## 2.1. Волновые пакеты

В основе квантовой механики лежит соотношение де Бройля $p = h/\lambda$. Однако импульс принято выражать не через длину волны $\lambda$, а через волновое число $\boldsymbol{k \equiv 2\pi/\lambda}$:

$$p = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} k$$

Величина $h/(2\pi)$ встречается столь часто, что для нее введено специальное обозначение $\hbar$ («аш» перечеркнутое):

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$$

$\boldsymbol{p = \hbar k}$ – **соотношение де Бройля**.

Рассмотрим движущуюся вдоль оси $x$ частицу, длина волны которой в точности равна $\lambda_0$. Волновое число частицы $k_0 = 2\pi/\lambda_0$.

В качестве волновой функции следует взять $\psi = Ae^{i(k_0 x - \omega t)}$

Сама $\psi$ представляет собой волну, распространяющуюся в положительном направлении оси $x$. Распределение вероятностей обнаружить частицу

$$|\psi|^2 = \psi^*\psi = \left(Ae^{-i(k_0x-\omega t)}\right)\left(Ae^{+i(k_0x-\omega t)}\right) = A^2$$

не зависит от $x$ и $t$ – частица может быть обнаружена с равной вероятностью в любой точке на оси $x$ (учтено, что $e^{ia}\cdot e^{-ia} = 1$). Использование комплексной волновой функции дает равномерное распределение вероятностей по оси $x$. Из формулы Эйлера

$$e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$$

следует, что мнимая и действительная части функции $\psi$ являются монохроматическими волнами:

$$\mathrm{Re}\,(\psi) = A\cos(k_0x - \omega t)$$

$$\mathrm{Im}\,(\psi) = A\sin(k_0x - \omega t).$$

Таким образом, если импульс частицы имеет определенное значение, то она с равной вероятностью может находиться в любой точке пространства. Иначе говоря, если импульс частицы точно известен, то мы ничего не знаем о ее местонахождении.

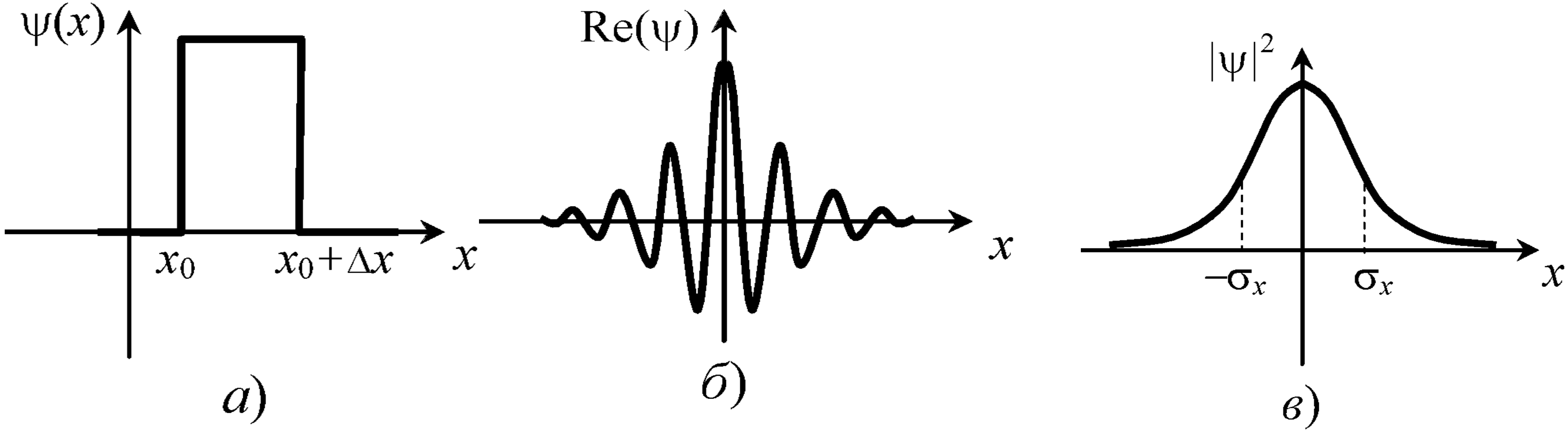
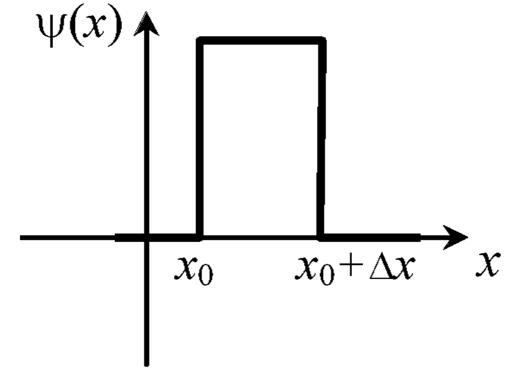



Рис. 2.1. Волновая функция частицы, определенной на интервале $\Delta x$ (*а*). Волновой пакет в виде распределения Гаусса: *б* – зависимость действительной части волновой функции от $x$; *в* – зависимость квадрата модуля волновой функции или плотности вероятности от $x$

Однако в большинстве физических ситуаций бывает известно, что частица находится в определенной области пространства.




a)

Выясним теперь, какие волны следует сопоставлять частицам, наблюдаемым в обычных, классически поставленных опытах. Классические опыты всегда начинаются с того, что мы определяем положение частицы в некоторый момент времени $t = 0$. Пусть измерение координаты проделано с точностью $\Delta x$, т.е. мы однозначно определили, что частица находится между $x_0$ и $x_0 + \Delta x$. С точки зрения волновой (квантовой) теории это означает, что волновая функция частицы равна нулю во всем пространстве, кроме участка, заключенного между $x_0$ и $x_0 + \Delta x$, рис. 2.1,а. Ясно, что такая функция не является одной монохроматической волной де Бройля типа

$$\psi\left(x\right) = Ae^{i(k_0 x - \omega t)}$$

Поскольку мы исследуем сейчас волновую функцию частиц в момент времени $t = 0$ зависимость волн де Бройля от времени является пока несущественной. Запишем отдельную волну в виде

$$\psi(x) = Be^{ik_0 x}, \text{ где } B = Ae^{-i\omega t}.$$

Изображенная на рисунке 2.1,а ψ-функция может быть представлена по теореме Фурье в виде бесконечной совокупности таких волн в виде интеграла Фурье

$$\psi(x) = \int B(k) e^{ikx} dk$$

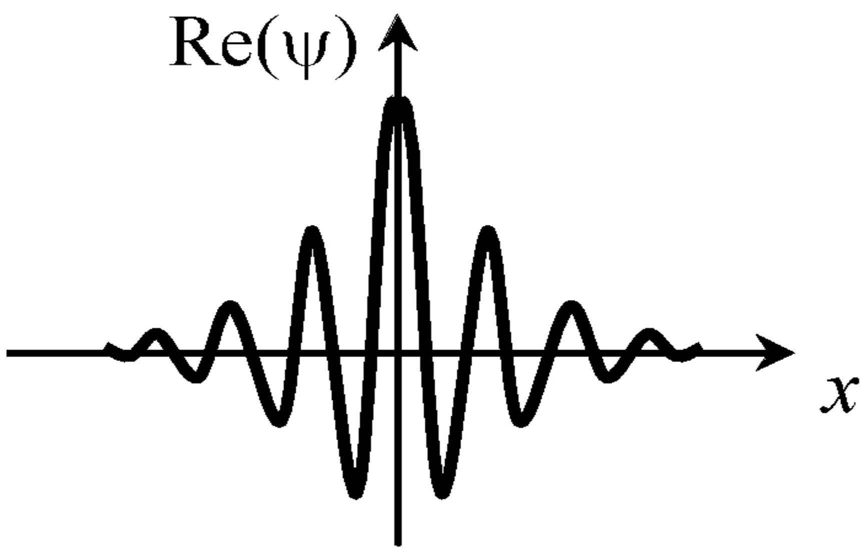
Таким образом, состояние частицы в начальный момент времени определяется, наложением большого числа монохроматических волн, каждая из которых движется со своей скоростью (импульсом).

Такое **наложение волн, имеющее один резко выраженный максимум**, называется обычно **волновым пакетом**. Во всякий другой момент времени положение частицы описывается, грубо говоря, местоположением максимума ψ-функции. Рассмотрим волновую функцию вида:

$$\psi(x,0) = A\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right)\cdot\exp(ik_0x)$$

в момент времени $t = 0$.

На рис. 2.1,б приведена действительная часть этой волновой функции,



б)

а на рис. 2.1,*в* показано соответствующее распределение вероятностей:

$$|\psi|^2 = A^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right)$$

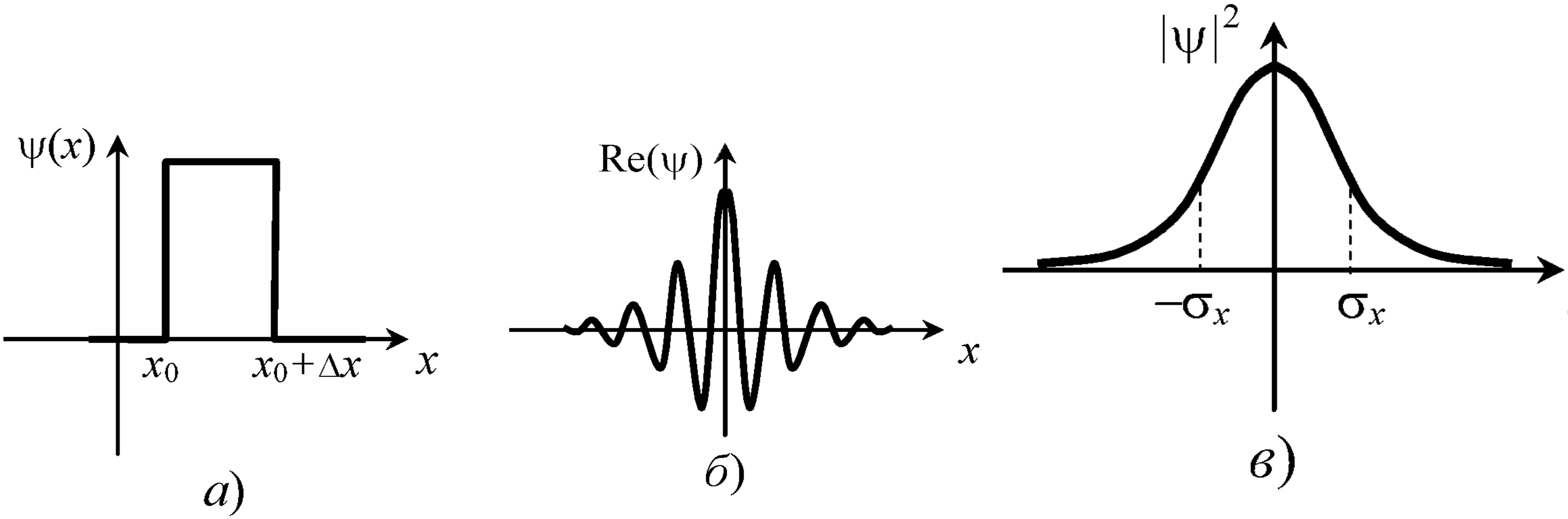



Рис. 2.1. Волновая функция частицы, определенной на интервале $\Delta x$ (*а*). Волновой пакет в виде распределения Гаусса: *б* – зависимость действительной части волновой функции от $x$; *в* – зависимость квадрата модуля волновой функции или плотности вероятности от $x$

Более чем в 50% случаев частицу можно обнаружить в интервале от $x = -\sigma_x$ до $x = +\sigma_x$. Функция $\exp(-x^2/2\sigma_x{}^2)$ – это известное распределение Гаусса; здесь $\sigma_x$ – среднеквадратичное отклонение, которое назовем неопределенностью величины $x$ и обозначим $\Delta x$. Локализованная волна называется волновым пакетом. Изображенная на рис. 2.1,*б* волна естественно не является чисто монохроматической. Волновой пакет можно представить в виде суммы (суперпозиции) плоских монохроматических волн с близкими значениями частот (ω) и волновых векторов ($k$).

Для иллюстрации рассмотрим волновой пакет в момент времени $t = 0$ и подберем подходящую суперпозицию монохроматических, волн типа $\exp(ikx)$. Для этого требуется найти коэффициенты $B_n$ в выражении

$$\psi = \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right)\exp\left(ik_0x\right) = \sum_{n=0}^{n=\infty} B_n \exp\left(ik_nx\right)$$

В сумме содержится бесконечное число слагаемых – монохроматических волн, и мы перейдем от суммирования к интегрированию:

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right)\exp(ik_0 x) = \int B(k)\exp(ikx)\,dk$$

Используя тождество

$$\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right)\exp(ik_0 x) \equiv \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}}\int \exp[-\sigma_x^2(k-k_0)^2]\exp(ikx)\,dk$$

получаем $B(k) = \dfrac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}}\exp[-\sigma_x^2(k-k_0)^2]$

Заменив $k$ на $p/\hbar$, найдем коэффициент $B$ в импульсном представлении

$$B(p) = \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{(\hbar/\sigma_x)^2}\right]$$

## 2.2. Соотношение неопределенностей

На рис. 2.2 изображены распределения по импульсам для случая двух волновых пакетов различной ширины. Отметим, что чем у́же волновой пакет, тем шире распределение по импульсам. Вероятность найти частицу в состоянии с волновой функцией $B(k)\cdot\exp(ikx)$ пропорциональна квадрату ее амплитуды, вероятность различных значений импульса определяется функцией

$$|B(p)|^2 = \frac{\sigma_x^2}{\pi}\exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{2(\hbar/2\sigma_x)^2}\right]$$

Распределение $|B(p)|^2$ является Гауссовым для $p$, и его можно переписать в виде

$$|B(p)|^2 = \frac{\sigma_x^2}{\pi}\exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{2\sigma_p^2}\right]$$

Здесь $\sigma_p$ – среднеквадратичное отклонение или «неопределенность» величины $p$. Из двух последних соотношений следует

$$\sigma_\mathrm{p} = \hbar/2\sigma_x,\ \sigma_\mathrm{p}\sigma_x = \hbar/2,$$

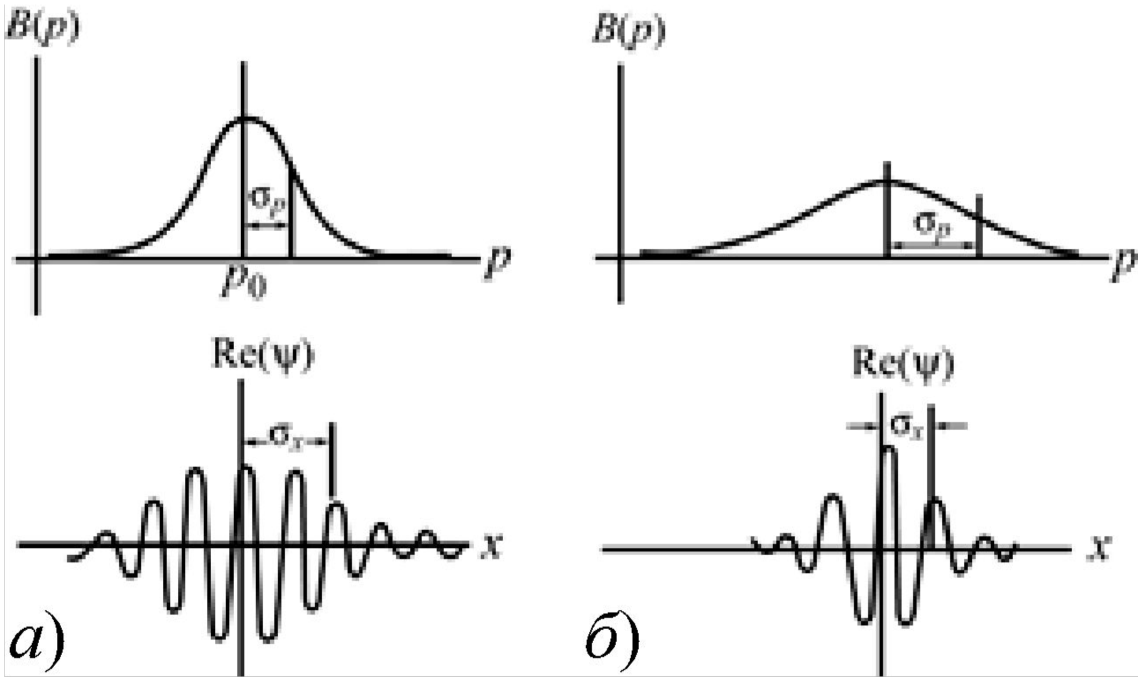



Рис. 2.2. Функция распределения $B(p)$ по импульсам (наверху) и соответствующий ей волновой пакет (внизу). Ширина волнового пакета (*а*) вдвое превышает его ширину (*б*). В обоих случаях заметим, что произведение $\sigma_x\sigma_p$ одно и то же

Таким образом, в случае волновой функции в виде распределения Гаусса **произведение ширины волнового пакета на ширину функции распределения по импульсам равно $\hbar/2$**. В других случаях **это произведение может быть больше $\hbar/2$**, **!!!но оно никогда не будет меньше $\hbar$ /2!!!**. В общем случае

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2$$

– соотношение неопределенностей Гейзенберга[*)]. **Заметим**, что при этом **ограничение накладывается не порознь на $\Delta x$ или на $\Delta p_x$**, а лишь **на их произведение** – $\Delta x \cdot \Delta p_x$.

Соотношение или принцип неопределенностей утверждает, что если частица локализована в пространстве со среднеквадратичным отклонением $\Delta x$, то ее импульс не имеет определенного значения, а характеризуется распределением $|B(p)|$ с «шириной» $\Delta p$. **Физически это означает, что невозможно одновременно точно определить значения координаты и импульса частицы.**

В качестве примера рассмотрим волновой пакет с распределением <u>по импульсам в виде прямоугольника, показанного на рис. 2.3,а:</u>

[*)] Как будет показано ниже, соотношение $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2$, полученное для гауссова распределения, может быть записано в форме: $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$ или $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$. Последняя форма записи используется в квантовых статистиках, например, Ферми-Дирака или Бозе-Эйнштейна.

$$B(k) = \begin{cases} 0 \text{ при } (k_0 - a) > k > (k_0 + a), \\ A \text{ при } (k_0 - a) < k < (k_0 + a). \end{cases}$$

Найдем $\psi(x)$ и произведение $\Delta x \Delta p_x$ ($\Delta x$ – полуширина распределения вероятностей координаты, измеренная на уровне половины максимального значения, и $\Delta p$ – то же самое для импульса).

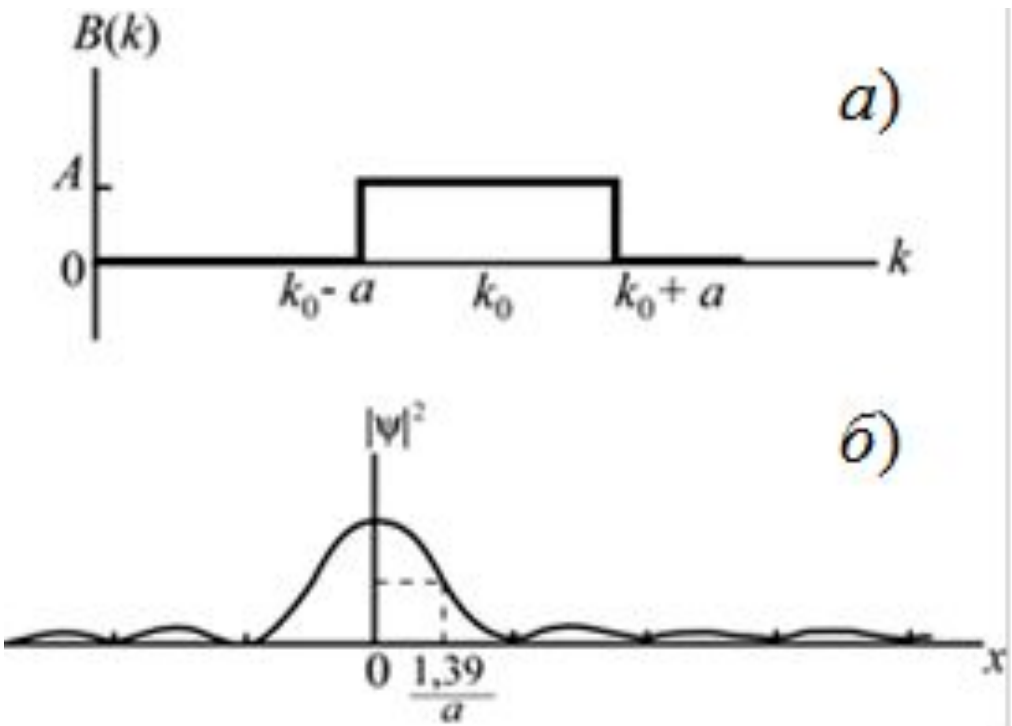



Рис. 2.3. Прямоугольное распределение по импульсам (а); б – распределение по координатам, или волновой пакет, соответствующий распределению на (а)

Для этого используем формулу $\psi = \int A(k)\exp(ikx)dk;$ находим

$$\psi(x) = A\int_{k_0-a}^{k_0+a} e^{ikx}dk = \frac{1}{ix}Ae^{ikx}\Big|_{k_0-a}^{k_0+a} = \frac{A}{ix}\left[e^{ix(k_0+a)} - e^{ix(k_0-a)}\right] = 2A\frac{\sin ax}{x}e^{ik_0x}$$

$$|\psi|^2 = 4A^2\frac{\sin^2 ax}{x^2}$$

Эта функция уменьшается вдвое при $ax = 1{,}39$. Следовательно

$$a\Delta x = 1{,}39.$$

Поскольку $a = \Delta k = \Delta p_x/\hbar$, то $(\Delta p_x/\hbar)\Delta x = 1{,}39$.

Таким образом, $\Delta x{\cdot}\Delta p_x = 1{,}39\hbar$, т.е.

$$\Delta x{\cdot}\Delta p_x \geq \hbar$$

Если известно, что частица покоится, то неопределенность её импульса $\Delta p = 0$. Можно попытаться с помощью микроскопа определить положение частицы и тем самым обойти принцип неопределенности. Микроскоп позволит определить положение частицы с точностью до длины волны используемого света, $\Delta x \approx \lambda$ . Но поскольку $\Delta p = 0$, то произведение $\Delta \cdot \Delta \mathrm{p}_x$ также должно быть равно нулю, и принцип неопределенности, казалось бы, нарушится. Но это не так. Мы пользуемся светом, а свет состоит из фотонов с импульсом $p = \mathrm{h}/\lambda$. Чтобы обнаружить частицу, на ней должен рассеяться или поглотиться по крайней мере один из фотонов пучка света (рис. 2.4), и частице будет передан импульс, достигающий $\mathrm{h}/\lambda$. Таким образом, в момент наблюдения положения частицы с точностью $\Delta x \approx \lambda$ неопределенность ее импульса $\Delta p_x \geq \mathrm{h}/\lambda$. Перемножая неопределенности $\Delta p_x$ и $\Delta x$, находим

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \lambda \frac{h}{\lambda} = h$$

что согласуется с соотношением неопределенностей. Этот пример иллюстрирует внутреннюю непротиворечивость квантовой механики.

Двойственная корпускулярно-волновая природа микрочастиц накладывает ограничения на точность определения физических величин, характеризующих состояние частицы. Причем эти ограничения никак не связаны с точностью измерений, достижимой в конкретном эксперименте, а имеют принципиальное значение.


Рис. 2.4. Взаимодействие в микроскопе фотонов с частицей приводит к неопределенности ее импульса в момент наблюдения на $\Delta p \geq h/\lambda$

Соотношения неопределенностей – фундаментальные соотношения квантовой механики, устанавливающие предел точности одновременного определения канонически сопряженных динамических переменных, характеризующих квантовую систему: координата – импульс, действие – угол и т.д. Математически соотношения неопределенностей имеют вид неравенства, например:

$$\Delta x \cdot p_x \geq \hbar/2$$

где $\Delta x$ и $\Delta p_x$ – неопределенности значений координаты $x$ и сопряжённой ей компоненты $p_x$ импульса $p$ (аналогичные соотношения справедливы и для пар других компонент координаты и импульса: $y$, $p_y$; $z$, $p_z$). Соотношения неопределенностей были установлены В. Гейзенбергом (W. Heisenberg) в 1927 г.