Оглавление

ПРЕДИСЛОВИЕ

В книге сделана попытка систематического изложения в малом объеме достаточно большого учебного материала, касающегося только нерелятивистской квантовой механики. Изложение материала ведется с учетом имеющихся у студентов знаний, полученных на раннем этапе обучения — при изучении курсов общей физики и высшей математики[1].

Предлагаемое издание ориентировано на студентов, которые изучают квантовую механику в течение одного семестра. Большое внимание уделяется тому, чтобы дать обучаемому правильное и полное понимание математического аппарата квантовой механики, ее физических основ. В конце каждой главы представлен список задач с ответами, самостоятельное решение которых в ряде случаев может помочь глубже понять часть вопросов, затрагиваемых в основном тексте.

Учебник начинается с введения и последующего рассмотрения математического аппарата квантовой механики. При этом дается понятие гильбертова пространства, вспоминается алгебра линейных операторов и кратко затрагиваются элементарные основы теории представлений. Затем вводятся физические постулаты и принципы, а также рассматриваются другие базовые положения квантовой механики. Далее обсуждаются способы описания эволюции квантовой системы.

После изложения аксиоматики квантовой теории в первых трех главах, в четвертой главе в рамках квантово-механического подхода решается ряд типичных задач об одномерном движении частицы, на примере которых представлена методика и способы решения подобного рода простых задач. Оставшаяся часть книги, включающая четыре главы, посвящена обсуждению разнообразных вопросов, ко-

[1] Данный учебник написан на основе курса лекций (в объеме 68 ч) по дисциплине «Квантовая механика», который автор читал в УрФУ имени первого Президента России Б. Н. Ельцина студентам физико-технологического института.

торые относятся к таким важным темам, как момент импульса, движение в центральном поле, приближенные методы решения уравнения Шредингера и многоэлектронные системы.

Учебник представляет собой самодостаточное законченное целое. Он позволяет сформировать у студентов современной взгляд на квантовую механику и дает возможность, во-первых, овладеть системой ее понятий, положений и принципов, во-вторых, получить знания, которые необходимо использовать при решении уравнений, записанных на основе квантово-механического подхода для конкретных микросистем, в-третьих, научиться на практике применять соответствующий математический аппарат при решении задач, в которых рассматриваются микрообъекты.

ВВЕДЕНИЕ

Квантовая механика является одним из основных разделов теоретической физики и играет фундаментальную роль в современной физике и химии. Ее можно подразделить на нерелятивистскую и релятивистскую механику. Становление первой связано с именами таких великих ученых, как Л. де Бройль, Э. Шредингер и В. Гейзенберг, второй — В. Гейзенберг, П. Дирак и В. Паули. Квантовая механика включает в себя как предельный случай классическую механику и классическую теорию поля.

С помощью квантовой механики удается по-новому взглянуть на многие явления ядерной, атомной и молекулярной физики, а также оптики и физики твердого тела. Ее применение дает возможность понять различные природные процессы, при объяснении которых прежние теории (ньютоновская механика и максвелловская электродинамика) приводили к результатам, находящимся в противоречии с экспериментом. Особенно это касается процессов, протекающих в физических системах атомных и субатомных масштабов (имеют размеры меньшие 10^{-9} м), другими словами, в микромире. В связи с этим к предмету изучения квантовой механики относится движение микроскопических объектов (микрочастиц), например, элементарных частиц, атомов, молекул.

Начнем с перечисления некоторых явлений, обнаруженных в конце XIX в. и начале XX в., при интерпретации которых исследователи столкнулись с непреодолимыми трудностями, что впоследствии привело к возникновению квантовой механики. Опираясь на принципы классической физики, невозможно было объяснить линейчатый характер атомных спектров (спектры одноатомных газов состоят из отдельных спектральных линий), форму спектрального распределения интенсивности высокочастотного равновесного теплового излучение абсолютно черного тела, закономерности внешнего фотоэффекта (процесс испускания электронов веществом под действием света), эффект Комптона (при рассеянии веществом монохроматического пучка рентгеновских лучей с длиной волны λ в спектре рассеянного излучения возникает дополнительная спектральная линия на длине волны $\lambda' > \lambda$). Сюда же можно отнести попытки построения теории атома, которые принадлежат к задачам, нерешаемым в рамках классической физики.

Планетарная модель атома, предложенная Э. Резерфордом в 1911 г., была с точки зрения классической электродинамики динамически неустойчива. Согласно этой модели, отрицательно заряженный электрон должен совершать движение по замкнутой орбите вокруг небольшого, плотного, положительно заряженного ядра. Однако, поскольку движение электрона ускоренное, он излучает электромагнитные волны, что неизбежно приводит к потере им энергии. Расчеты показывали, что расстояние от электрона до ядра со временем уменьшается и, через время порядка 10^{-10} с, электрон, двигаясь по спиралевидной траектории, должен упасть на ядро. Следовательно, эта модель не объясняет стабильность атома. Кроме того, оказалось, что данная модель не способна объяснить и линейчатый характер атомного спектра.

Чтобы добиться согласия теории с экспериментом при описании распределения энергии в высокочастотной части спектра теплового излучения абсолютно черного тела, в 1900 г. М. Планк выдвинул гипотезу, противоречащую классическим волновым представлениям об излучении. Он предположил, что электромагнитное излучение с линейной частотой ν испускается (или поглощается) и распространяется не непрерывно, а дискретно, в виде отдельных порций с энергией E кратной некоторой величине ΔE: $E = n \cdot \Delta E$, где n — целые числа. В свою очередь ΔE пропорциональна частоте ν излучения (поглощения) $\Delta E = h\nu$, где коэффициентом пропорциональности h является фундаментальная физическая постоянная, называемая *постоянной Планка*, $h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с (в системе единиц СИ).

В 1905 г. А. Эйнштейн, при объяснении закономерностей внешнего фотоэффекта, развил идеи Планка и сделал предположение о том, что излучение испускается, распространяется и поглощается только порциями (квантами) с энергией $E = \Delta E = h\nu$. Эти порции позднее назвали *фотонами*.

Обратимся теперь к эффекту Комптона, который был открыт в 1923 г. Попробуем объяснить его, основываясь на классических волновых представлениях об излучении. Согласно этим представлениям, механизм рассеяния состоит в том, что электроны в атомах вещества «раскачиваются» под воздействием электромагнитного поля падающей волны и совершают вынужденные колебания. Двигаясь с ускорением, они испускают во все стороны вторичное излучение с длиной волны, равной длине падающей волны. Следовательно, длины волн рассеянного и падающего излучения должны совпадать. Это противоречит опыту Комптона. Опираясь на корпускулярный (квантовый) подход к излучению и поглощению, предложенному А. Эйнштейном, ученые смогли понять природу эффекта Комптона.

Итак, наряду с многочисленными опытами по интерференции и дифракции света, проводимыми в XVII–XIX вв., которые приводили к выводу о волновой природе излучения, существовал ряд опытных фактов, противоречащих классическим представлениям об его волновой природе и для своего объяснения требующих квантового подхода к излучению. Указанные аспекты привели к созданию *корпускулярно-волнового дуализма* в учении о природе света, из которого следовало, что свет может вести себя и как совокупность волн, т. е. колебаний электромагнитного поля, и как поток световых частиц (фотонов). При этом выяснилось, что волновой и квантовый подходы к излучению не исключают, а взаимно дополняют друг друга и позволяют описать подлинные закономерности распространения света и его взаимодействия с веществом. Соотношения между корпускулярными характеристиками (массой m, полной энергией E и импульсом p) и волновой характеристикой (частотой ν или длиной волны $\lambda = c / \nu$, c — скорость света в вакууме) для фотонов следующие:

$$E = mc^2 = h\nu \text{ и } p = h\nu / c.$$

В 1921 г. К. Рамзауэр, исследуя прохождение медленных электронов (с энергией 0,75–1,1 эВ) через газ из атомов аргона, обнаружил, что, при определенной энергии электронов, их рассеяние на атомах существенно уменьшается, в результате чего они проходят через газ практически беспрепятственно. Это явление, когда атомы инертного газа становятся «несуществующими» для электронов, обладающих определенной скоростью, и электроны пролетают сквозь них без столкновений (что противоречит классическим представлениям), носит название *эффекта Рамзауэра*.

В 1924 г. Л. де Бройль выдвинул смелую гипотезу о том, что корпускулярно-волновой дуализм не является особенностью только фотонов, а обладает универсальностью и присущ частицам вещества. Им можно приписывать наряду с корпускулярными еще и волновые характеристики. Причем соотношения между корпускулярными и волновыми характеристиками частиц те же, что и для фотонов.

Согласно де Бройлю, любую частицу вещества массой m, движущуюся со скоростью v, т. е. у которой модуль импульса будет $p = mv$, можно сопоставить с волной. В дальнейшем такую волну стали называть *волной де Бройля*. Ее длина λ вычисляется по формуле

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}.$$

Например, волну де Бройля *свободной частицы* (на нее не действуют силы), движущуюся вдоль положительного направления координатной оси X, рассматривают в виде *плоской бегущей гармонической волны* с круговой частотой $\omega = 2\pi\nu$ и постоянной амплитудой A. Уравнение для нее имеет вид

$$\Psi(x,t) = A\cos(\omega t - kx) = A\cos[(Et - p_x x)/\hbar],$$

где t — время; k — *волновое число*, $k = 2\pi/\lambda$; $E = \hbar\omega$; $p_x = \hbar k$; $\hbar = h/2\pi$, а начальная фаза равна нулю.

Отметим, что волна де Бройля не является физической материальной волной, ее принято трактовать как «волну вероятности». Физический смысл этой волны заключается в том, что квадрат ее амплитуды в заданной точке пространства определяет плотность вероятности (см. п. 2.1) обнаружения соответствующей частицы в этом месте.

Гипотеза де Бройля получила экспериментальное подтверждение в 1927 г. в опытах К. Девиссона и Л. Джермера, которые изучали отражение электронов от пластинки никеля Ni. Ими обнаружено, что отражение происходит не по законам классической физики для частиц. Они наблюдали дифракционные и интерференционные явления. Позднее была экспериментально исследована дифракция протонов, нейтронов и даже молекул.

Кроме того, в 1913 г. Дж. Франком и Г. Герцем были проведены опыты, в которых изучалось прохождение через пары ртути пучка электронов, ускоренных электрическим полем. Экспериментально было установлено, что при столкновении электронов с атомами, кинетическая энергия электронов изменяется непроизвольным образом, принимая любые сколь угодно близкие значения, она может изменяться только на конкретную величину.

Несколько позднее, в 1922 г., О. Штерн и В. Герлах наблюдали за расщеплением узкого пучка нейтральных атомов серебра, проходящего через область с неоднородным магнитным полем. Данные эксперимента показали, что проекция магнитного момента атома на направление внешнего магнитного поля имеет определенные дискретные значения.

Таким образом, накопленные в первой четверти XX в. сведения указывали на следующие моменты. Во-первых, высокоэнергетичное излучение и микрочастицы вещества обладают свойствами волн и частиц, поэтому их нельзя рассматривать ни как волны, ни как частицы в обычном смысле этих слов. Во-вторых, некоторые физические величины микрообъектов могут принимать лишь дискретные значения. Классическая физика не описывала движение микрообъектов и не объясняла наблюдаемое квантование величин. Поэтому возникла необходимость в создании теории, которая учитывала бы двойственность природы этих объектов и позволяла бы понять закономерности движения в микромире. Такая физическая теория была построена. Она называется квантовой механикой и базируется на представлениях, принципиально отличных от представлений классической физики.

Отметим, что историческое становление квантовой механики проходило по двум независимым направлениям. Так, в середине 1925 г. В. Гейзенберг создал матричную механику, получившую дальнейшее развитие при участии М. Борна и П. Йордана. При ее создании В. Гейзенберг основывался на том, что у микрочастиц проявляются корпускулярные свойства. Второе направление связано с именем Э. Шредингера, который в начале 1926 г. построил волновую механику. Он опирался на идею де Бройля о наличии волновых свойств у микрочастиц. В дальнейшем выяснилось, что это две разные формы записи квантово-механического формализма.

Квантовая механика является статистической теорией, в рамках которой рассматриваются и отдельная микрочастица, и ансамбль таких частиц. В классической физике тоже есть раздел статистической механики, которая с помощью методов теории вероятностей изучает движение систем, состоящих из большого количества макрообъектов. Между ними существует принципиальное различие, связанное с описанием состояний частиц. Рассмотрим его на примере одной макро- и микрочастицы.

Обратимся к макрочастице, движение которой подчиняется законам классической физики. Длина волны де Бройля такой частицы несоизмеримо меньше размеров самой частицы и неоднородностей, встречающихся на ее пути. В пределах погрешности измерений можно точно определить как положение $\vec{r}$ макрочастицы в пространстве, так и ее импульс $\vec{p}$ (или скорость $\vec{v}$) в произвольный момент времени t. Возможность одновременного измерения местоположения и импульса классических частиц является столь характерной особенностью, что состояние таких объектов определяется путем задания совокупности их координат и импульсов. Знание этих физических величин позволяет проследить за изменением состояний макрочастиц и однозначно спрогнозировать их движение, которое происходит по вполне конкретным траекториям, а также находить значения различных физических величин, таких как полная энергия, момент импульса и др.

Волновые свойства микрочастицы, которые могут проявиться в экспериментах, не только накладывают существенные ограничения на отмеченный выше способ математического описания ее состояния, они приводят к отказу от его применения. В квантовой механике возникает необходимость по-другому задавать и описывать состояния (не через одновременное задание координат и импульсов), поскольку в произвольный момент времени можно измерить точно либо координаты микрочастицы, либо ее импульс. Связь между координатами и компонентами импульса микрочастицы для определенного момента времени выражается соотношением неопределенности Гейзенберга, о котором подробно поговорим в п. 3.3.

1. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Знакомство с квантовой механикой начнем с изучения ее математического аппарата, поскольку при изложении строгой физической теории, в том числе и квантовой механики, необходимо прежде всего определиться с математическим языком хотя бы на элементарном уровне. Также нужно ввести ряд понятий, физически обоснованных постулатов и принципов. И только затем, опираясь на эту базу и используя предложенный математический аппарат, можно вести речь о самой теории и ее развитии. Следует сказать, что с помощью адекватно построенной теории получают численные результаты, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Первая глава открывается рассмотрением абстрактного гильбертова пространства, что позволит дать математическую трактовку квантовой механики.

1.1. Абстрактное гильбертово пространство

Гильбертовым пространством $\mathfrak{R}$ называется множество математических объектов (элементов), на котором каждой паре объектов f и g по некоторому правилу, называемому *скалярным произведением* f и g, ставится в соответствие в общем случае комплексное число. Скалярное произведение двух объектов f и g будем обозначать символом (f, g). Как известно, оно вводит метрику в гильбертовом пространстве.

Пространство Гильберта $\mathfrak{R}$ является *линейным пространством*. Это означает, что оно удовлетворяет следующим аксиомам:

1) в пространстве определена операция сложения элементов, т. е. двум элементам f и $g \in R$ ставится в соответствие третий элемент h, равный их сумме $h = (f + g) \in \Re$. Эта математическая операция обладает свойствами —
   - коммутативности
   $$f + g = g + f,$$
   - ассоциативности
   $$(h + g) + f = h + (g + f);$$
2) в пространстве определена операция умножения элемента на число, т. е. любому элементу $f \in \Re$ и произвольному числу α ставится в соответствие элемент h, равный их произведению $h = \alpha f \in \Re$. Для этой операции выполняются свойства —
   - дистрибутивности
   $$\alpha(f + g) = \alpha f + \alpha g,$$
   - $1f = f$;
3) пространство содержит единственный нулевой элемент 0, для которого операция сложения с элементом f дает сам элемент f,
   $$0 + f = f.$$
   Кроме того, для нулевого элемента 0 справедливо равенство
   $$0f = 0$$
   (слева ноль, а справа нулевой элемент пространства);
4) для каждого f существует противоположный элемент $-f$, такой, что
   $$f + (-f) = f - f = 0.$$

Скалярное произведение обладает следующими свойствами:

1) $(f, g) = (g, f)^*$, где звездочка обозначает *комплексное сопряжение*;
2) $(f, g + g') = (f, g) + (f, g')$;
3) $(f + f', g) = (f, g) + (f', g)$;
4) $(f, \alpha g) = \alpha(f, g)$, где α — комплексное число;
5) $(\alpha f, g) = \alpha^*(f, g)$.

Из свойств 2–5 видно, что скалярное произведение линейно по отношению ко второму элементу *g* пары и антилинейно по отношению к первому *f*.

Если выполняется равенство $(f, g) = 0$, то *f* и *g* *ортогональны* друг другу. Значение α скалярного произведения (f, f) является неотрицательным вещественным числом $\alpha \geq 0$. Равенство $(f, f) = 0$ имеет место, когда $f = 0$.

Для элемента *f* можно ввести понятие его *нормы*

$$\|f\| = \sqrt{(f, f)}.$$

Норма может быть конечной или бесконечной. Если норма $\|f\|$ равна единице, то *элемент f* называется *нормированным к единице*. Путем задания

$$\|f - g\|$$

вводится *метрика*.

В дальнейшем при изложении математического формализма квантовой механики часто будем использовать обозначения П. Дирака. Например, элемент *векторного гильбертова пространства* $\Re$, который рассматривается как комплексный вектор и называется *кет-вектором*, обозначается символом $|\ \rangle$. Внутри этого символа ставится один или несколько значков-идентификаторов, позволяющих отличать один вектор от другого. Каждой паре двух кет-векторов $|f\rangle$ и $|g\rangle$ соответствует комплексное число α, являющееся их скалярным произведением $(|f\rangle, |g\rangle)$ (рис. 1.1).

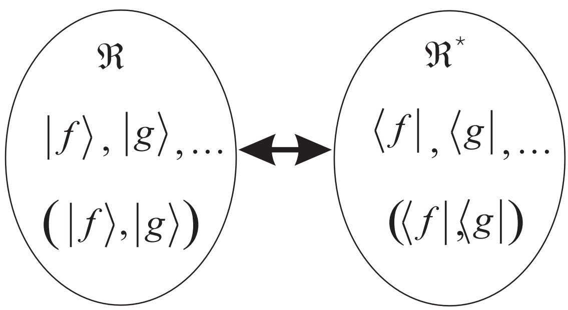

Рис. 1.1. Схематическое представление гильбертовых пространств

Любому кет-вектору из пространства $\Re$ можно поставить во взаимно-однозначное соответствие вектор сопряженного (дуального) пространства $\Re^*$. Вектор из $\Re^*$ называется *бра-вектором* и обозначается символом $\langle\ |$. Например, для кет-вектора $|g\rangle$ сопряженным будет бра-вектор $\langle g|$

$$|g\rangle = \langle g|^+ \text{ или } \langle g| = |g\rangle^+, \tag{1.1}$$

где индексом «+» обозначается *эрмитово сопряжение*.

Бра-вектор $\langle f|$ по отношению к кет-векторам можно рассматривать как *функционал*, т. е. отображение, которое ставит в соответствие кет-вектору $|g\rangle$ комплексное число α равное $(|f\rangle, |g\rangle)$

$$\langle f|g\rangle = \alpha = (|f\rangle, |g\rangle).$$

Аналогично описанному, кет-вектор $|f\rangle$ по отношению к бра-векторам рассматривается как функционал, ставящий в соответствие бра-вектору $\langle g|$ комплексное число α^*, которое равно $(\langle f|, \langle g|)$,

$$\langle g|f\rangle = \alpha^* = (\langle f|, \langle g|).$$

Поэтому дираковская запись $\langle f|g\rangle$ обозначает скалярное произведение кет-вектора $|f\rangle$ на кет-вектор $|g\rangle$ или бра-вектора $\langle g|$ на бра-вектор $\langle f|$, а первое свойство скалярного произведения имеет вид

$$\langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^*.$$

Отметим ряд особенностей гильбертова пространства $\Re$. Оно может быть как *n*-мерным и обозначаться символом $\Re_n$, так и бесконечномерным $\Re_\infty$. В первом случае в пространстве имеется конечное число *n* линейно независимых векторов (функций), во втором случае — бесконечное число.

Для пространства $\Re_n$ термин «*линейно независимые векторы*» $|l_1\rangle$, ..., $|l_n\rangle$ означает, что *линейная комбинация* $\alpha_1|l_1\rangle + ... + \alpha_n|l_n\rangle = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i |l_i\rangle$, где $\alpha_1, \alpha_2, ...$ — это произвольные числа, обращается в нуль только при значениях $\alpha_1 = \alpha_2 = ... = \alpha_n = 0$. Причем любая существующая в пространстве $\Re_n$ система *n* линейно независимых векторов $|l_1\rangle$, ..., $|l_n\rangle$ образует *базис* этого пространства. Произвольный кет-вектор $|g\rangle \in \Re_n$ можно единственным образом представить в виде линейной комбинации базисных кет-векторов $|l_1\rangle$, ..., $|l_n\rangle$