

2.5 Некоторые простейшие примеры и первоначальные открытия Шредингера и Гейзенберга

Рассмотрим случай, когда $n = 1$ и $\mathcal{V} = 0$, так называемую свободную частицу. Пусть $q_1 = x, q_2 = y, q_3 = z$, так что

$$H(\psi) = -\frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right).$$

Мы можем получить спектральное разложение H в явном виде, используя преобразование Фурье. Каждый единичный вектор ψ в $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(E^3)$ однозначно представляется в виде

$$\psi = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}(a, b, c) e^{i(ax+by+cz)} da db dc,$$

где $\hat{\psi}$ также имеет норму 1 в \mathcal{L}^2 , причем для таких ψ

$$\frac{1}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} a \hat{\psi}(a, b, c) e^{i(ax+by+cz)} da db dc;$$

аналогичные выражения имеются для $(1/i) \partial \psi / \partial y$ и $(1/i) \partial \psi / \partial z$. Таким образом, $H(\psi)$ есть преобразование Фурье от

$$\frac{\hbar}{2m} (a^2 + b^2 + c^2) \hat{\psi}(a, b, c).$$

Отсюда следует, что если при $t = 0$ волновая функция ψ имела преобразование Фурье $\hat{\psi}(a, b, c)$, то $\psi(x, y, z, t)$, в момент времени t имеет вид

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}(a, b, c) e^{i(ax+by+cz)} e^{-(i\hbar/2m)(a^2+b^2+c^2)t} da db dc,$$

Таким образом, $\psi(x, y, z, t)$ представляет собой непрерывную „суперпозицию“ функций переменных x, y, z, t вида

$$e^{i[(ax+by+cz)-(\hbar/2m)(a^2+b^2+c^2)t]} = e^{i\sqrt{a^2+b^2+c^2}[(ax+by+cz)/\sqrt{a^2+b^2+c^2} - (\hbar/2m)\sqrt{a^2+b^2+c^2}t]}$$

Такая функция описывает „плоскую волну“, которая движется со скоростью $\frac{\hbar}{2m} \sqrt{a^2 + b^2 + c^2}$ в направлении, перпендикулярном плоскости $ax + by + cz = 0$, и имеет длину волны $2\pi/\sqrt{a^2 + b^2 + c^2}$. Предположим, что $\hat{\psi} = 0$ вне малой области вокруг точки a_0, b_0, c_0 . Тогда компоненты импульса по осям x, y и z должны иметь значения, близкие к $\hbar a_0, \hbar b_0$ и $\hbar c_0$ соответственно, и ψ функция x, y, z и t является суперпозицией плоских волн с длиной волны, близкой к

$$\frac{2\pi}{\sqrt{a_0^2 + b_0^2 + c_0^2}} = \frac{2\pi\hbar}{p_0};$$

где $p_0 = \sqrt{(\hbar a_0)^2 + (\hbar b_0)^2 + (\hbar c_0)^2}$ — значение, вблизи которого будет находиться полный импульс. Таким образом, если в некотором состоянии импульс с вероятностью 1 находится вблизи p_0 , то волновая функция является суперпозицией плоских волн с длиной волны, близкой к $2\pi\hbar/p_0$. В этом смысле свободной частице с импульсом p соответствует волна длины $2\pi\hbar/p$.

В 1924 г., в последние дни старой квантовой теории, де Бройль выдвинул чисто умозрительную теорию, согласно которой частице с импульсом p соответствует „волна“ длины h/p . Вскоре эта теория получила экспериментальное подтверждение: различным ученым удалось наблюдать дифракционную картину от пучка электронов с импульсом p , вполне аналогичную той, которая получается от рентгеновских лучей с длиной волны h/p . Квантовая механика дает объяснение этому явлению при предположении, что $\hbar = h/2\pi$; таким образом, мы получаем второе экспериментальное подтверждение равенства $\hbar = h/2\pi$.

Вдохновленный работой де Бройля, Шредингер попытался построить „волновую механику“, которая относилась бы к классической механике так же, как волновая оптика относится к геометрической. Экспериментируя с возможными волновыми уравнениями и соответствующими им стоячими волнами и применяя свои идеи к электрону в атоме водорода, он пришел к уравнению

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right) \psi = 0,$$

где E — энергия электрона, m — его масса, e — его заряд, K — некоторая константа. Изучая это уравнение, он сделал основополагающее открытие, которое состояло в том, что

(а) это уравнение имеет решения, удовлетворяющие некоторым естественным требованиям регулярности, тогда и только тогда, когда значение энергии E принадлежит определенному дискретному множеству значений: $me^4/2K^2, me^4/8K^2, me^4/32K^2, \dots$;

(б) эти значения соответствуют уровням энергии Бора для атома водорода, если присвоить K значение $h/2\pi$.

Таким образом, Шредингер нашел способ получать эти дискретные значения, не выдвигая никаких предварительных требований дискретности. В 1926 и 1927 гг. он опубликовал ряд статей, озаглавленных „Кvantование как задача о собственных значениях“, в которых он использовал и обсудил некоторые следствия своего важнейшего открытия.

Теперь, конечно, нетрудно понять открытие Шредингера. Если мы возьмем предложенную Резерфордом модель атома водорода — тяжелое положительно заряженное ядро и электрон с равным по величине и противоположным по знаку зарядом $-e$, вращающийся по некоторой орбите вокруг ядра, — и не будем учитывать движение ядра, то получим классическую механическую систему, энергия которой равна

$$\frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}.$$

Переходя к соответствующей квантовой системе, мы получим, что наблюдаемой энергии соответствует дифференциальный оператор

$$\psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2 \psi}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

в гильбертовом пространстве $\mathcal{L}^2(E^3)$. Стационарными чистыми состояниями нашей системы будут состояния, определяемые собственными функциями этого оператора, а соответствующими собственными значениями будут значения энергии, которые точно определены в этих состояниях. Но дифференцируемая функция ψ будет собственной функцией этого оператора с собственным значением E тогда и только тогда, когда она удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2 \psi}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = E\psi,$$

или

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right) \psi = 0.$$

Это в точности уравнение Шредингера, где $K = \hbar$. Тот факт, что получающиеся при этом собственные значения совпадают с наблюдаемым спектром водорода, составляет третье подтверждение равенства $\hbar = h/2\pi$.

Несколькоими месяцами ранее Гейзенберг наметил совершенно иной подход к естественному объяснению энергетических уровней в атоме, который был позднее развит Гейзенбергом, Борном и Иорданом. Гейзенберг хотел создать новую механику, в которой не фигурировали бы такие не наблюдаемые непосредственно физические понятия, как положение и скорость электрона. Руководствуясь туманными, но вдохновляющими эвристическими соображениями, Гейзенберг пришел к рассмотрению аналогов дифференциальных уравнений классической механики, в которых переменными служили бесконечные матрицы. Элемент, стоящий в n -й строке и в m -м столбце такой матрицы, в некотором смысле соответствовал переходу с m -го на n -й уровень энергии системы. В развитой им теории каждой координате классической системы приписывается некоторая матрица Q_i , а каждому импульсу классической системы — некоторая матрица P_i причем требуется, чтобы матрицы удовлетворяли следующим условиям:

- (a) $P_k Q_j - Q_j P_k = \frac{\hbar}{2\pi i} \delta_j^k;$
- (b) $P_k P_j - P_j P_k = Q_k Q_j - Q_j Q_k = 0$ для всех j и k ;

(c) у матрицы H , получающейся подстановкой P_j и Q_k в классическое выражение для энергии, все не диагональные элементы равны нулю; диагональные элементы H принимаются за уровни энергии системы.

Оказалось, что эту задачу можно решить для различных интересных классических систем и в результате получаются те же уровни энергии, что и в волновой механике Шредингера. Читателю, знакомому со связью между операторами и матрицами, ясно, по крайней мере формально, почему это должно было получиться. Операторы, которые мы подставляем в классическое выражение энергии, чтобы получить оператор Шредингера, конечно, удовлетворяют условиям (a) и (b). Поэтому, если ввести базис, в котором оператор Шредингера записывается диагональной матрицей, то матрицы наших операторов будут удовлетворять условиям (a)–(c) и диагональные элементы матрицы оператора Шредингера будут его собственными значениями. Далее, как мы видели в предыдущем разделе, уравнения (a) и (b) имеют по существу единственное решение.

Эти идеи, введенные Гейзенбергом, Шредингером, Борном и Иорданом, привлекли огромное внимание, и многие математики и физики, в особенности Дирак, Бор и фон Нейман, способствовали их исследованию и развитию. К 1929 г. усилиями этих учеников старая квантовая теория и сырье идеи, о которых мы только что говорили, были превращены в систематическую теорию, являющуюся обобщением классической теории и известную теперь как квантовая механика.

2.6 Обобщенные координаты

В этом разделе мы покажем, что правило „квантования“ классической системы, данное в разд. 2.4, можно переформулировать таким образом, что оно будет применимо и к более общим системам, рассмотренным в разд. 1.3. Мы начнем с чисто математических замечаний.

Пусть \mathcal{M} — некоторое множество, в котором определено понятие борелевского множества, т. е. задано замкнутое относительно дополнения и счетного объединения семейство подмножеств, которые мы будем называть борелевскими множествами. Пусть C —