

ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

§ 1. Принцип неопределенности

Классическая механика и электродинамика при попытке применить их к объяснению атомных явлений приводят к результатам, находящимся в резком противоречии с опытом. Наиболее ясно это видно уже из противоречия, получающегося при применении обычной электродинамики к модели атома, в которой электроны движутся вокруг ядра по классическим орбитам. При таком движении, как и при всяком ускоренном движении зарядов, электроны должны были бы непрерывно излучать электромагнитные волны. Излучая, электроны теряли бы свою энергию, что должно было бы привести в конце концов к их падению на ядро. Таким образом, согласно классической электродинамике, атом был бы неустойчивым, что ни в какой степени не соответствует действительности.

Такое глубокое противоречие теории с экспериментом свидетельствует о том, что построение теории, применимой к атомным явлениям — явлениям, происходящим с частицами очень малой массы в очень малых участках пространства, — требует фундаментального изменения в основных классических представлениях и законах.

В качестве отправной точки для выяснения этих изменений удобно исходить из наблюдаемого на опыте явления так называемой дифракции электронов¹⁾. Оказывается, что при пропускании однородного пучка электронов через кристалл в прошедшем пучке обнаруживается картина чередующихся максимумов и минимумов интенсивности, вполне аналогичная дифракционной картине, наблюдающейся при дифракции электромагнитных волн. Таким образом, в некоторых условиях поведение материальных частиц — электронов — обнаруживает черты, свойственные волновым процессам.

¹⁾ Явление дифракции электронов было в действительности открыто после создания квантовой механики. В нашем изложении, однако, мы не придерживаемся исторической последовательности развития теории, а пытаемся построить его таким образом, чтобы наиболее ясно показать, каким образом основные принципы квантовой механики связаны с наблюдаемыми на опыте явлениями.

Насколько глубоко противоречит это явление обычным представлениям о движении, лучше всего видно из следующего мысленного эксперимента, представляющего собой идеализацию опыта с электронной дифракцией от кристалла. Представим себе непрозрачный для электронов экран, в котором прорезаны две щели. Наблюдая прохождение пучка электронов¹⁾ через одну из щелей, в то время как другая щель закрыта, мы получим на поставленном за щелью сплошном экране некоторую картину распределения интенсивности, таким же образом получим другую картину, открывая вторую щель и закрывая первую. Наблюдая же прохождение пучка одновременно через обе щели, мы должны были бы, на основании обычных представлений, ожидать картину, являющуюся простым наложением обеих предыдущих, — каждый электрон, двигаясь по своей траектории, проходит через одну из щелей, не оказывая никакого влияния на электроны, проходящие через другую щель. Явление электронной дифракции показывает, однако, что в действительности мы получим дифракционную картину, которая благодаря интерференции отнюдь не сводится к сумме картин, даваемых каждой из щелей в отдельности. Ясно, что этот результат никаким образом не может быть совмещен с представлением о движении электронов по траектории.

Таким образом, механика, которой подчиняются атомные явления, — так называемая *квантовая* или *волновая механика*, — должна быть основана на представлениях о движении, принципиально отличных от представлений классической механики. В квантовой механике не существует понятия траектории частиц. Это обстоятельство составляет содержание так называемого *принципа неопределенности* — одного из основных принципов квантовой механики, открытого *Гейзенбергом* (*W. Heisenberg, 1927*)²⁾.

Отвергая обычные представления классической механики, принцип неопределенности обладает, можно сказать, отрицательным содержанием. Естественно, что сам по себе он совершенно недостаточен для построения на его основе новой механики частиц. В основе такой теории должны лежать, конечно, какие-то положительные утверждения, которые будут рассмотрены ниже (§ 2). Однако для того, чтобы сформулировать эти утверждения, необходимо предварительно выяснить характер постановки задач, стоящих перед квантовой механикой. Для этого прежде всего

¹⁾ Пучок предполагается настолько разреженным, что взаимодействие частиц в нем не играет никакой роли.

²⁾ Интересно отметить, что полный математический аппарат квантовой механики был создан *В. Гейзенбергом* и *Э. Шредингером* в 1925—1926 гг., до открытия принципа неопределенности, раскрывающего физическое содержание этого аппарата.

остановимся на особом характере взаимоотношения, в котором находятся квантовая и классическая механики.

Обычно более общая теория может быть сформулирована логически замкнутым образом независимо от менее общей теории, являющейся ее предельным случаем. Так, релятивистская механика может быть построена на основании своих основных принципов без всяких ссылок на ньютоновскую механику. Формулировка же основных положений квантовой механики принципиально невозможна без привлечения механики классической.

Отсутствие у электрона ¹⁾ определенной траектории лишает его самого по себе также и каких-либо других динамических характеристик ²⁾. Ясно поэтому, что для системы из одних только квантовых объектов вообще нельзя было бы построить никакой логически замкнутой механики. Возможность количественного описания движения электрона требует наличия также и физических объектов, которые с достаточной точностью подчиняются классической механике. Если электрон приходит во взаимодействие с «классическим объектом», то состояние последнего, вообще говоря, меняется. Характер и величина этого изменения зависят от состояния электрона и поэтому могут служить его количественной характеристикой.

В этой связи «классический объект» обычно называют «прибором», а о его процессе взаимодействия с электроном говорят, как об «измерении». Необходимо, однако, подчеркнуть, что при этом отнюдь не имеется в виду процесс «измерения», в котором участвует физик-наблюдатель. Под измерением в квантовой механике подразумевается всякий процесс взаимодействия между классическим и квантовым объектами, происходящий помимо и независимо от какого-либо наблюдателя. Выяснение глубокой роли понятия измерения в квантовой механике принадлежит *Бору (N. Bohr)*.

Мы определили прибор как физический объект, с достаточной точностью подчиняющийся классической механике. Таковым является, например, тело достаточно большой массы. Однако не следует думать, что макроскопичность является обязательным свойством прибора. В известных условиях роль прибора может играть также и заведомо микроскопический объект, поскольку понятие «с достаточной точностью» зависит от конкретно поставленной задачи. Так, движение электрона в камере Вильсона

¹⁾ В этом и следующем параграфах мы говорим для краткости об электроне, имея в виду вообще любой квантовый объект, т. е. частицу или систему частиц, подчиняющихся квантовой и не подчиняющихся классической механике.

²⁾ Речь идет о величинах, характеризующих движение электрона, а не о величинах, характеризующих электрон как частицу (заряд, масса) и являющихся параметрами.

наблюдается по оставляемому им туманному следу, толщина которого велика по сравнению с атомными размерами; при такой степени точности определения траектории электрон является вполне классическим объектом.

Таким образом, квантовая механика занимает очень своеобразное положение в ряду физических теорий — она содержит классическую механику как свой предельный случай и в тоже время нуждается в этом предельном случае для самого своего обоснования.

Мы можем теперь сформулировать постановку задачи квантовой механики. Типичная постановка задачи заключается в предсказании результата повторного измерения по известному результату предыдущих измерений. Кроме того, мы увидим в дальнейшем, что квантовая механика, вообще говоря, ограничивает, по сравнению с классической механикой, набор значений, которые могут принимать различные физические величины (например, энергия), т. е. значений, которые могут быть обнаружены в результате измерения данной величины. Аппарат квантовой механики должен дать возможность определения этих дозволённых значений.

Процесс измерения обладает в квантовой механике очень существенной особенностью — он всегда оказывает воздействие на подвергаемый измерению электрон, и это воздействие при данной точности измерения принципиально не может быть сделано сколь угодно слабым. Чем точнее измерение, тем сильнее оказываемое им воздействие, и лишь при измерениях очень малой точности воздействие на объект измерения может быть слабым. Это свойство измерений логически связано с тем, что динамические характеристики электрона появляются лишь в результате самого измерения; ясно, что если бы воздействие процесса измерения на объект могло быть сделано сколь угодно слабым, то это значило бы, что измеряемая величина имеет определенное значение сама по себе, независимо от измерения.

Среди различного рода измерений основную роль играет измерение координат электрона. Над электроном, в пределах применимости квантовой механики, всегда может быть произведено ¹⁾ измерение его координат с любой точностью.

Предположим, что через определенные интервалы времени Δt производятся последовательные измерения координат электрона. Их результаты, вообще говоря, не лягут на какую-либо плавную кривую. Напротив, чем точнее производятся измерения, тем более скачкообразный, беспорядочный ход обнаружат их результаты в соответствии с отсутствием для электрона понятия траектории.

¹⁾ Еще раз подчеркнем, что, говоря о «произведенном измерении», мы имеем в виду взаимодействие электрона с классическим «прибором», отнюдь не предполагающее наличия постороннего наблюдателя.

Более или менее плавная траектория получится лишь, если измерять координаты электрона с небольшой степенью точности, например, по конденсации капелек пара в камере Вильсона.

Если же, оставляя точность измерений неизменной, уменьшать интервалы Δt между измерениями, то соседние измерения дадут, конечно, близкие значения координат. Однако результаты ряда последовательных измерений хотя и будут лежать в малом участке пространства, но в этом участке будут расположены совершенно беспорядочным образом, отнюдь не укладываясь на какую-либо плавную кривую. В частности, при стремлении Δt к нулю результаты близких измерений вовсе не стремятся лечь на одну прямую.

Последнее обстоятельство показывает, что в квантовой механике не существует понятия скорости частицы в классическом смысле этого слова, т. е. как предела, к которому стремится разность координат в два момента времени, деленная на интервал Δt между этими моментами. Однако в дальнейшем мы увидим, что в квантовой механике тем не менее может быть дано разумное определение скорости частицы в данный момент времени, которая при переходе к классической механике переходит в классическую скорость.

Но в то время как в классической механике в каждый данный момент частица обладает определенными координатами и скоростью, в квантовой механике дело обстоит совершенно иным образом. Если в результате измерения электрон получил определенные координаты, то при этом он вообще не обладает никакой определенной скоростью. Наоборот, обладая определенной скоростью, электрон не может иметь определенного местоположения в пространстве. Действительно, одновременное существование в любой момент времени координат и скорости означало бы наличие определенной траектории, каковой электрон не обладает. Таким образом, в квантовой механике координаты и скорость электрона являются величинами, которые не могут быть одновременно точно измерены, т. е. не могут одновременно иметь определенных значений. Можно сказать, что координаты и скорость электрона суть величины, не существующие одновременно. В дальнейшем будет выведено количественное соотношение, определяющее возможность неточного измерения координат и скорости в один и тот же момент времени.

Полное описание состояния физической системы в классической механике осуществляется заданием в данный момент времени всех ее координат и скоростей; по этим начальным данным уравнения движения полностью определяют поведение системы во все будущие моменты времени. В квантовой механике такое описание принципиально невозможно, поскольку координаты и соответствующие им скорости не существуют одновременно. Таким образом,

описание состояния квантовой системы осуществляется меньшим числом величин, чем в классической механике, т. е. является менее подробным, чем классическое.

Отсюда вытекает очень важное следствие относительно характера предсказаний, делаемых в квантовой механике. В то время как классическое описание достаточно для того, чтобы предсказывать движение механической системы в будущем совершенно точным образом, менее подробное описание в квантовой механике, очевидно, не может быть достаточным для этого. Это значит, что если электрон находится в состоянии, описанном наиболее полным возможным в квантовой механике образом, то тем не менее его поведение в следующие моменты времени принципиально неоднозначно. Поэтому квантовая механика не может делать строго определенных предсказаний относительно будущего поведения электрона. При заданном начальном состоянии электрона последующее измерение может дать различные результаты. Задача квантовой механики состоит лишь в определении вероятности получения того или иного результата при этом измерении. Разумеется, в некоторых случаях вероятность некоторого определенного результата измерения может оказаться равной единице, т. е. перейти в достоверность, так что результат данного измерения будет однозначным.

Все процессы измерения в квантовой механике можно разбить на две категории. В одну из них, обнимающую большинство измерений, входят измерения, которые ни при каком состоянии системы не приводят с достоверностью к однозначному результату. В другую же входят измерения, для каждого результата которых существует состояние, в котором измерение приводит с достоверностью к данному результату. Именно эти последние измерения, которые можно назвать *предсказуемыми*, играют в квантовой механике основную роль. Определяемые такими измерениями количественные характеристики состояния суть то, что в квантовой механике называют физическими величинами. Если в некотором состоянии измерение дает с достоверностью однозначный результат, то мы будем говорить, что в этом состоянии соответствующая физическая величина имеет определенное значение. В дальнейшем мы будем везде понимать выражение «физическая величина» именно в указанном здесь смысле.

В дальнейшем мы неоднократно убедимся, что далеко не всякая совокупность физических величин в квантовой механике может быть измерена одновременно, т. е. может иметь одновременно определенные значения (об одном примере — скорости и координатах электрона мы уже говорили).

Большую роль в квантовой механике играют наборы физических величин, обладающие следующим свойством: эти величины измеримы одновременно, причем если они имеют одновременно

определенные значения, то уже никакая другая физическая величина (не являющаяся их функцией) не может иметь в этом состоянии определенного значения. О таких наборах физических величин мы будем говорить как о *полных наборах*.

Всякое описание состояния электрона возникает в результате некоторого измерения. Мы сформулируем теперь, что означает полное описание состояния в квантовой механике. Полным образом описанные состояния возникают в результате одновременного измерения полного набора физических величин. По результатам такого измерения можно, в частности, определить вероятность результатов всякого последующего измерения независимо от всего, что происходило с электроном до первого измерения.

В дальнейшем везде (за исключением только § 14) под состояниями квантовой системы мы будем понимать состояния, описанные именно полным образом.

§ 2. Принцип суперпозиции

Радикальное изменение физических представлений о движении в квантовой механике по сравнению с классической требует, естественно, и столь же радикального изменения математического аппарата теории. В этой связи прежде всего возникает вопрос о способе описания состояния в квантовой механике.

Условимся обозначать посредством q совокупность координат квантовой системы, а посредством dq — произведение дифференциалов этих координат (его называют элементом объема *конфигурационного пространства* системы); для одной частицы dq совпадает с элементом объема dV обычного пространства.

Основу математического аппарата квантовой механики составляет утверждение, что состояние системы может быть описано определенной (вообще говоря, комплексной) функцией координат $\Psi(q)$, причем квадрат модуля этой функции определяет распределение вероятностей значений координат: $|\Psi|^2 dq$ есть вероятность того, что произведенное над системой измерение обнаружит значения координат в элементе dq конфигурационного пространства. Функция Ψ называется *волновой функцией* системы¹⁾.

Знание волновой функции позволяет в принципе вычислять вероятности различных результатов также и вообще всякого измерения (не обязательно измерения координат). При этом все эти вероятности определяются выражениями, билинейными по Ψ и Ψ^* . Наиболее общий вид такого выражения есть

$$\iint \Psi(q) \Psi^*(q') \Phi(q, q') dq dq', \quad (2.1)$$

¹⁾ Она была впервые введена в квантовую механику Шредингером (E. Schrödinger, 1926).