины $\langle f \rangle$ в состоянии Ψ:

$$\langle f \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{F}\ \Psi\ dV}{\int \Psi^* \Psi\ dV}, \tag{15}$$

где Ψ^* – функция, комплексно сопряженная Ψ, dV – совокупность дифференциалов всех независимых переменных, а интеграл берется по всей области изменения этих переменных. Если волновая функция нормирована на 1, то есть

$$\int \Psi^* \Psi\ dV = 1, \tag{16}$$

тогда среднее значение величины f запишется как

$$\langle f \rangle = \int \Psi^* \hat{F}\ \Psi\ dV. \tag{17}$$

2 Волновая функция

Физическая величина – это свойство объекта или процесса, которое можно охарактеризовать количественно. То есть физические величины по определению являются наблюдаемыми, измеримыми, и как следствие, *вещественными*. Волновая функция *комплексна*, непосредственно не наблюдаема и *не является физической величиной*. В чем тогда физический смысл волновой функции?

Из опытов по исследованию волновых свойств микрочастиц следует, что движение любой микрочастицы подчиняется вероятностным законам. Соответствующее распределение вероятности проявляется в результате регистрации большого числа частиц. Это распределение оказывается таким же, как распределение интенсивности волны: там, где интенсивность больше, регистрируется большее число частиц. Интенсивность волны пропорциональна квадрату модуля волновой функции. Таким образом, простейшая информация, которую можно извлечь из волновой функции частицы $\Psi(\mathbf{r},t)$ – это вероятность пребывания частицы в точке с определенными координатами:

$$dP(\mathbf{r},t) = \left|\Psi(\mathbf{r},t)\right|^2 dV, \tag{18}$$

где $dP(\mathbf{r},t)$ – вероятность обнаружить частицу в элементе объема dV в окрестности точки $\mathbf{r}$ в момент времени t. Тогда квадрат модуля волновой функции $|\Psi|^2$ есть *плотность вероятности* (вероятность на единицу объема) обнаружить частицу в точке пространства-времени:

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = \frac{dP}{dV}. \tag{19}$$

Эта величина уже является наблюдаемой, в отличие от самой волновой функции.

Волновая функция определяется с точностью до произвольного множителя. Это не влияет на состояние системы, которая описывается этой функцией. Так как частица достоверно присутствует в какой-то точке пространства, тогда вероятность обнаружить частицу во всем пространстве равна 1. Следовательно, естественным условием нормировки является нормировка на 1:

$$\int |\Psi|^2 dV = 1, \tag{20}$$

где интегрирование выполняется по всему пространству. В общем случае можно использовать и ненормированную функцию, тогда выражение (19) необходимо переписать следующим образом:

$$\frac{dP}{dV} = \frac{|\Psi|^2}{\int |\Psi|^2 dV}. \tag{21}$$

Если функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ такова, что интеграл $\int |\Psi|^2 dV$ по всему пространству расходится, тогда условие нормировки (20) невыполнимо. В этом случае пользуются ненормированными волновыми функциями или выбирают особые условия нормировки. Примером такой функции служит волновая функция свободного электрона (плоская волна де Бройля):

$$\Psi = \tilde{A} e^{i(\mathbf{kr} - \omega t)} = \tilde{A} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr} - Et)}, \tag{22}$$

где $\mathbf{k}$ – волновой вектор, ω – циклическая частота, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ – импульс частицы, $E = \hbar\omega$ – полная энергия частицы. Рассмотрим квадрат модуля волновой функции свободного электрона:

$$\Psi^* \Psi = \left(\tilde{A}^* e^{-i\Phi}\right)\left(\tilde{A} e^{i\Phi}\right) = \tilde{A}^* \tilde{A} = A^2 = const, \tag{23}$$

где $\Phi = \mathbf{kr} - \omega t$ – фаза. Интеграл от (23) по всему пространству расходится (равен ∞).

Рассмотрим электронный пучок, который падает на экран с двумя узкими щелями. Такая постановка задачи соответствует опыту Юнга по дифракции света (рис. 1).

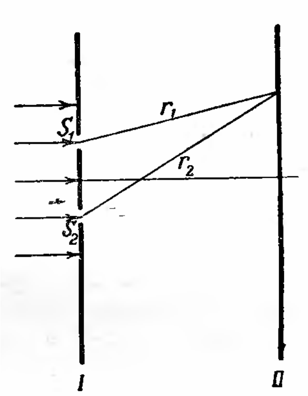

Рис. 1 Схема опыта Юнга по дифракции. S_1 и S_2 – щели, I – экран со щелями, II – экран наблюдения дифракции, r_1 и r_2 – геометрическая длина пути

Падающий электронный пучок описывается плоской волной де Бройля (22). Каждая узкая щель становится источником сферических волн, то есть волновая функция электрона, прошедшего через щель описывается сферической волной:

$$\Psi = \frac{\tilde{A}}{r} e^{i\Phi(\mathbf{r}, t)}, \tag{24}$$

где r – расстояние до щели, $\Phi = \mathbf{kr} - \omega t = \frac{1}{\hbar}(\mathbf{pr} - Et)$ – фаза. Комплексную амплитуду можно представить в виде:

$$\tilde{A} = Ae^{i\alpha}, \qquad (25)$$

где A – вещественная амплитуда, α – начальная фаза. Тогда выражение для волновой функции электрона, прошедшего щель модно переписать в виде:

$$\Psi = \frac{A}{r} e^{i\tilde{\Phi}(\mathbf{r},t)}, \qquad (26)$$

где $\tilde{\Phi} = \Phi + \alpha = \mathbf{kr} - \omega t + \alpha = \frac{1}{\hbar}(\mathbf{pr} - Et) + \alpha$ – полная фаза.

По принципу суперпозиции, волновая функция электрона в области между экранами:

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2, \qquad (27)$$

где Ψ_1 – волновая функция электрона, прошедшего через первую щель, Ψ_2 – волновая функция электрона, прошедшего через вторую щель. Так как щели совершенно равноправны, тогда можно положить $C_1 = C_2 = 1$. Комбинируя (26) и (27) получим:

$$\Psi = \frac{A_1}{r_1} e^{i\tilde{\Phi}_1(\mathbf{r}_1,t)} + \frac{A_2}{r_2} e^{i\tilde{\Phi}_2(\mathbf{r}_2,t)}, \qquad (28)$$

где индексы 1,2 у величин соответствуют прохождению через первую и вторую щель. Интенсивность регистрируемого на экране потока электронов пропорциональна числу электронов, проходящих через данную область экрана, и, следовательно, плотности вероятности обнаружить электрон в данной точке:

$$I = C\frac{dP}{dV} = C'\left|\Psi\right|^2, \qquad (29)$$

где C, C – некоторые константы, и было использовано выражение (19). Если открыта только первая щель, тогда $C_2 = 0$ и волновая функция в области между экранами:

$$\Psi = \frac{A_1}{r_1} e^{i\tilde{\Phi}_1(\mathbf{r}_1,t)}. \qquad (30)$$

В этом случае интенсивность потока электронов на экране:

$$I_1 = C'\left|\Psi_1\right|^2 = C'\frac{A_1^2}{r_1^2}. \qquad (31)$$

Аналогично, если открыта только вторая щель, тогда результирующая интенсивность:

$$I_2 = C'\frac{A_2^2}{r_2^2}. \qquad (32)$$

Рассмотрим случай, когда открыты обе щели. Найдем квадрат модуля волновой функции:

$$\left|\Psi\right|^2 = \Psi^*\Psi = (\Psi_1^* + \Psi_2^*)(\Psi_1 + \Psi_2) = \Psi_1^*\Psi_1 + \Psi_2^*\Psi_2 + \left(\Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_2^*\Psi_1\right). \qquad (33)$$

Найдем выражения для членов суммы:

$$\Psi_1^*\Psi_1 = \left|\Psi_1\right|^2 = A_1^2/r_1^2, \quad \Psi_2^*\Psi_2 = \left|\Psi_2\right|^2 = A_2^2/r_2^2, \qquad (34)$$

$$\Psi_2^*\Psi_1 = \frac{A_1A_2}{r_1r_2} e^{i\left(\tilde{\Phi}_1 - \tilde{\Phi}_2\right)}, \quad \Psi_1^*\Psi_2 = \frac{A_1A_2}{r_1r_2} e^{-i\left(\tilde{\Phi}_1 - \tilde{\Phi}_2\right)}. \qquad (35)$$

Введем разность фаз $\Delta\Phi = \tilde{\Phi}_1 - \tilde{\Phi}_2$ и рассмотрим разность $\left(\Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_2^*\Psi_1\right)$:

$$\Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_2^*\Psi_1 = \frac{A_1A_2}{r_1r_2}\left(e^{i\Delta\Phi} + e^{-i\Delta\Phi}\right) = \frac{A_1A_2}{r_1r_2}2\cos\Delta\Phi\,. \tag{36}$$

Подставим в выражение для интенсивности (29) квадрат модуля волной функции из (33) и учтем (34) и (36):

$$I = C'\left|\Psi\right|^2 = C'\left(\frac{A_1^2}{r_1^2} + \frac{A_2^2}{r_2^2} + 2\frac{A_1A_2}{r_1r_2}\cos\Delta\Phi\right). \tag{37}$$

Амплитуды связаны с интенсивностями $I_{1,2}$ соотношениями (31) и (32). Учтем их и получим интенсивность потока электронов на экране при обоих открытых щелях:

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1I_2}\cos\Delta\Phi\,. \tag{38}$$

Рассмотрим разность фаз:

$$\Delta\Phi = \tilde{\Phi}_1 - \tilde{\Phi}_2 = kr_1 - \omega t + \alpha - \left(kr_2 - \omega t + \alpha\right) = k\left(r_1 - r_2\right), \tag{39}$$

здесь учтено, что частота, волновое число и начальная фаза сферических волн одинаковы, так как они получаются при прохождении через щели одной и той же плоской волны. Выражение в скобках $\left(r_1 - r_2\right)$ – геометрическая разность хода, следовательно, на экране будет классическая картина дифракции от двух щелей.

Исходя из первого и второго постулата квантовой теории, было получено, что плоская волна де Бройля вида (22), при прохождении через экран с двумя щелями по схеме опыта Юнга дает на следующем экране дифракционную картину, что подтверждается экспериментами по дифракции электронных пучков.

.