

§ 2. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ. СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ И ДИСПЕРСИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

В квантовой механике состояние системы описывается *волновой функцией* $\Psi(q, t)$. В общем случае волновая функция является комплекснозначной. Физический смысл имеет квадрат модуля волновой функции $|\Psi(q, t)|^2 = \Psi^*(q, t)\Psi(q, t)$, который определяет плотность вероятности обнаружения частицы в момент времени t в точке с координатой q .

Ограничимся пока лишь теми волновыми функциями, которые могут быть проинтегрированы с квадратом модуля, то есть для которых интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(q, t)|^2 dq$ сходится. Поскольку вероятность обнаружить частицу во всём пространстве равна 1, то это накладывает определённое *условие нормировки* на волновую функцию $\Psi(q, t)$, а именно для каждого момента времени t должно выполняться равенство:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(q, t)|^2 dq = 1. \quad (2.1)$$

В связи с тем, что время в квантовой механике играет роль параметра, часто, где это не может привести к недоразумению, параметр t будем опускать.

Скалярное произведение двух функций $\varphi(q)$ и $\psi(q)$ определяется соотношением

$$\langle \varphi | \psi \rangle \equiv \int \varphi^*(q) \psi(q) dq. \quad (2.2)$$

Обозначение скалярного произведения посредством $\langle \varphi | \psi \rangle$ называется *дираковским*.

Скалярное произведение функции φ и результата действия оператора F на функцию ψ часто также записывается в виде

$$\langle \varphi | F \psi \rangle \equiv \langle \varphi | F | \psi \rangle.$$

Условие нормировки функции Ψ в дираковских обозначениях запишется как

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1,$$

а определение эрмитово-сопряжённого оператора (см § 1):

$$\langle \varphi | F | \psi \rangle = \langle F^+ \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | F^+ | \varphi \rangle^*.$$

Скалярное произведение функции φ и результата действия оператора F на функцию ψ часто также записывается в виде

$$\langle \varphi | F \psi \rangle \equiv \langle \varphi | F | \psi \rangle.$$

Если известна волновая функция квантовой системы $\Psi(q, t)$, то *среднее значение* (*математическое ожидание*) физической величины F может быть вычислено по формуле:

$$\langle F \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle \equiv \int \Psi^*(q, t) \hat{F} \Psi(q, t) dq. \quad (2.3)$$

Здесь волновая функция $\Psi(q, t)$ предполагается нормированной на единицу в соответствии с (2.1).

Задача 2.1. Показать, что необходимым и достаточным условием вещественности среднего значения величины F является эрмитовость (самосопряженность) ее оператора F .

Решение. Докажем сначала достаточность, т.е. докажем вещественность среднего значения F , считая F эрмитовым оператором. Пользуясь определениями среднего значения и эрмитова оператора, имеем:

$$\langle F \rangle^* = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \langle F \rangle.$$

Теперь перейдем к доказательству необходимости. Пусть $\langle F \rangle^* = \langle F \rangle$. Обозначим посредством $\langle F_1 \rangle$ среднее значение величины F в состоянии ψ , а посредством $\langle F_2 \rangle$ - среднее значение величины F в состоянии φ , т.е.

$$\langle F_1 \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle, \text{ а } \langle F_2 \rangle = \langle \varphi | \hat{F} | \varphi \rangle.$$

Рассмотрим функцию $\Psi = C(\psi + \lambda\varphi)$, где λ - произвольное комплексное число, C - константа, позволяющая нормировать функцию Ψ на 1. Среднее значение величины F в состоянии Ψ есть

$$\langle F \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = |C|^2 \left(\langle F_1 \rangle + |\lambda|^2 \langle F_2 \rangle + \lambda \langle \psi | \hat{F} | \varphi \rangle + \lambda^* \langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle \right). \quad (2.4)$$

Перейдем к комплексно-сопряженному выражению для $\langle F \rangle$, учитывая что $\langle F \rangle^* = \langle F \rangle$, и $\langle F_1 \rangle^* = \langle F_1 \rangle$, $\langle F_2 \rangle^* = \langle F_2 \rangle$:

$$\langle F \rangle = |C|^2 \left(\langle F_1 \rangle + |\lambda|^2 \langle F_2 \rangle + \lambda^* \langle \psi | \hat{F} | \varphi \rangle^* + \lambda \langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle^* \right).$$

Вычитая из данного равенства равенство (2.4), получаем:

$$0 = \lambda^* \left(\langle \psi | \hat{F} | \varphi \rangle^* - \langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle \right) + \lambda \left(\langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle^* - \langle \psi | \hat{F} | \varphi \rangle \right). \quad (2.5)$$

Поскольку равенство (2.5) должно выполняться при произвольных λ , то оба выражения в скобках должны по отдельности равняться нулю:

$$\langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \varphi \rangle^*,$$

и

$$\langle \psi | \hat{F} | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle^*.$$

Следовательно

$$\hat{F}^+ = \hat{F} \quad \blacklozenge$$

Задача 2.2. Найти связь между средними значениями координаты и импульса двух частиц, волновые функции которых Ψ_1 и Ψ_2 связаны соотношением

$$\Psi_2(x) = \Psi_1(x+a), \quad a = \text{const.}$$

Решение. Среднее значение координаты первой частицы

$$\langle x_1 \rangle = \langle \Psi_1 | \hat{x} | \Psi_1 \rangle \equiv \int \Psi_1^*(x) x \Psi_1(x) dx.$$

Учитывая полученное соотношение, найдем среднее значение координаты второй частицы:

$$\begin{aligned} \langle x_2 \rangle &= \langle \Psi_2 | \hat{x} | \Psi_2 \rangle \equiv \int \Psi_2^*(x) x \Psi_2(x) dx = \int \Psi_1^*(x+a) x \Psi_1(x+a) dx = \\ &= \int \Psi_1^*(x) (x-a) \Psi_1(x) dx = \langle x_1 \rangle - a. \end{aligned}$$

Для среднего значения импульса первой частицы имеем:

$$\langle p_1 \rangle = \langle \Psi_1 | \hat{p} | \Psi_1 \rangle \equiv -i\hbar \int \Psi_1^*(x) \frac{d}{dx} \Psi_1(x) dx.$$

Тогда среднее значение импульса второй частицы

$$\begin{aligned} \langle p_2 \rangle &= \langle \Psi_2 | \hat{p} | \Psi_2 \rangle \equiv -i\hbar \int \Psi_2^*(x) \frac{d}{dx} \Psi_2(x) dx = \\ &= -i\hbar \int \Psi_1^*(x+a) \frac{d}{dx} \Psi_1(x+a) dx = \\ &= -i\hbar \int \Psi_1^*(x) \frac{d}{dx} \Psi_1(x) dx \equiv \langle p_1 \rangle. \quad \blacklozenge \end{aligned}$$

Дисперсия физической величины F определяется формулой:

$$\langle (F)^2 \rangle = \langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle \equiv \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2.$$

Задача 2.3. Коммутатор операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ двух физических величин

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C},$$

где $\hat{C}$ - некоторый эрмитов оператор. Докажите, что

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{\langle C \rangle^2}{4}. \quad (2.6)$$

Решение. Введем операторы

$$\Delta A = \hat{A} - \langle A \rangle \text{ и } \Delta B = \hat{B} - \langle B \rangle,$$

где $\langle A \rangle$ и $\langle B \rangle$ – средние значения величин A и B в состоянии Ψ . Поскольку средние значения $\langle A \rangle$ и $\langle B \rangle$ вещественные, то операторы ΔA и ΔB – эрмитовы.

Путем прямого вычисления найдем, что коммутатор

$$[\Delta A, \Delta B] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C}. \quad (2.7)$$

Рассмотрим вспомогательный интеграл

$$I(\alpha) = \left\langle \left(\alpha \Delta A - i \Delta B \right) \Psi \left| \left(\alpha \Delta A - i \Delta B \right) \Psi \right\rangle \equiv \int \left| \left(\alpha \Delta A - i \Delta B \right) \Psi(q) \right|^2 dq \geq 0. \quad (2.8)$$

Раскроем скобки, стоящие под знаком интеграла (2.8) и учтем коммутационное соотношение (2.7):

$$\begin{aligned} \left(\alpha \Delta A + i \Delta B \right) \left(\alpha \Delta A - i \Delta B \right) &= \alpha^2 \left(\Delta A \right)^2 - i \alpha \left(\Delta A \Delta B - \Delta B \Delta A \right) + \\ &+ \left(\Delta B \right)^2 = \alpha^2 \left(\Delta A \right)^2 + \alpha \hat{C} + \left(\Delta B \right)^2. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Подставляя (2.9) в (2.8) и используя определение среднего значения (2.3), находим:

$$I(\alpha) = \alpha^2 \left\langle \left(\Delta A \right)^2 \right\rangle + \alpha \langle C \rangle + \left\langle \left(\Delta B \right)^2 \right\rangle \geq 0. \quad (2.10)$$

Неравенство (2.10) должно выполняться при произвольных значениях α .

Поскольку коэффициент при α^2 в (2.10) $\left\langle \left(\Delta A \right)^2 \right\rangle \geq 0$, то квадратный трехчлен

$$\alpha^2 \left\langle \left(\Delta A \right)^2 \right\rangle + \alpha \langle C \rangle + \left\langle \left(\Delta B \right)^2 \right\rangle$$

будет неотрицателен, если дискриминант соответствующего квадратного уравнения меньше, либо равен нулю, т.е.

$$\langle C \rangle^2 - 4 \left\langle \left(\Delta A \right)^2 \right\rangle \left\langle \left(\Delta B \right)^2 \right\rangle \leq 0,$$

откуда непосредственно следует неравенство (2.6). ♦

Часто в качестве характеристики разброса получаемых при измерении значений физической величины F относительно среднего берут среднеквадратичное отклонение

$$\Delta F = \sqrt{\left\langle \left(\Delta F \right)^2 \right\rangle}.$$

В данных обозначениях неравенство (2.6) примет вид:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{|\langle C \rangle|}{2}. \quad (2.11)$$

Неравенство (2.11) носит название *соотношения неопределенностей*.

Задача 2.4. Запишите соотношение неопределенностей для координаты x и проекции импульса p_x .

Решение. Коммутатор операторов $\hat{x}$ и $\hat{p}_x$ равен (см. задачу 1.6)

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar.$$

В соответствии с (2.11) имеем:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}. \blacklozenge$$

Задачи для самостоятельного решения

2.5. Доказать, что определённое соотношением (2.2) скалярное произведение обладает следующими свойствами:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle^* &= \langle \psi | \varphi \rangle, \\ \langle \varphi_1 + \varphi_2 | \psi \rangle &= \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \langle \varphi_2 | \psi \rangle, \\ \langle \varphi | \alpha \psi \rangle &= \alpha \langle \varphi | \psi \rangle, \\ \langle \alpha \varphi | \psi \rangle &= \alpha^* \langle \varphi | \psi \rangle, \end{aligned}$$

где α – произвольное комплексное число.

2.6. Показать, что функции φ и $\phi = \varphi e^{i\delta}$ описывают одно и то же физическое состояние.

2.7. Найти связь между средними значениями координаты и импульса двух частиц, волновые функции которых Ψ_1 и Ψ_2 связаны соотношениями:

$$\Psi_2(x) = \Psi_1(x) \exp\left(\frac{ip_0 x}{\hbar}\right), p_0 = \text{const.}$$

2.8. Доказать, что средние значения эрмитовых операторов $\hat{F}^+ \hat{F}$ и $\hat{F} \hat{F}^+$ в произвольном состоянии неотрицательны.

2.9. Доказать, что если в одном и том же состоянии среднее значение величины A равно $\langle A \rangle$, а среднее значение величины B равно $\langle B \rangle$, то среднее значение суммы

$$\langle A + B \rangle = \langle A \rangle + \langle B \rangle.$$

2.10. Используя соотношение неопределенностей, оценить а) нижнюю границу возможных значений энергии одномерного гармонического осциллятора; б) энергию (в эВ) основного состояния атома водорода.

2.11. Найти $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, $\langle (\Delta x)^2 \rangle$, $\langle (\Delta p)^2 \rangle$ и нормировочный множитель C для волновой функции $\Psi = C e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$ (a - вещественный параметр).

Ответы к задачам для самостоятельного решения

2.7. $\langle x_2 \rangle = \langle x_1 \rangle$, $\langle p_2 \rangle = \langle p_1 \rangle + p_0$.

2.10. а) $E \geq \frac{1}{2} \hbar \omega$; б) -13.6 эВ.

2.11. $C = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}$, $\langle x \rangle = 0$, $\langle p \rangle = 0$, $\langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{2}$, $\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2a^2}$, $\langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{a^2}{2}$,

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2a^2}.$$

Указание. Значения вычисляемых в задаче интегралов можно найти в приложении 2.