

Глава 2

Основи на квантовата механика

2.1 Принципи на квантовата механика.

Квантовата механика описва движението на микрочастиците, взаимодействията между тях и взаимодействията им с външни полета. При експериментите, които извършваме с микрочастици, нашите макроскопични уреди взаимодействат с микрочастиците и неизбежно променят техните свойства. Квантовата механика позволява да се предскажат резултатите от тези експерименти. По-конкретно, квантовата механика предсказва:

- *възможните стойности* на измерваната физична величина;
- *вероятностите*, с които се получават тези стойности.

Тези предсказания се правят като се използва набор от определени правила, наречени *принципи (или постулати) на квантовата механика*. Принципите са формулирани след анализ на огромен брой експериментални данни и те се *постулират*, т.е. не се доказват, а се приемат за вярни.

Състоянието на една система в различни области на физиката се дефинира по различен начин. Най-общо казано, познаването на състоянието на една система трябва да дава възможност да се намерят всички измерими свойства на тази система.

В класическата механика една система от тела се характеризира с определен брой константни величини (маси, заряди, инерчни моменти и др.) и определен брой променливи (координати, скорости, моменти на импулса, енергии и др.). Състоянието на една чисто механична система от N материални точки например може да се опише от един многомерен реален вектор с $6N$ компоненти: $3N$ координати и $3N$ импулси. Ако знаем този вектор, можем да пресметнем момента на импулса на системата, $\vec{L} = \sum_{k=1}^N m_k \vec{r}_k \times \vec{v}_k$, потенциалната енергия $V = \sum_{k=1}^N V(\vec{r}_k)$ и кинетичната енергия на системата $T = \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} m_k \vec{v}_k^2$. Съгласно законите на Нютон, ако знаем този вектор в момента от времето t_0 и знаем силите, които действат върху частиците, можем да намерим стойността на този вектор във всеки следващ момент от времето, поне по принцип. С други думи, този вектор описва състоянието на класическата система като позволява:

- ако знаем вектора на състоянието в даден момент t_0 , да намерим всички величини, описващи системата;

- ако знаем вектора на състоянието в даден момент t_0 , да намерим вектора на състоянието в произволен следващ момент t ;
- можем да намерим вектора на състоянието с краен брой измервания.

Тази конструкция не може да се приложи в този си вид към квантовите системи, защото в квантовата механика не можем да знаем едновременно координатите и импулсите на частиците поради принципа на Хайзенберг за неопределеност. Затова състоянието на системата се дефинира по друг начин, но независимо от това горните три свойства на състоянието остават в сила. В квантовата механика състоянието на една частица се определя от *вълновата функция* на частицата $|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$, която е функция на координатата \vec{r} и времето t .

Нулев принцип на квантовата механика (състояние): *Във всеки един момент от времето състоянието на една квантовомеханична система се описва от абстрактен комплексен вектор в Хилбертовото пространство, наречен **вектор на състоянието** или **вълнова функция** $|\Psi(q, t)\rangle$.*

Тук q е обобщената координата на системата, т.е. съвкупността от всички координати на частиците, съставляващи системата. Вълновата функция съдържа *цялата информация за системата*: познаването на вълновата функция позволява намирането на всички величини, описващи системата, съгласно следващите постулати. Приема се, че вълновата функция на системата е нормирана,

$$\langle \Psi(q, t) | \Psi(q, t) \rangle = \int \Psi(q, t)^* \Psi(q, t) dq = 1. \quad (2.1)$$

Следва да се подчертае, че квантово-механичната информация за една система не е толкова пълна, както в класическата механика. Например поради съотношението на Хайзенберг за неопределеност в квантовата механика не можем да измерим едновременно координатата и импулса на една частица с произволна точност. Същото се отнася за кои да са две от компонентите на момента на импулса, както и за много други физични величини. Горният принцип следва да се разбира в смисъл, че вълновата функция съдържа *максималната възможна информация* за квантовата система.

Физичните величини в класическата физика се описват с *реални функции* на една или повече променливи, като обикновено това са времето, координатите и скоростите. Например скоростта $\vec{v}(t)$ е производната на координатата $\vec{r}(t)$ по времето t : $\vec{v}(t) = \dot{\vec{r}}(t)$, потенциалната енергия $V(\vec{r})$ е функция от разстоянието \vec{r} , кинетичната енергия T е функция на масата m и скоростта \vec{v} : $T = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 = \vec{p}^2 / (2m)$, където $\vec{p} = m \vec{v}$ е импулсът на частицата, а моментът на импулса се дава с векторното произведение на координатата \vec{r} и импулса \vec{p} : $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.

В квантовата механика функциите в класическата физика се заместват с оператори съгласно следния постулат:

Първи принцип на квантовата механика (оператори): *На всяка физична величина A се съпоставя **линеен ермитов оператор** \hat{A} . Функционалните зависимости в класическата физика остават непроменени, като физичните величини се заместват със съответните оператори.*

Оператори на основните физични величини. Основните оператори в квантовата механика са:

- координата: $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$;
- импулс: $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\hat{\nabla} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}} = -i\hbar\text{grad}_{\mathbf{r}}$;
- момент на импулса: $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$;
- кинетична енергия: $\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\Delta}$, където $\hat{\Delta} = \hat{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$;
- потенциална енергия: $\hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) = V(\mathbf{r})$;
- пълна енергия (хамилтониан): $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$;
- спин $\hat{\mathbf{S}}$ (няма класически аналог).

Първият принцип на квантовата механика дава връзката между операторите, описващи физичните величини, и реалните числа, които се измерват при експеримента.

Втори принцип на квантовата механика (допустими стойности): При измерването на една физична величина A могат да се получат само числени стойности α_n , които са собствени стойности на оператора \hat{A} на тази величина.

Понеже собствените стойности на един ермитов оператор са реални, това обуславя използването на ермитови оператори за представяне на физичните величини. Този принцип постулира, че при физичния експеримент могат да се измерят тези и само тези стойности на физичната величина, които принадлежат на спектъра на съответния оператор. Ако спектърът е дискретен, то експериментът ще измери само тези дискретни стойности. Стойностите, които ще се получат при конкретен експеримент, зависят от състоянието на системата и вероятностите за всяка от собствените стойности в това състояние; тези вероятности се дават от следващия принцип.

Резултатите от експериментите в квантовата механика не могат да се предскажат с абсолютната сигурност на класическата физика, а имат вероятностен характер. Вероятностите се дават от следващия принцип на квантовата механика.

Трети принцип на квантовата механика (вероятности): В състояние $|\Psi\rangle$ на квантовата система вероятността при измерването на една физична величина A да се получи собствената стойност α на оператора \hat{A} , съответстваща на собственото състояние $|a\rangle$, е

$$p(\alpha) = |\langle a|\Psi\rangle|^2. \quad (2.2)$$

В случая на непрекъснат спектър $p(\alpha)$ представлява плътността на вероятността в интервала $[\alpha, \alpha + d\alpha]$:

$$p(\alpha)d\alpha = |\langle a|\Psi\rangle|^2 d\alpha. \quad (2.3)$$

Нека да разгледаме базиса от собствените функции $|a_n\rangle$ на оператора \hat{A} . Разлагаме в този базис вълновата функция $|\Psi\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle, \quad (2.4)$$

където $c_n = \langle a_n | \Psi \rangle$. Това разложение може да се интерпретира като илюстрация на факта, че в състояние Ψ на квантовата система физическата величина няма определена стойност, а векторът на системата е суперпозиция от собствените вектори на оператора \hat{A} . С други думи, системата съществува едновременно във всички собствени състояния на \hat{A} , като вероятността да е в състояние $|a_n\rangle$ е $|c_n|^2 = |\langle a_n | \Psi \rangle|^2$. Тази вероятностна интерпретация на коефициентите c_n оправдава нормировката на вълновата функция (2.1), която означава, че общата вероятност да намерим системата в този базис е 1. Наистина,

$$1 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_k \sum_n c_k^* c_n \langle a_k | a_n \rangle = \sum_k \sum_n c_k^* c_n \delta_{kn} = \sum_n |c_n|^2, \quad (2.5)$$

Ако състоянието на системата е собствен вектор на оператора \hat{A} , т.е. $|\Psi\rangle = |a_n\rangle$, то ще имаме $|c_n|^2 = 1$ и $c_{k \neq n} = 0$. Следователно вероятността при измерването да получим стойност α_n е равна на 1, а за всички други стойности вероятността е 0. Затова се казва, че в собствените състояния на оператора \hat{A} физичната величина A има определена стойност.

Тук следва да се подчертае, че представата за вероятност е широко използвана и в класическата статистическа физика. Там обаче вероятността има различен смисъл. В класическата статистика се работи с ансамбли, съдържащи голям брой частици. Във всеки един момент се предполага, че всяка частица в този ансамбъл има добре дефинирана координата и скорост; просто ние нямаме точна информация за тях поради огромния брой на частиците. Вероятността една частица да има координата в интервала $[x, x + \delta x]$ и скорост в интервала $[v, v + \delta v]$ се задава с броя на частиците, попадащи в тези интервали разделен на общия брой на частиците в ансамбъла. В квантовата механика една величина A няма определена стойност в общия случай, когато системата не е в един единствен собствен вектор на \hat{A} . При измерването се получава не усреднена стойност от вероятностното разпределение по собствените стойности, а някоя от собствените стойности α_n на \hat{A} , с определена вероятност $|c_n|^2$. Вероятността в квантовата механика да измерим собствената стойност α_n представлява броя от измерванията, при които получаваме α_n , разделен на общия брой измервания.

Сега ще покажем, че *средната стойност на величината A в състояние $|\Psi\rangle$ е*

$$\langle A \rangle = \bar{A} = \frac{\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (2.6)$$

Ако $|\Psi\rangle$ е нормирана, то $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ и $\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$.

Наистина, нека да използваме разлагането (2.4) на $|\Psi\rangle$ по собствените вектори на оператора \hat{A} . Имаме

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_k \sum_n c_k^* c_n \langle a_k | \hat{A} | a_n \rangle = \sum_k \sum_n c_k^* c_n \alpha_n \langle a_k | a_n \rangle = \sum_n |c_n|^2 \alpha_n = \langle A \rangle, \quad (2.7)$$

където сме използвали ортонормираността на базиса, $\langle a_k | a_n \rangle = \delta_{kn}$. Понеже съгласно втория принцип на квантовата механика α_n са стойностите, получени при измерването на величината A , а $|c_n|^2$ съгласно третия принцип е вероятността за измерване на тази стойност α_n , този резултат дава добре познатата формула за средна стойност.

Понеже операторът \hat{A} е ермитов, $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, то средната стойност е реална, $\langle A \rangle \in \mathfrak{R}$. Наистина, имаме

$$\langle A \rangle^* = \frac{\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle^*}{\langle \Psi | \Psi \rangle^*} = \frac{\langle \Psi | \hat{A}^\dagger | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \langle A \rangle. \quad (2.8)$$

Този факт ни дава възможност да предскажем статистическия резултат (т.е. от голям брой измервания) от физическия експеримент в квантовата механика.

Четвърти принцип на квантовата механика (постулат за измерването): Ако при измерването на една физична величина A се получи собствената стойност α на оператора \hat{A} , съответстваща на собственото състояние $|a\rangle$, то след измерването квантовата система се намира в състояние $|a\rangle$.

С други думи, самият акт на измерването приготвя системата в измереното състояние $|a\rangle$, т.е. вълновата функция $|\Psi\rangle$ “колабира” в състояние $|a\rangle$. Съгласно копенхагенската интерпретация на квантовата механика, преди акта на измерването квантовата система може да е в суперпозиция от собствени състояния на оператора \hat{A} , но измерването кара системата да “избере” едно от тези състояния, в което да “колабира”. Това колабиране е случаен процес. Оттук следва, че една квантова система може да бъде приготвена в произволно собствено състояние $|a\rangle$ на оператора \hat{A} : просто правим достатъчен брой измервания, докато получим собствената стойност α , което ще сигнализира, че системата е в желаното състояние $|a\rangle$. Всичко това е възможно вследствие на факта, че нашите уреди са макроскопични; актът на измерването променя микроскопичната система поради това, че уредът е много по-голям от нея и в процеса на измерване микрочастицата неизбежно взаимодейства с уреда. Това е още една разлика с класическата физика, където свойствата на телата мога да бъдат измервани без телата да бъдат променени. В последните години бяха намерени и демонстрирани начини някои квантови системи да бъдат измерени и без да бъдат разрушавани: *demolition-free measurement*.

Очевидно е, че присъствието на наблюдател с неговата субективност е без значение; повечето експерименти в днешно време са автоматизирани и се извършват в отсъствието на наблюдателя. Измерването е обективен процес на взаимодействие на микрочастицата с уреда.

Постулатът на измерването дава естествено обяснение на връзката между комутирането на два оператора и едновременната измеримост на съответните физични величини. Съгласно този постулат, ако при измерването на физичната величина A се получи собствената стойност α на оператора \hat{A} , то системата след измерването е в собственото състояние $|a\rangle$:

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{A}} |a\rangle, \quad (2.9)$$

вълновата функция $|\Psi\rangle$ е колабирала в собственото състояние $|a\rangle$. Следващо измерване на същата величина A ще даде отново същата стойност α , понеже вълновата функция $|\Psi\rangle$ вече съвпада с $|a\rangle$. Математическият еквивалент на този факт е, че всеки оператор комутира сам със себе си: $[A, A] = 0$.

Нека след първото измерване на величината A да направим измерване на друга величина B . Ако съответният оператор \hat{B} комутира с оператора \hat{A} , то двата оператора имат еднакви собствени състояния. Следователно състоянието $|a\rangle$, в който е колабирала вълновата функция Ψ след измерването на A , е собствено състояние на оператора \hat{B} , което означава, че измерването на B ще остави системата в него. Следователно в това състояние величината B има определена стойност, т.е. A и B могат да бъдат измерени едновременно. Аналогичен резултат се получава и ако първо измерим величината B , а

след това A . С други думи, ако $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, то

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{A}} |a\rangle \xrightarrow{\hat{B}} |a\rangle, \quad (2.10a)$$

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{B}} |a\rangle \xrightarrow{\hat{A}} |a\rangle. \quad (2.10b)$$

Ако операторите \hat{A} и \hat{B} обаче не комутират, то двата оператора имат различни собствени състояния. Състоянието $|a\rangle$, в което е колабирала вълновата функция $|\Psi\rangle$ след измерването на A , вече не е собствено състояние на оператора \hat{B} , а е някаква суперпозиция от собствени състояния на \hat{B} . При измерването на B вълновата функция $|\Psi\rangle = |a\rangle$ следователно ще колабира в някое състояние $|b\rangle$ от собствените състояния на \hat{B} , което ще е различно от $|a\rangle$; крайното състояние е $|b\rangle$. Следователно в състояние $|a\rangle$ величината A има определена стойност, но величината B няма такава; с други думи A и B не могат да бъдат измерени едновременно. Ако измерим първо величината B и след това A , то системата ще премине първо в състояние $|b\rangle$, а след това в $|a\rangle$; следователно некомутирането на операторите води до различно крайно състояние:

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{A}} |a\rangle \xrightarrow{\hat{B}} |b\rangle, \quad (2.11a)$$

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{B}} |b\rangle \xrightarrow{\hat{A}} |a\rangle. \quad (2.11b)$$

Максималната съвкупност от величините, които могат да се измерят едновременно (съответстващи на взаимно комутиращи оператори), се нарича *пълен набор от динамични променливи* на системата.

Пети принцип на квантовата механика (еволуция): *Еволюцията на вълновата функция $|\Psi\rangle$ една квантова система с хамилтониан \hat{H} във времето се определя от уравнението на Шрьодингер:*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle, \quad (2.12)$$

където $\hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-34}$ J.s е редуцираната константа на Планк.

Уравнението на Шрьодингер, наричано също *вълновото уравнение*, е линейно хомогенно частно диференциално уравнение по времето (от първи ред) и координатите (от втори ред). Това е *параболично* частно диференциално уравнение, което е *числено неустойчиво* и изисква специални методи за числено интегриране.

Понеже уравнението на Шрьодингер е диференциално уравнение от първи ред по времето, то *вълновата функция $|\Psi(t)\rangle$ във всеки един момент от времето t се определя еднозначно от стойността на вълновата функция $|\Psi(t_0)\rangle$ в предишен момент $t_0 < t$* . Това свойство изразява *принципа за причинност* в квантовата механика.

Ако интегрираме формално уравнението на Шрьодингер, получаваме

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle, \quad (2.13)$$

където операторът

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{i\hbar \hat{H} \cdot (t-t_0)} \quad (2.14)$$

се нарича *оператор на еволюцията* или *пропагатор*. Понеже хамилтонианът е ермитов оператор, $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$, то пропагаторът е унитарен: $\hat{U}(t, t_0)^\dagger = \hat{U}(t, t_0)^{-1}$.

Формула (2.14) за пропагатора е вярна само когато хамилтонианът \hat{H} не зависи от времето. В противен случай пропагаторът може да се намери само с решаване на уравнението на Шрьодингер. Във всички случаи пропагаторът свързва вълновата функция в два различни момента от времето с формула (2.13). Ако знаем вълновата функция в даден момент от времето t_0 и пропагатора, можем да намерим вълновата функция във всеки един момент във времето t . Отбелязваме, че

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}. \quad (2.15)$$

Пропагаторът има два аргумента: началния момент t_0 и момента на пресмятането t . Обратният пропагатор ще еволюира вълновата функция в обратна посока: $\hat{U}(t, t_0)^{-1} = \hat{U}(t_0, t)$. Поради условието за нормираност на вълновата функция, $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1$, имаме

$$1 = \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle. \quad (2.16)$$

Понеже $\langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle = 1$ и понеже горното равенство трябва да е изпълнено за произволна $|\Psi(t_0)\rangle$, то намираме

$$\hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0) = \hat{1}, \quad (2.17)$$

т.е. пропагаторът е унитарен оператор и в общия случай на времезависим хамилтониан.

Ако фиксираме t_0 и разглеждаме t като независима променлива, можем да заместим формула (2.13) в уравнението на Шрьодингер (2.12). Така получаваме

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t_0, t) = \hat{H}(t) \hat{U}(t_0, t), \quad (2.18)$$

с началното условие (2.15). Следователно пропагаторът удовлетворява уравнението на Шрьодингер с начално условие, което не зависи от състоянието на системата, за разлика от уравнението на Шрьодингер (2.12) за вълновата функция. Следва да се отбележи обаче, че решаването на операторното уравнение (2.18) за пропагатора е значително по-трудно от решаването на уравнението (2.12) за вълновата функция. Причината е, че решаването на уравнението (2.18) за пропагатора $\hat{U}(t_0, t)$ е еквивалентно на решаването на уравнението на Шрьодингер за вълновата функция при произволно начално условие за $|\Psi(t)\rangle$.