Дополнительные материалы по курсу «Введение в квантовую физику»

Размерности. Атомная система единиц.

В классической макроскопической физике масштабы задачи (т.е. характерные параметры той или иной размерности) могут быть весьма различны. Поэтому нет никаких оснований привязывать систему единиц к каким-то характерным масштабам – вместо этого используются исторически возникшие системы единиц СИ и СГС. Отметим, что в теоретической физике принято использовать систему СГС, которая не требует введения четвертой базовой размерности для рассмотрения электрических эффектов. Вместо этого размерности электрических величин выражаются через механические. Например, из закона Кулона $F = q_1 q_2 / r^2$ получаем размерность заряда в системе СГС $[q] = M^{1/2} L^{3/2} T^{-1}$.

Однако на уровне микромира масштабы в большинстве задач представляют собой комбинации нескольких фундаментальных констант. Поэтому для описания явлений микромира удобно ввести т.н. атомную систему единиц (систему Хартри), все характерные масштабы в которой выражаются через комбинации трех фундаментальных констант – постоянной Планка, заряда и массы электрона. Например, атомный масштаб длины $a_0 = \hbar^2 / me^2 \approx 5.29 * 10^{-9}\, см$ действительно соответствует радиусу орбиты электрона в атоме водорода. Аналогично, атомный масштаб скорости $V_a = e^2/\hbar \approx 2.19 * 10^8\, см/с$ дает оценку величины скоростей электронов в атоме, а атомный масштаб энергии – порядок величины работы выхода.

Если нас интересует не только движение электрона в атоме, но и его взаимодействие с электромагнитной волной – то у нас в задаче появляется два масштаба скорости – атомный масштаб и скорость света. Их отношение $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ называется постоянной тонкой структуры. Это безразмерный параметр, который позволяет ввести иерархию масштабов. Например, новый масштаб длины $\alpha^{-1} a_0$ дает нам длину волны, излучаемой электроном, движущимся по орбите с радиусом a_0.

Интеграл Фурье.

Немонохроматическое электромагнитное поле, записанное в виде волнового пакета, с математической точки зрения является т.н. интегралом Фурье. Из школьного курса алгебры известно, что периодическую функцию можно разложить в ряд Фурье, и коэффициенты разложения содержат полную информацию об этой функции. Непериодическую функцию можно представить как периодическую, период которой стремится к бесконечности. Наименьшая частота при этом будет стремиться к нулю – т.е. в ряд будут входить все возможные частоты, поэтому ряд превратится в интеграл. Используя комплексную экспоненту, его можно записать в виде $f(t) = (2\pi)^{-1/2} \int f(\omega) e^{i\omega t} d\omega$, где комплексная амплитуда $f(\omega)$ играет роль коэффициентов разложения. Ее можно найти обратным преобразованием $f(\omega) = (2\pi)^{-1/2} \int f(t) e^{-i\omega t} dt$.

Пусть источник испускает квазигармоническую электромагнитную волну $E(t) = E_0(t) e^{i\omega_0 t}$, которую с помощью интеграла Фурье можно представить как суперпозицию волн с различными частотами $E(t) \sim \int E_0(\omega) e^{i(\omega_0 + \omega)t} d\omega$. Каждая частотная компонента распространяется со своей скоростью $V(\omega) = c/n(\omega)$. Как известно, дисперсию света в веществе, т.е. зависимость скорости распространения волны или ее волнового вектора $k(\omega) = \omega n(\omega)/c$ от частоты обнаружил еще Ньютон. Поэтому распространение волнового пакета описывается формулой $E(t,x) \sim \int E_0(\omega) e^{i(\omega_0+\omega)t - ik(\omega_0+\omega)x} d\omega$. Закон дисперсии можно разложить в ряд около ω_0: $k(\omega_0+\omega) = k(\omega_0) + \left.\frac{dk}{d\omega}\right|_{\omega_0} \omega + \dots$. Тогда

$$E(t,x) \sim e^{i\omega_0\left(t - \frac{k(\omega_0)}{\omega_0}x\right)} \int_{-\infty}^{\infty} E_0(\omega) e^{i\omega\left(t - \left.\frac{dk}{d\omega}\right|_{\omega_0} x\right) + \dots} d\omega \approx E_0\left(t - \frac{x}{V_g}\right) e^{i\omega_0\left(t - \frac{x}{V_{ph}}\right)},$$

$V_{ph} = \omega/k$ - фазовая скорость, $V_g = d\omega/dk$ - групповая скорость. Эти скорости могут довольно сильно различаться. Если учесть высшие производные закона дисперсии, можно получить расплывание волнового пакета.

Когерентность

В большинстве случаев свет – результат излучения большого числа атомов. Если речь идет о звезде или лампе накаливания, то даже если атомы излучают на одной и той же частоте – они никак не связаны друг с другом, поэтому излучаемые ими волны имеют случайные начальные фазы. Это приводит к тому, что фаза излученного таким источником света флуктуирует. Можно показать, что характерное время, за которое фаза световой волны случайным образом меняется, обратно пропорционально его ширине спектра. Ширина спектра излучения абсолютно черного тела по формуле Планка по порядку величины равна его средней частоте - поэтому фаза света звезды или лампы накаливания сбивается буквально на расстоянии нескольких длин волны.

Две волны с одной частотой называют когерентными, если их разность фаз не меняется со временем. Только такие волны могут интерферировать друг с другом. Максимальное расстояние вдоль луча света, на котором его фаза не успевает случайно измениться, называют длиной когерентности. Как мы показали выше, длина когерентности света звезды оказывается немногим больше длины волны. Значительно большую длину когерентности имеет лазерное излучение – за счет того, что в лазере все атомы излучают не независимо. Для измерения длины когерентности светового луча используют интерферометр Майкельсона-Морли: луч света разделяется на два при помощи полупрозрачного зеркала. Каждый луч идет по своему пути, отражается от своего зеркала и снова возвращается назад. Оба луча снова соединяются на том же полупрозрачном зеркале – но от разницы путей до двух зеркал зависит, сложатся эти два луча в фазе или в противофазе. Поэтому при медленном смещении одного из зеркал интенсивность света на выходе интерферометра будет осциллировать. Если же разница путей до двух зеркал станет больше длины когерентности – интерференция пропадет, и интенсивность света на выходе перестанет зависеть от положения зеркала. Длина когерентности лазерного излучения может достигать нескольких метров.

Аналогичным образом определяют поперечный радиус когерентности – как максимальное расстояние между точками волнового фронта волны, между которыми разность фаз остается постоянной. Для измерения радиуса когерентности используют двухщелевой интерферометр Юнга. При прохождении плоской волны через две тонкие щели на экране за щелями возникает интерференционная картина. Но если расстояние между щелями превышает радиус когерентности – интерференционная картина пропадает.

Область пространства, имеющую размеры длины и радиуса когерентности, называют объемом когерентности. С точки зрения квантовой механики каждый фотон интерферирует сам с собой. Поэтому объем когерентности определяет границы области, в которой локализован отдельный фотон.

Операторная алгебра в квантовой механике.

Математической аппарат квантовой механики использует алгебру линейных операторов, знакомую студентам по курсу линейной алгебры. По определению оператор задает соответствие между элементами двух множеств. В квантовой механике линейный оператор $\hat{L}$, действуя на некую волновую функцию φ, дает в результате какую-то другую функцию $\psi = \hat{L}\varphi$.

Если мы зададим некий ортонормированный базис $\{\varphi_n\}$: $\int \varphi_m^* \varphi_n dx = \delta_{nm}$, то результат действия оператора на любую волновую функцию $\psi = \sum a_n \varphi_n$ может быть выражен через матрицу т.н. матричных элементов оператора $L_{nm} = \int \varphi_m^* \hat{L} \varphi_n dx$, представляющих собой скалярное произведение базисного вектора на результат действия оператора на другой базисный вектор. В линейной алгебре мы обозначили бы такую конструкцию выражением вида $\left(\varphi_m \hat{L} \varphi_n\right)$. В квантовой физике приняты немного иные обозначения, именно, пишут $\left\langle \varphi_m \middle| \hat{L} \middle| \varphi_n \right\rangle$, а сами волновые функции записывают в виде $\left|\varphi\right\rangle$. Кроме того, волновую функцию принято нормировать на единицу $\left\langle \varphi \middle| \varphi \right\rangle = 1$ – существенным является направление вектора, но не его длина.

Важнейшим свойством формул линейной алгебры является их инвариантость относительно выбранного базиса: если мы выберем другой набор базисных функций $\tilde{\varphi}_{n'} = \sum\limits_n u_{nn'} \varphi_n$, вид формул и результаты вычисления останутся неизменными (хотя коэффициенты a_n и матричные элементы L_{nm} поменяются согласно формулам преобразования базиса). Не содержащая индексов «векторная» нотация как раз и подчеркивает это обстоятельство[1].

Кратко перечислим важные для нас свойства линейных операторов.

1. Оператор является линейным, если для произвольных функций φ и ψ выполняется условие $\hat{L}(\alpha\psi + \beta\varphi) = \alpha\hat{L}\psi + \beta\hat{L}\varphi$.

2. Произведением операторов является оператор, действующий на функцию так же, как последовательное действие этих двух операторов. Умножение операторов, вообще говоря, некоммутативно. Как мы увидим, коммутатор операторов $\left[\hat{A}\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ играет важную роль в квантовой механике.

3. Для любого оператора можно ввести сопряженный ему оператор, который определяется следующим равенством $\left\langle \psi \middle| \hat{L}^+ \middle| \varphi \right\rangle = \left(\left\langle \varphi \middle| \hat{L} \middle| \psi \right\rangle\right)^*$. Очевидные свойства сопряженного оператора: $\left(\hat{L}^+\right)^+ = \hat{L}$, $\left(\alpha\hat{L}\right)^+ = \alpha^*\hat{L}^+$. Также несложно показать, что $L_{ij}^+ = L_{ji}^*$, $\left(\hat{M}\hat{L}\right)^+ = \hat{L}^+\hat{M}^+$.

4. Оператор называется эрмитовым, если он совпадает с сопряженным ему оператором $\hat{L}^+ = \hat{L}$. Очевидно, любой оператор можно разложить на сумму эрмитовой и антиэрмитовой части $\hat{L} = \hat{M} + i\hat{N}$, где $\hat{M} = \left(\hat{L} + \hat{L}^+\right)\big/2$ и $\hat{N} = \left(\hat{L} - \hat{L}^+\right)\big/2i$ - эрмитовы. Произведение эрмитовых операторов является эрмитовым, только если эти операторы коммутируют: $\hat{N}^+ = \left(\hat{M}\hat{L}\right)^+ = \hat{L}^+\hat{M}^+ = \hat{L}\hat{M}$. Матричные элементы эрмитовых операторов всегда действительны.

Помимо собственно математического аппарата операторной алгебры необходимо определить, каким именно образом этот аппарат применяется в квантовой механике. Это задается следующими аксиомами:

[1] Вообще говоря, не стоит представлять себе векторы и тензоры как массивы чисел. Лучше думать о них как о неких абстрактных объектах, которые сами по себе от выбора базиса не зависят, но для которых *для каждого заданного базиса* можно вычислить набор координат. Собственно, именно такому взгляду и учат в линейной алгебре, однако наглядный образ «таблички с числами» почему-то пересиливает. Но ведь неправильно думать, что, например, такая векторная величина, как сила тяжести, меняется при повороте системы координат. Очевидно, физический объект - сила тяжести - остается неизменным, а меняются только представление этого вектора в выбранных координатах.

- волновые функции $|\varphi\rangle$ описывают различные состояния квантовой системы;
- каждому измеримому (наблюдаемому) параметру квантовой системы соответствует какой-то эрмитов оператор;
- среднее значение параметра квантовой системы определяется матричным элементом соответствующего ему оператора в данном квантовом состоянии, например, среднее значение координаты частицы в состоянии $|\psi\rangle$ определяется матричным элементом оператора координаты $\overline{x} = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle$.

Отметим, что в начале разговора об использовании линейной алгебры мы сделали одно существенное упрощение - предположили, что набор $\{\varphi_n\}$ включает *конечное число* базисных функций. В общем случае волновая функция, являясь произвольной функцией координат, в виде суперпозиции конечного числа заданных базисных функций разложена быть не может. То есть, операторы действуют в бесконечномерном пространстве (гильбертовом пространстве). Однако сути дела сказанное не меняет – б**о**льшая часть утверждений из линейной алгебры, установленных для конечномерных пространств, сохраняет свою силу. В рамках нашего курса разница между гильбертовым пространством и пространством конечной размерности не существенна.

Важное значение для квантовой механики играют собственные функции (СФ) $|\psi_n\rangle$ и собственные значения (СЗ) λ_n оператора - решения уравнения $\hat{L}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle$. СЗ эрмитовых операторов действительны $\lambda_n = \lambda_n^*$, поэтому если квантовая система находится в собственном состоянии $|\psi_n\rangle$ какого-то оператора $\hat{L}$, то при измерении параметра L мы всегда будем получать его СЗ λ_n, а его дисперсия будет равна нулю.

Кроме того, система СФ оператора является полной системой (базисом). СФ эрмитова оператора, относящиеся к разным СЗ, ортогональны $\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}$. Поэтому если все СЗ эрмитова оператора различаются, то его СФ образуют ортонормированный базис. Но даже если для одного СЗ оператора существует несколько СФ (такие СЗ называются вырожденными), то из них всегда можно построить соответствующее число их линейных комбинаций, которые будут взаимно ортогональными (ортогонализация по Шмидту): $|\varphi_1\rangle = |\psi_1\rangle$; $|\varphi_2\rangle = |\psi_1\rangle - \left(|\psi_1|^2 / \langle\psi_1|\psi_2\rangle\right)|\psi_2\rangle$; и т.д.

Наконец, если два оператора имеют общую систему СФ, то они коммутируют: $\hat{L}\hat{M}|\psi_n\rangle = \hat{L}\mu_n|\psi_n\rangle = \mu_n\lambda_n|\psi_n\rangle = \hat{M}\hat{L}|\psi_n\rangle$, обратное тоже верно.

В завершение рассмотрим строгий вывод соотношения неопределенностей Гейзенберга. Рассмотрим оператор вида $\hat{L}^+\hat{L}$. Его среднее значение всегда неотрицательно. Действительно, $\langle\psi|\hat{L}^+\hat{L}|\psi\rangle = \langle\hat{L}\psi|\hat{L}\psi\rangle = |\hat{L}\psi|^2 \geq 0$. Рассмотрим оператор $\hat{L} = \hat{x} - \overline{x} - i\gamma(\hat{y} - \overline{y})$, где $\hat{x}$ и $\hat{y}$ - эрмитовы операторы, $\overline{x}$ и $\overline{y}$ - их средние значения, и $[\hat{x}\hat{y}] = i\hat{A}$. Тогда неотрицательным оказывается выражение

$$\langle\psi|\overline{(\Delta x)^2} + \gamma^2\overline{(\Delta y)^2} + i\gamma[\hat{x}\hat{y}]|\psi\rangle = \overline{(\Delta x)^2} + \gamma^2\overline{(\Delta y)^2} - \gamma\overline{A} \geq 0$$

Для выполнения этого неравенства для любых γ детерминант этого трехчлена должен быть неположителен, откуда получаем неравенство $\overline{(\Delta x)^2}\,\overline{(\Delta y)^2} \geq \overline{A}^2/4$. Это точное выражение для соотношения неопределенностей Гейзенберга. В частности, для дисперсий операторов координаты и импульса получаем $\overline{(\Delta x)^2}\,\overline{(\Delta p)^2} \geq \hbar^2/4$.