КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Лекция №2: Квантовая механика одной частицы и принцип соответствия

А.Г. Семенов

I. ВВЕДЕНИЕ

На предыдущей лекции мы рассматривали простейшую квантовомеханическую систему. Несмотря на свою простоту, она содержит все основные черты любой квантовомеханической системы. А именно, состояние системы задается лучом в некотором Гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$, эволюция системы подчиняется уравнению Шредингера, физические наблюдаемые задаются самосопряженными операторами, живущими в тензорном произведении $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^*$ и действующими на вектора из $\mathcal{H}$, а процедура измерения носит вероятностный характер, причем при измерении происходит изменение вектора состояния системы. Давайте разберемся со всеми данными пунктами подробно на примере одной частицы во внешнем потенциале. Очевидно, что описание данной системы невозможно вывести из общих рассуждений и поэтому необходим некоторый принцип, опираясь на который можно было бы предложить некоторое описание. Данным принципом является принцип соответствия, согласно которому квантовомеханическое описание системы должно переходить в классическое описание системы в пределе, когда постоянная Планка стремится к нулю $\hbar \to 0$. Процедура перехода от классической системы к соответствующей ей квантовой системе называется квантованием. Но прежде чем приступить к ней, вспомним основные факты из классической механики.

II. КЛАССИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

Состояние системы в классической механике задается точкой в фазовом пространстве, или говоря простыми словами, набором координат и импульсов. При этом динамика системы определяется её Гамильтонианом $H(p, x)$, который является функцией от координат и импульсов. Динамические уравнения могут быть записаны в виде (мы в данной лекции будем говорить о системе с одной степенью свободы, подразумевая, что в большинстве случаев обобщение на системы с многим числом степеней свободы тривиально)

$$\dot{x} = \frac{\partial H(p,x)}{\partial p}, \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H(p,x)}{\partial x}. \tag{1}$$

Наблюдаемыми являются функции от координат и импульсов. В классической механике весьма удобно ввести понятие скобки Пуассона между двумя наблюдаемыми

$$\{f,g\} = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial x} \tag{2}$$

и связанную с ней симплектическую структуру. Благодаря этому уравнение движения для произвольной наблюдаемой может быть записано в виде

$$\dot{f} = \{f, H\}. \tag{3}$$

Для частицы во внешнем потенциале Гамильтониан имеет простой вид

$$H(p,x) = \frac{p^2}{2m} + V(x). \tag{4}$$

Итак, давайте перейдем к процедуре квантования.

III. КВАНТОВАНИЕ И ПРИНЦИП СООТВЕТСТВИЯ

Давайте теперь построим квантовое описание рассматриваемой нами системы, представляющей собой частицу во внешнем потенциале. Согласно процедуре квантования каждой физической наблюдаемой системы ставится в соответствие самосопряженный оператор $f(p,x) \to \hat{f}$. Принцип соответствия гласит, что данное соответствие следует построить таким образом, чтобы скобка Пуассона соотносилась с коммутатором. Иными словами если $\{f_1, f_2\} = f_3$, то соответствующие им операторы являются самосопряженными и удовлетворяют условию $[\hat{f}_1, \hat{f}_2] = i\hbar \hat{f}_3 + \hat{O}(\hbar^2)$. Постулируется, что операторы координаты и импульса удовлетворяют каноническим коммутационным соотношениям $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Принцип соответствия говорит о том, что $\hat{f} = f(\hat{p}, \hat{x}) + \hat{O}(\hbar)$. Вообще говоря, тут есть некоторая особенность, связанная с тем, что некоммутативность $\hat{p}$ и $\hat{x}$ не всегда позволяет задать $\hat{f}$ однозначно и требуются дополнительные соображения. Однако есть важный случай, когда неоднозначность отсутствует, а именно когда оператор есть сумма функций, одна только от координаты, а вторая только от импульса. Примером такой наблюдаемой является Гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \tag{5}$$

Теперь нам следует определиться с пространством состояний и построить квантово-механическое описание. Существует нетривиальное утверждение, которое носит название теоремы Фон Неймана-Стоуна и говорит о том, что существует единственное с точностью до унитарного преобразования неприводимое представление соотношения $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ операторами в Гильбертовом пространстве. Поэтому, если мы угадаем представление и проверим его неприводимость, то задача построения квантовомеханического описания будет решена. Из физического смысле оператора координаты следует, что в результате измерения мы можем получить значение координаты, которое может принимать любое действительное значение. Иными словами для любого q должен существовать собственный вектор $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ отвечающий данному собственному значению. Таким образом спектр данного оператора является непрерывным. а строго говоря в этом случае у операторов не может существовать собственных векторов в $\mathcal{H}$, Давайте для начала забудем об этом. Допустим, что мы имеем какое то состояние системы из Гильбертова пространства. Волновой функцией называется скалярное произведение $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$. Из полноты системы собственных функций должно следовать разложение единицы

$$\int dx|x\rangle\langle x| = \hat{1}, \tag{6}$$

где нам пришлось написать интеграл вместо суммы по всем собственным состояниям. Обкладывая данное соотношение вектором $|\psi\rangle$ получим соотношение

$$\int dx\psi^*(x)\psi(x) = \langle\psi|\psi\rangle. \tag{7}$$

Таким образом, мы получаем указание на то, что в качестве $\mathcal{H}$ можно выбрать пространство $\mathbb{L}^2$ комплекснозначных функций с интегрируемым квадратом модуля. Данное представление называется координатным представлением. В этом представлении оператор координаты действует как умножение $\langle x|\hat{x}|\psi\rangle = x\psi(x)$. Давайте из тех же соображений получим действие оператора импульса. Для этого вставим разложение единицы

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = \int dx'\langle x|\hat{p}|x'\rangle\psi(x'). \tag{8}$$

В то же самое время из коммутационных соотношений следует, что

$$(x - x')\langle x|\hat{p}|x'\rangle = i\hbar. \tag{9}$$

В обычных функциях данное уравнение не разрешимо, однако оно может быть решено в обобщенных функциях $\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar\delta'(x - x')$. Хороший вопрос состоит в том, единственно ли это решение. Оказывается что не единственно, но все другие ответы эквивалентны. Таким образом, оператор импульса действует как производная $\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar\psi'(x)$. Суммируя все вышесказанное мы приходим к следующему представлению. Пространство состояний представляет собой пространство $\mathbb{L}^2$ комплексно-значных функций $\psi(x)$ с интегрируемым квадратом модуля. Скалярное произведение задается выражением

$$\langle\chi|\psi\rangle = \int dx\chi^*(x)\psi(x) \tag{10}$$

При этом оператор импульса действует как оператор дифференцирования по x, а оператор координаты действует как оператор умножения на x. Вспоминая уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle \tag{11}$$

и умножая его скалярно на $\langle x|$ получим уравнение Шредингера в координатном представлении

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \langle x|\hat{H}|\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x,t) + V(x)\psi(x,t) \tag{12}$$

Однако, это вовсе не единственное представление, в котором может быть записано уравнение Шредингера.

IV. ИМПУЛЬСНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ И ПЕРЕХОД МЕЖДУ ПРЕДСТАВЛЕНИЯМИ

По аналогии с координатным пространством мы можем построить импульсное пространства исходя из собственных векторов оператора импульса $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ и используя разложение. единицы в виде

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar}|p\rangle\langle p| = \hat{1}. \tag{13}$$

Давайте теперь научимся переходить от одного представления к другому. Для этого следует вычислить скалярное произведение $\psi_p(x) = \langle x|p\rangle$, которое должно иметь смысл собственной функции оператора импульса. Несложно видеть, что $-i\hbar\psi_p'(x) = p\psi_p(x)$. Таким образом $\psi_p(x) = c_p e^{\frac{ipx}{\hbar}}$. Аналогичным образом можно показать, что $\langle x|x'\rangle =$

$c_x\delta(x-x')$. Действуя разложением единицы на $|x'\rangle$ можно показать что $\mathrm{c}_x = \mathrm{c}_p = 1$. Таким образом

$$\langle x|p\rangle = e^{\frac{ipx}{\hbar}}, \qquad \langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \qquad \langle p|p\rangle = 2\pi\hbar\delta(p-p'). \tag{14}$$

Переход от одного представления к другому происходит путем вставки разложения единицы

$$\langle p|\psi\rangle = \tilde{\psi}(p) = \int dx e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\langle x|\psi\rangle = \int dx e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\psi(x), \qquad \psi(x) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{ipx}{\hbar}}\tilde{\psi}(p). \tag{15}$$

Таким образом, эти два представления связаны путем преобразования Фурье.

V. НЕКОТОРЫЕ ЗАМЕТКИ О СОБСТВЕННЫХ СОСТОЯНИЯ ОПЕРАТОРОВ ИМПУЛЬСА И КООРДИНАТЫ

Мы увидели всю картину квантовой механики одной частицы оперируя собственными состояниями операторов координаты и импульса. Однако из найденых нами выше соотношений следует, что волновая функция в координатном представлении, отвечающая собственному состоянию оператора координаты, является обобщенной функцией, а собственное состояние оператора импульса задается неинтегрируемой квадратично волновой функцией. Иными словами, ни те ни другие вектора не лежат в исходном Гильбертовом пространстве $\mathbb{L}^2$. Для того, чтобы работать с данными векторами следует расширить Гильбертово пространство определенным образом, введя понятие оснащенного Гильбертова пространства. Для этого рассматривают некоторое всюду плотное подмножество гильбертова пространства и пространство линейных функционалов на нем. Тот факт, что собственные состояния операторов координаты и импульса не принадлежат Гильбертову пространству состояний означает, что они физически не реализуемы. Тем ни менее после оснащения Гильбертова пространства с такими состояния можно работать как же как и с состояниями из Гильбертова пространства, держа, однако, в голове тот факт, что скалярные произведения данных состояний следует понимать в смысле обобщенных функций. Разложению единицы и проекторам на соответствующие подпространства также можно придать смысл.