2.6. Волновая функция. Интерпретация и нормировка.

2.6.1. Интерпретация и свойства.

Итак, состояние квантовой системы может быть описано определенной, вообще говоря, комплексной функцией координат и времени $\psi(\vec{r},t)$, называемой *волновой функцией* системы.

Знание волновой функции позволяет в принципе вычислить вероятности различных результатов измерений физических величин, как измерения координат, импульса, энергии, так и вообще всякого измерения. Так как квадрат модуля волновой функции $|\psi(\vec{r},t)|^2$ пропорционален вероятности того, что система находится в окрестности координаты $\vec{r}$, тогда вероятности обнаружения всех физических величин, зависящих от координат, будут определяться выражениями, билинейными по ψ и ψ^*. Например, выражением

$$\iint \psi^*(\vec{r}\,')\psi(\vec{r})f(\vec{r},\vec{r}\,')d\vec{r}d\vec{r}\,' \qquad (2.6.1)$$

где $f(\vec{r},\vec{r}\,')$ – какая-то функция, зависящая от рода и результата измерения.

Волновая функция зависит от времени t, т.е. состояние системы с течением времени меняется. Если волновая функция известна в начальный момент t_0, то по смыслу полного описания состояния она определена и во все будущие времена t. Зависимость волновой функции от времени t определяется уравнением Шредингера.

Однако волновая функция – не физическое поле, а поле информации. Отсюда проистекает много особенностей квантовой механики. Чтобы приписать системе волновую функцию, над системой должен быть произведен максимально полный опыт. То есть необходимо создать состояние, в котором каждая из полного набора одновременно измеримых величин, определяющих поведение системы, имеет определенное значение. Если опыт не полон, теория позволяет сделать определенные предсказания.

В квантовой механике задавать “координаты и скорости” всех частиц, как это делается в классической механике, невозможно. Самое большое, что можно сделать – задать в начальный момент волновую функцию. *Волновая функция есть максимально полное допустимое описание состояния квантовой частицы или системы частиц*.

Итак, главное открытие квантовой механики – вероятностный характер законов микромира. Н. Бор писал: “Причина вероятностного описания предсказаний в том, что свойства микроскопических объектов нельзя изучать, отвлекаясь от способа наблюдения”.

Конечно, существуют свойства, независящие от способа наблюдения: масса, заряд, спин, магнитный момент и другие. Но всякий раз, когда одновременно измеряются дополнительные друг другу величины, результаты будут зависеть от способа наблюдения. Это свойство В.А Фок назвал “относительностью к средствам наблюдения”.

Рассмотрим, какие свойства и требования предъявляются к волновой функции $\psi(\vec{r},t)$. Учтем при этом, что волновая функция $\psi(\vec{r},t)$ – величина комплексная. Итак:

1). $\psi(\vec{r},t)$ – непрерывная функция.

2). производная $\psi'(\vec{r},t)$ – непрерывная функция.

3). $\psi(\vec{r},t)$ – ограниченная функция.

4). $\psi(\vec{r},t)$ – нормирована: $\int |\psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1$. (2.6.2)

Плотность вероятности определяется:

$$\frac{dW}{dV} = |\psi(\vec{r},t)|^2 .$$

Вероятность обнаружить частицу в элементе объема dV равна:

$$dW = |\psi(\vec{r},t)|^2 dV . \qquad (2.6.3)$$

Для связанных состояний, полная энергия которого меньше 0, что соответствует финитному движению по классической механике, нормировочный интеграл всегда сходится, и функция нормируется на единицу. Для несвязанных состояний интеграл часто расходится

$$\int |\psi(\vec{r},t)|^2 dV \to \infty ,$$

и волновые функции нельзя нормировать в обычном смысле. Пример: волновая функция свободной частицы, для нее имеем:

$$\int |\psi(\vec{r},t)|^2 d^3\vec{r} = \int \left| A\,exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\vec{r})\right\}\right|^2 dV = A^2\int dV \to \infty$$

Такие функции нормируют на *специальную функцию* – δ*-функцию*.

2.6.2. Плотность тока вероятности.

Если волновая функция нормирована, то нормировка не меняется во времени:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_V |\psi(\vec{r},t)|^2 dV\right) = 0 \qquad (2.6.4)$$

Покажем это, рассмотрев производную подробнее:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)dV = \int_V\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)dV = N \qquad (2.6.5)$$

Пусть волновые функции подчиняются уравнению Шредингера с гамильтонианом $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})$:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi; \quad -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \hat{H}\psi^* \qquad (2.6.6)$$

Выражая отсюда производные, подставим их в (2.6.5):

$$N = \int_V\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi^*\cdot\psi - \psi^*\cdot\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi\right)dV = \frac{i}{\hbar}\int_V\left(\psi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^*\right)-\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi\right)\right)dV =$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_V(\psi\Delta\psi^* - \psi^*\Delta\psi)dV = -\frac{i\hbar}{2m}\int_V div(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)dV = -\int_V div\vec{j}dV \qquad (2.6.7)$$

Здесь введена *плотность потока вероятности*:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) \qquad (2.6.8)$$

Далее по теореме Остроградского-Гаусса получаем:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V |\psi|^2 dV = -\int_V div\vec{j}dV = -\oint_S \vec{j}d\vec{S}$$

Получаем, что изменение вероятности нахождения частицы (системы) в объеме V равна потоку вероятности через ограничивающую объем поверхность.

Рассмотрим случай бесконечного объема $V\to\infty$. Если волновая функция ограничена в пространстве (т.е. движение частицы ограничено), т.е. $\psi\to 0$ при $|\vec{r}|\to\infty$, то, очевидно, что поток через замкнутую поверхность равен 0:

$$\oint_{S\to\infty}\vec{j}d\vec{S} \Rightarrow 0.$$

Таким образом, получаем:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int|\psi(\vec{r},t)|^2 dV = 0 \qquad (2.6.9)$$

и нормировочный интеграл не меняется во времени.

С другой стороны, поскольку объем V произвольный, получаем *уравнение неразрывности*:

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + div\vec{j} = 0 \qquad \text{или} \qquad \frac{\partial w}{\partial t} + div\vec{j} = 0 \qquad (2.6.10)$$

Уравнение неразрывности определяет закон сохранения числа частиц в системе или, если рассматривать одну частицу, закон сохранения вероятности $w(\vec{r},t)$. Изменение плотности вероятности нахождения частицы в системе $\partial w/\partial t$ определяется плотностью тока вероятности $\vec{j}(\vec{r},t)$ через поверхность, ограничивающую эту систему.

Примечание 1. Волновая функция свободного движения, т.е. плоская волна, может быть нормирована так, чтобы она описывала поток частиц с плотностью потока вероятности, равной единице: поток, в котором через единицу площади ее поперечного сечения, проходят в среднем по одной частице в 1 времени. При этом получаем: $\psi = \sqrt{m/p}\, e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\vec{r})}$. Действительно, сосчитав плотность тока вероятности (2.6.8), получим $\left|\vec{j}\right| = 1$.

2.6.3. Еще раз об интерпретации волновой функции.

В 20-30х годах разгорелся научный спор Н. Бора и А. Эйнштейна о вероятностной интерпретации волновой функции и соотношении неопределенностей.

Н. Бор и А. Эйнштейн встретились впервые в 1920г. в Берлине. Наиболее сильно научный спор разгорелся на V Сольвеевском конгрессе в 1927 году. Эйнштейн предлагал Бору каждое утро очередное доказательство нарушения соотношения неопределенностей в придуманном им опыте, а Бор вечером показывал, что при более тщательном рассмотрении соотношение неопределенностей подтверждается. Эйнштейн не смог найти слабого места в логике квантовой механики, однако, по его убеждению, эта точка зрения не может быть окончательным решением: “...Господь Бог не играет в кости...”.

Однако в 1935 году дискуссия разгорелась с новой силой, т.к. появилась работа Эйнштейна, Розена и Подольского “Может ли квантово - механическое описание физической реальности считаться полным?”.

Допустим, что 2 подсистемы взаимодействовали друг с другом, а потом разошлись на большое расстояние. Поскольку эти системы уже не взаимодействуют, то в результате каких бы то ни было операций на 1-ой системе, во второй уже не может получиться никаких реальных изменений. Между тем, согласно квантовой механике, с помощью измерений в первой системе можно изменить волновую функцию второй системы.

Рассмотрим следующий пример. Допустим, знаем импульсы двух частиц до столкновения, и пусть после столкновения одна частица летит к Земле, а другая летит на Луну. До того, как произведем измерение над одной из частиц, мы не знаем точную волновую функцию частиц, она будет суперпозицией возможных различных состояний. Если земной наблюдатель произведет измерение и получит определенное значение импульса частицы на Земле, он по закону сохранения импульса может рассчитать импульс частицы на Луне. Следовательно, волновая функция этой частицы в результате измерения на Земле определится однозначным образом – она будет также соответствовать определенному импульсу.

Если понимать волновую функцию как физическое поле, то получаем совершенную бессмыслицу: результат измерения на Земле влияет на результат измерения на Луне. Если же учесть, что волновая функция – это волна информации, то результат естественен. Это есть обычное изменение вероятности предсказания с появлением новой информации. Таким образом, ставится вопрос: какова вероятность, что лунный экспериментатор найдет то или иное значение импульса при дополнительном условии, что на Земле найден импульс другой частицы? Это означает, что нужно взять весь набор многократных измерений импульса в обеих лабораториях и отобрать из этого набора те случаи, когда на Земле получится заданный импульс. При этом условии лунные измерения будут давать определенный и известный импульс согласно закону сохранения импульса.

Влияние измерений в одной подсистеме на предсказания о поведении другой подсистемы нужно понимать именно в смысле отбора случаев, соответствующих определенному условию.

Две подсистемы, находящиеся на больших расстояниях, физически никак не связаны, независимы, но условная вероятность, конечно, зависит от того, какое состояние одной из подсистем мы выбираем. Предсказание скачком изменяется при изменении условий отбора событий.

Нужно ли искать другую интерпретацию квантовой механики?

Примечание 2. *Владимир Александрович Фок, советский физик-теоретик, 1898–1974, работал в Ленинградском университете, ФТИ, ГОИ;*

Борис Подольский, американский физик-теоретик, 1896–1966.

Дополнительная литература к этому параграфу: А.Б.Мигдал “Квантовая физика для больших и маленьких”. Библиотека “Квант”.