ИНФОРМАТИКА И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ И СОЦИАЛ ЬНЫХ СИСТЕМАХ

УДК. 53.072

В.М. Галкин, А.В. Волохин, С.В. Лещева

КЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

Предлагается вариант изложения основных понятий квантовой механики при чтении во втузах математических дисциплин, предусматривающих изучение уравнений в частных производных.

Ключевые слова: наблюдаемая, оператор, перестановочные соотношения, уравнение Шредингера.

Во втузовских программах некоторых математических дисциплин предусматривается изучение уравнений в частных производных. При этом должны приводиться сведения из линейной алгебры, включая элементы теории операторов. Это обстоятельство дает возможность изложить математические аспекты квантовой механики, что по понятным причинам стараются избежать в изучении курса физики.

При изложении теории нельзя избежать принципиального вопроса: каким образом и при каких условиях квантовое описание переходит в классическое? Он представляется весьма сложным с математической точки зрения, и это объясняет почему в учебниках квантовой механики обычно используются эвристические аргументы. Во всяком случае неверны утверждения о том, что классическая механика формально получается из квантовой предельным переходом к $\hbar$ (постоянная Планка) $\to 0$ или следует из соотношения неопределенности Гейзенберга. Хорошей иллюстрацией является проводимое далее рассмотрение одномерного движения свободной частицы, где проявляются особенности предельного перехода.

Предварительно приведем аксиомы квантовой механики.

1. Состояние квантовой системы описывается ненулевым вектором комплексного пространства со скалярным произведением. Векторы, отличающиеся скалярным множителем, описывают одно и то же состояние.

2. Наблюдаемые (координаты, скорости, энергия и т.д.) описываются эрмитовыми операторами. Результатом измерения является одно из собственных значений оператора. Результат измерения предсказать нельзя. Можно лишь указать среднее большого количества независимых измерений. Оно для оператора L в состоянии Ψ равно

$$\overline{L} = \frac{(\Psi, L\Psi)}{\|\Psi\|^2}. \qquad (1)$$

3. Эволюция состояния Ψ определяется уравнением Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi ,$$

где $\hat{H}$ называется оператором энергии.

4. Проблема квантования. Если классическая система описывается уравнениями Га-

мильтона, $\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}$, $\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$ $(k = 1, 2, ..., n)$, то операторы Q_k и P_k, соответствующие обобщенным координате q_k и импульсу p_k, удовлетворяют перестановочным соотношениям $[Q_k, Q_l] = [P_k, P_l] = 0$, $[Q_l\ P_l] = 0$ при $k \neq l$ и $i\hbar$ при $k = l$. Оператор энергии $\hat{H}$ строится из $H(q, p)$ заменой q и p на Q и P, хотя могут проявиться некоторые тонкости, связанные с неперестановочностью операторов.

Формула (1) из аксиомы 2 позволяет установить вероятностное распределение на множестве возможных результатов измерений L. Особенно просто это устанавливается в случае конечномерного пространства, на котором действуют операторы. Здесь для оператора L можно выбрать ортогональный базис пространства $e_1, e_2, ..., e_m$, состоящий из собственных векторов оператора. Если $\Psi = c_1 e_1 + c_2 e_2 + ... + c_m e_m$, то (1) превращается в

$$I = \sum_k \frac{|c_k|^2 \lambda_k \|e_k\|^2}{\|\Psi\|^2}, \tag{2}$$

где $Le_k = \lambda_k e_k$ и $\frac{|c_k|^2 \|e_k\|^2}{\|\Psi\|^2}$ интерпретируется как вероятность при измерении L получить значение λ_k.

Если пространство бесконечномерно, то у L может появиться непрерывный спектр и приходится вводить плотность вероятности аналогично тому, как это делается в теории вероятности. Примеры соответствующей процедуры появятся далее.

До сих пор оставался в стороне вопрос о подходящем выборе пространства. Теоретически он неособенно важен, поскольку вся информация о квантовой системе содержится в перестановочных соотношениях из аксиомы 4 и уравнении Шредингера. Оправданием этого утверждения служит теорема Стоуна фон Неймана. Не вдаваясь в точные формулировки отметим, что, согласно этой теореме, без ограничения общности можно ограничиться следующим пространством V. Элементами его служат функции n переменных $\Psi(x_1, x_2, ...x_n)$, а скалярное произведение $(\Psi, \varphi) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \cdots \int \Psi \overline{\varphi} dx_1 ... dx_n$. Операторы Q_k и P_k задаются равенствами $Q_k = x_k$, $P_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k}$. Обычно Ψ называют волновой функцией.

Обратимся теперь к рассмотрению квантового движения свободной частицы вдоль оси $x-$ов. Классическое движение описывается законом Ньютона $m\ddot{x} = 0$ и, очевидно, не зависит от массы m. Гамильтоновы уравнения можно записать как $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$, $\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$ для гамильтонина $H = \frac{1}{2} p^2$ и $q = x$. В квантовой картине волновая функция $\Psi(x, t)$ имеет один пространственный аргумент x, $Q-$оператор умножения на x и $P = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. Оператор энергии тогда оказывается равным $\hat{H} = \frac{1}{2} p^2 = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ и уравнение Шредингера превращается в

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}, \tag{3}$$

т.е. в уравнение теплопроводности. Очевидно, что прямолинейное требование $\hbar \to 0$ ни к чему не ведет. Метод Фурье выделяет семейство решений (3) вида

$$e^{\frac{i}{\hbar}\left(\omega x-\frac{\omega^2}{2}t\right)}, \tag{4}$$

зависящее от параметра ω. Нетрудно видеть, что эти решения являются собственными функциями оператора P, причем ω является собственным значением. В силу эрмитовости P надо ограничиться действительными значениями ω. При установлении ортогональности функций из (4) мы впервые встречаемся с появлением расходимости – обычного спутника в квантовых вычислениях, доставляющих много хлопот. В данном случае эта трудность преодолевается, если интеграл в скалярном произведении понимать в смысле главного значения по Коши. Однако от бесконечности нормы собственной функции избавиться не удается и в ортогональном разложении.

Однако, если рассматривать $\int\limits_{-\infty}^{\infty}$ как $\lim\limits_{N\to\infty}\int\limits_{-N}^{N}$, то можно сделать заключение о том, что нормы собственных функций из (4) «одинаковы» (хотя и бесконечны), а потому в представлении

$$\Psi(x,t)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(\omega)e^{\frac{i}{\hbar}\left(\omega x-\frac{1}{2}\omega^2 t\right)}d\omega \tag{5}$$

$\left|\Psi^*\right|^2$ можно считать плоскостью распределения значений импульса в состоянии Ψ.

Представление (5) волновой функции называется импульсным. Чаще имеют дело с самой $\Psi(x,t)$ – волновой функцией в координатном представлении. При нормировке $\|\Psi\|^2=1$ плотность распределения координаты дается выражением $\left|\Psi^*\right|^2$. Связь с ортогональными разложениями здесь более изощренная. Дело в том, что оператор умножения x не имеет «хороших» собственных функций. Эту трудность Дирак обошел введением «монстра» – δ – функции Дирака. Не вдаваясь в тонкости этой конструкции, отметим лишь формулу $x\delta(x-a)=a\delta(x-a)$ и $\Psi(x)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\Psi(t)\delta(x-t)dt$. Из последней из них следует ортогональность $\delta(x-a)$ и $\delta(x-b)$. Классическое приближение представляет собой асимптотику в (5) при $\hbar\to 0$. И здесь необходимо сделать какие-то предположения относительно Ψ^*. Физики рекомендуют положить

$$\Psi^*(\omega)=c(\omega)e^{\frac{i}{\hbar}\omega a}. \tag{6}$$

Тогда (5) перепишется в виде

$$\Psi(x,t)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}c(\omega)e^{\frac{i}{\hbar}\left(\omega(x-a)-\frac{1}{2}\omega^2 t\right)}d\omega. \tag{7}$$

Асимптотику теперь можно получить методом стационарной фазы. Именно основной вклад в интеграл дают значения ω, которые мало отличаются от значения ω_0, максимизирующего показатель экспоненты. Это значение равно $\omega_0=\frac{x-a}{t}$. Саму асимптотическую формулу можно найти в [1]. Приведем окончательный результат

$$\Psi(x,t)\approx\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{t}}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{(x-a)^2}{2t}}c\left(\frac{x-a}{t}\right). \tag{8}$$

Описание характера движения частицы в рамках приближения (8) зависит от требований, налагаемых на $c(\omega)$. Классическое движение с постоянной скоростью v и линейной зависимостью $x = a + vt$ координаты от времени предполагает «локализованность» плотности $\left|\Psi^*(\omega)\right|^2 = \left|c(\omega)\right|^2$ распределения скорости, т.е. отличие от нуля этой плотности вне интервала $(v-\varepsilon,\ v+\varepsilon)$ с «малым». Если это условие не выполнено, то вести речь о том, что классическая механика получается из квантовой предельным переходом $\hbar \to 0$ не приходится. Если $\left|c(\omega)\right|^2$ локализовано, то локализация имеет место и для $\left|\Psi(x,t)\right|^2$. Но уже интервал x, где обнаруживается частица, «расплывается» $\left|\dfrac{x-a}{t} - v\right| < \varepsilon \quad \Rightarrow x \in (a + vt - \varepsilon,\ a + vt + \varepsilon)$, т.е. движение частицы отклоняется от классического.

Аналогичные выводы можно сделать в предположение локализации $\left|\Psi(x,t)\right|^2$, т.е. при определенное положение частицы влечет «расплывание» скорости. Проще всего убедиться в этом, если заметить, что перестановочное соотношение $[Q,P] = i\hbar$ можно реализовать и операторами $Q = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial\omega}$, $P = -\omega$.

Сделаем несколько замечаний, касающихся изложения классического приближения в книгах по квантовой механике. Ограничимся книгами [2–5].

В книге Ландау и Лившица (с. 35–37) отмечается, что классическое движение частицы не обязано получаться при $\hbar \to 0$, однако какие-либо вычисления отсутствуют. Отмечается, что необходимо волновую функцию представлять в виде $\Psi = ae^{\frac{iS}{\hbar}}$, где a и S – «медленно» меняющиеся функции. В [5] для S получено уравнение Гамильтона-Якоби в частных производных, но дальнейшее рассмотрение касается оптико-геометрической аналогии, что уводит в сторону. Для свободной частицы S удовлетворяет уравнению $\dfrac{\partial S}{\partial t} + \dfrac{1}{2m}\left(\dfrac{\partial S}{\partial x}\right)^2 = 0$, и математические трудности в задаче можно преодолеть, если ограничиться полным интегралом $S = -\dfrac{\lambda^2 t}{2m} + \lambda x + \mu$.

В книгах Блохинцева, Мессиа и Паули ([3], [4], [5]) результаты исследования можно подытожить утверждением, что классическому движению при $\hbar \to 0$ следуют средние значения соответствующих операторов. В этих книгах разбирается и эффект «расплывания». В заключение приведем абстрактный вывод соотношения неопределенностей, отсутствующих в указанных книгах.

Пусть $[Q,P] = i\hbar$. Для действительного λ имеем неравенство $\left\|(Q + i\lambda P)\Psi\right\|^2 \geq 0$. Левая часть есть $((Q + i\lambda P)\Psi,\ (Q + i\lambda P)\Psi) = (\Psi, (Q - i\lambda P)(Q + i\lambda P)\Psi) = \left(\Psi, Q^2\Psi\right) - \hbar\lambda(\Psi,\Psi) + \lambda^2\left(\Psi, P^2\Psi\right)$ в силу $[Q,P] = i\hbar$. Соотношение неопределенности есть просто следствие неположительности дискриминанта многочлена от λ.

Библиографический список

1. **Эрдейи, Р.** Асимптотические разложения интегралов / Р. Эрдейи. – М., 1962.
2. **Ландау, Л.Д.** Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М., 1989.

3. **Блохинцев, Д.И.** Основы квантовой механики / Д.И. Блохинцев. – М., 1976.
4. **Паули, В.** Общие принципы квантовой механики / В. Паули. – М.–Л., 1947.
5. **Мессиа, А.** Квантовая механика / А. Мессиа. – М., 1978. Т. 1.

Дата поступления
в редакцию 17.04.2017

V.M. Galkin, A.V.Volohin, S.V. Leshcheva

THE CLASSIC APPROXIMATION IN THE QUANTUM MECHANICS

Nizhny Novgorod state technical university n.a. R.E. Alexeyev

Purpose: The exposition of main information about quantum mechanics is given. This variant may be used in mathematical courses in the technical universities.
Design/methodology/approach: The axiomatic of quantum mechanics and the investigation of the free particle motion are given.
Findings: A new approach to solving the motion problem is described.
Research limitations/implications: The paper serves as an illustration of applications of partial differential equation.
Originality/value. The paper to teachers and students of the technical universities is recommended.

Key words: Observable, operator, commutators, Schrodinger, equation.