ОБ ЭНЕРГИИ В ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКЕ [1]

Л.И. Мандельштам

Обычные изложения вопросов, относящихся к самому понятию энергии в квантовой механике, к "соотношению неопределенности" между энергией и временем, и, наконец, изложения закона сохранения энергии не могут считаться удовлетворительными.

Не только у разных авторов, но иногда у одного и того же автора можно найти существенно различные, часто исключающие друг друга утверждения, не говоря уже о том, что эти утверждения иногда носят расплывчатый характер.

Наконец, положения, которыми пользуются при трактовке тех или иных конкретных случаев (например, применение закона сохранения энергии при упругих соударениях) не связываются с достаточной последовательностью с основным формализмом квантовой механики и вытекающими из него общими положениями, а фигурируют как некоторые самостоятельные положения.

Этим отсутствием последовательности и цельности может быть, по-видимому, объяснен тот, на первый взгляд странный и во всяком случае требующий объяснения факт, что, исходя из противоположных общих положений, различные авторы приходят в конкретных случаях к одинаковым результатам.

Основными вопросами можно, по-видимому, считать три следующих:

1) Вопрос о самом понятии энергии.

2) Смысл отношения неопределенности $\Delta E \cdot \Delta \mathbf{t} \geq \mathbf{h}$.

3) Содержание (и условия применимости) закона сохранения энергии.

Я приведу несколько цитат, чтобы показать, что в этих вопросах разногласие во взглядах весьма велико.

Д. Ландау и Р. Пайерлс [2]: "Это соотношение [имеется в виду $\Delta E \cdot \Delta \mathbf{t} \geq \mathbf{h}$] очевидно *не* означает, что энергия в некоторый определенный момент времени не может быть точно известна (иначе понятие энергии вообще не имело бы никакого смысла); оно также *не* означает, что энергия не может быть с любой точностью измерена в пределах короткого промежутка времени…"

Смысл соотношения $\Delta E \cdot \Delta \mathbf{t} \geq \mathbf{h}$ Ландау и Пайерлс видят в следующем. Пусть E и E' – энергия измеряемой системы, ε и ε' энергия аппарата до и после взаимодействия. Тогда "практически по истечении времени Δt играют роль только такие переходы, для которых

$$\left|E + \varepsilon - E' - \varepsilon'\right| \sim \frac{\mathbf{h}}{\Delta \mathbf{t}}. \qquad (1)$$

Разумеется, этот факт никоим образом не противоречит строгой справедливости закона сохранения энергии в волновой механике, но энергия взаимодействия между системой и аппаратом является в известной мере неопределенной".

Я не буду сейчас комментировать эти высказывания. Замечу только, что, во-первых, не ясно, почему, если бы энергия не могла быть точно известна в данный момент, то это лишало бы понятие энергии смысла. Ведь понятие "частоты" не лишено смысла. И, во-вторых, последнее высказывание о том, что "разумеется, этот факт никоим образом не противоречит…", по существу лишено содержания. Приблизительно с таким же правом можно, например, утверждать, что имеет смысл говорить о точном значении импульса в заданной точке, но только он не определен с неопределенностью $\Delta \rho \geq \frac{\mathbf{h}}{\Delta \mathbf{q}}$. По существу, оба утверждения лишены содержания.

Де Бройль [3], комментируя работу Ландау и Пайерлса, высказывается по этому вопросу осторожнее: "Предыдущее соотношение [имеется в виду (1)] можно также интерпретировать, сказав, что энергия связи между системами I и II неопределенна; при такой интерпретации в волновой механике остается в си

По поводу вопроса об измерении энергии в короткий промежуток времени де Бройль в этой же работе, комментирующей Ландау и Пайерлса, пишет:

"Согласно Бору, при измерении энергии E неопределенность не может быть сделана меньше значения ΔE, если время Δt, в течение которого производится измерение, таково, что $\Delta\mathbf{t} \geq \frac{\mathbf{h}}{\Delta E}$. Действительно, когда рассматривается волновой цуг, всегда для определения частоты ν требуется определенное время. Для того чтобы иметь возможность утверждать, что волна немонохроматична не более чем на $\Delta\nu$, необходимо такое время наблюдения Δt, что $\Delta\mathbf{t} \geq \frac{\mathbf{1}}{\Delta\nu}$, или $\Delta\mathbf{t} \geq \frac{\mathbf{h}}{\Delta E}$ (так как $\Delta E = \mathbf{h}\Delta\nu$)".

Но в своей книге де Бройль [4], рассматривая общий случай системы, где H зависит от времени, пишет: "…если в данный момент времени τ сделан опыт для того, чтобы определить энергию системы, то для энергии можно найти одно из значений…" и т.д.

Крамерс [5] пишет: "Если мы принимаем основное квантово-теоретическое воззрение, что возможность определения энергии какой-либо системы всегда связана, в соответствии с $E = \mathbf{h}\nu$, с возможностью определения частоты некоторого волнового явления…" и далее: "значение энергии может поэтому получаться лишь с неточностью $\Delta E = \mathbf{h}\Delta\nu = \frac{\mathbf{h}}{\Delta\mathbf{t}}$". Затем опять: "Физический смысл этого соотношения заключается в том, что, если при толковании какого-нибудь явления системе в момент t приписывается энергия E, то произведение неточностей значений t и E имеет по меньшей мере порядок величины h".

Мало убедительно то, что говорит по этому вопросу Борн [6]: "Строго говоря, в квантовой механике время также является тензорным оператором в гильбертовом пространстве, как и все остальные физические величины, и сопряжено с энергией $H = E$. Поэтому существует ограничение для одновременного измерения энергии и времени: $\Delta E \cdot \Delta\mathbf{t} \geq \mathbf{h}$. Определение стационарного состояния (с точной энергией) необходимо требует бесконечного времени, таким образом не имеет никакого точного смысла говорить о таких состояниях системы в определенный момент времени. Но в качестве приближения часто бывает удобно абстрагироваться от этой связи между энергией и временем. Тогда можно пользоваться временем t как параметром".

Паули [7]: "Мы заключаем, таким образом, что принципиально необходимо отказаться от введения оператора для t и что время в волновой механике с необходимостью должно рассматриваться как обыкновенное число ("c – число")".

Вайль [8]: "Если состояние описывается в его зависимости от времени суперпозицией простых колебаний

$$\psi(\mathbf{t}) = \alpha_1 \mathbf{e}^{\mathrm{i}\nu_1 \mathrm{t}} + \alpha_2 \mathbf{e}^{\mathrm{i}\nu_2 \mathrm{t}} + \mathbf{...},$$

то квант энергии может принимать только значения $h\nu_1$, $h\nu_2$, …, а интенсивность $\alpha_2\alpha_2{}^* = |\alpha_2|^2$, с которой колебание частоты ν_2 входит в ψ, мы должны считать относительной вероятностью того, что квант энергии равен $h\nu_2$. Тем самым соотношение $E = h\nu$ интерпретируется так: если ν неопределенна, так как в колебательном явлении содержится целый спектр значений ν, то в той же мере неопределенна и энергия; интенсивности, с которыми различные простые колебания входят в колебательное явление, дают вероятности соответствующих квантов энергии. Оператор $-\frac{\mathbf{h}}{\mathbf{i}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{t}}$ представляет энергию $\left(\mathbf{H} \to -\frac{\mathbf{h}}{\mathbf{i}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{t}}\right)$ в следующем смысле: каждая его собственная функция описывает состояние, в котором энергия с достоверностью принимает определенное значение E; это – соответствующее собственное значение. В произвольном состоянии ψ компоненты a разложения функции ψ по собственным функциям определяют относительные вероятности aa^* соответствующих значений E". Но aa^* ведь зависит от x, так что, по Вайлю, получается, что энергия *системы в каждой точке пространства различна*.

Все приведенные высказывания относятся приблизительно к одному и тому же времени (1930-1933). Новые изложения (например, Зоммерфельда) не внесли, на мой взгляд, ясности.

Что касается закона сохранения энергии в квантовой механике, то большей частью его вообще не формулируют в общем виде. Пользуются им в частных случаях в полу-, или, вернее, в совсем классической форме, как, например, при рассмотрении соударений, но, как указано выше, скорее интуитивно, без обоснования квантово-механическим формализмом.

Четкая формулировка общего закона сохранения есть у Паули [9]: "Вероятность того, чтобы получить у замкнутой системы некоторое определенное значение энергии E_n, не зависит от времени. Это наиболее общее выражение закона сохранения энергии".

Но переход от этого общего положения к тому, как законом сохранения действительно пользуются, остается открытым. {Мне кажется, что в квантовой механике как раз этот вопрос не совсем тривиален и требует уточнения.}

Может быть, целесообразно подойти к систематизации вопроса об энергии следующим образом. Мы постулируем: каждой системе сопоставляется специфичный для нее гамильтонов оператор, которым она характеризуется. Сначала мы примем, что H не зависит от времени t (t всегда параметр). Гамильтонов оператор называется оператором энергии. Его собственные значение суть возможные значения энергии. Для простоты будем пока рассматривать одну степень свободы. Данное определение не связывает энергию с частотой. Оно не связано с уравнением Шрёдингера, подобно тому как не связаны с уравнением Шрёдингера ни p и q, ни любая другая физическая величина.

Для придания понятию энергии физического смысла должен быть дан рецепт измерения H. Постулируется дальше, что есть смысл говорить об энергии в данный момент. Тогда должен существовать и рецепт, позволяющий измерять энергию в как угодно короткий промежуток времени.

Если ввести оператор K кинетической энергии

$$K = -\frac{\mathbf{h}^2}{\mathbf{2m}}\frac{\partial^2}{\partial \chi^2}$$

и потенциальной

$$V = V(x),$$

то $H = K + V$. Но, конечно, ввиду некоммутативности K и V {для измерения значений каждой из этих трех величин K, V и H должен быть дан свой собственный рецепт}.

В противоположность этому в классике нет речи о *специальном* рецепте для измерения полной энергии {так как, измеряя кинетическую и потенциальную энергию, мы тем самым измеряем и полную}.

По-видимому, нельзя без противоречий и непоследовательности отказаться от положения, что энергия *определена* в данный момент и вот почему. Во-первых, в частном случае свободной частицы $H = ap^2$. Импульс же "в данный момент" – содержательное понятие.

Во-вторых, три числа $\overline{\mathbf{K}}, \overline{\mathbf{V}}$ и $\overline{\mathbf{H}}$ [10] находятся в соотношении $\overline{\mathbf{K}} + \overline{\mathbf{V}} = \overline{\mathbf{H}}$; но $\overline{\mathbf{K}}$ и $\overline{\mathbf{V}}$ наверно определяемы в данный момент. Было бы мало *последовательным* предположить, что понятие полной энергии в данный момент не имеет смысла, понятие же средней полной энергии в данный момент существует. Между прочим, соотношение $\overline{\mathbf{K}} + \overline{\mathbf{V}} = \overline{\mathbf{H}}$ показывает, что между тремя рецептами для измерения **K**, **V**, и **H** существует связь, которая выражается именно в том, что, измеряя $\overline{\mathbf{K}}$ своим рецептом, $\overline{\mathbf{V}}$ своим и $\overline{\mathbf{H}}$ своим, мы должны иметь $\overline{\mathbf{K}} + \overline{\mathbf{V}} = \overline{\mathbf{H}}$.

Понятие измерения в данный момент нужно понимать так. Пусть у нас, например, волновая функция $\psi\ (x,\ t)$. Чтобы имела смысл статистика должна быть повторяемость. То есть я повторяю опыт, причем t в каждом из опытов – это время от "начала" опыта. Измерение "в данный момент" – это измерение в различных опытах но каждый раз для одинаковых времен от *начала опыта*. Я могу, например, измерить в "данный момент" $t = t_1$, q и в "тот же момент измерить p. Соотношение неопределенности $\Delta p \cdot \Delta q \geq h$ говорит только, что, повторяя много раз измерения в "тот же момент", я найду $\Delta p \cdot \Delta q \geq h$.

Если у нас есть какое-нибудь состояние $\psi = (x,\ t)$, то в согласии с общим положением квантовой механики, мы и здесь принимаем, что в разложении

$$\psi\ (x,\ t) = \sum_{n} c_n\ (t)\ \psi_n\ (x), \qquad (1)$$

где $\psi_n(x)$ – собственные функции H, $c_n\, c_n{}^*$ есть вероятность нахождения системы в состоянии с энергией E_n, или точнее, вероятность нахождения в данный момент для энергии значения E_n.

О каком-либо соотношении неопределенности между E и t при данном выше определении энергии, по-видимому, нельзя говорить без привлечения уравнения движения, в противоположность соотношению неопределенности между p и q, которое от уравнения движения не зависит. Замечу, что *t не* оператор, а параметр.

Исходим теперь из уравнения Шрёдингера в качестве уравнения движения. Тогда

$$\psi(\chi, \mathbf{t}) = \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{c}_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\chi) \mathbf{e}^{\mathbf{i}\frac{E_{\mathbf{n}}\mathbf{t}}{\mathbf{h}}} \qquad (2)$$

(c_n не зависят для замкнутой системы от времени).

При наличии только одного члена в разложении (2), т.е. при стационарном состоянии, вероятность любой физической величины независима от времени. {С квантовой точки зрения} вообще ничего не меняется во времени. При этом энергия имеет определенное значение и $\Delta E = 0$. Формально можно сказать, что время Δt, за которое что бы то ни было изменилось, равно ∞, т.е. при $\Delta E = 0$ имеем $\Delta t = \infty$.

Если в системе что-либо меняется со временем, то $\Delta E \neq 0$.

{Таким образом возникает вопрос о связи, существующей между изменениями во времени физических величин в каком-либо состоянии замкнутой системы и разбросом энергии в этом состоянии. Такую зависимость можно установить следующим образом.

Под разбросом ΔA величины A мы понимаем корень из дисперсии, т.е. [11]

$$(\Delta A)^2 = \int \psi^*(A - \bar{A})^2\, \psi\, dx.$$

Для разброса двух любых величин A и H, как известно, справедливо следующее соотношение:

$$\Delta A \cdot \Delta H \geq \frac{1}{2}\left|\overline{HA - AH}\right.$$

Но если под H мы будем понимать оператор энергии, то справедливо также

$$\mathbf{i}\hbar\frac{\partial A}{\partial \mathbf{t}} = AH - HA$$

откуда для любой физической величины мы получаем соотношение}

$$(\Delta A)^2 \cdot (\Delta E)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}\left(\frac{\partial \overline{A}}{\partial \mathbf{t}}\right)^2 \qquad (3)$$

По-видимому, (3) и есть общее выражение соотношения неопределенности для энергии и времени (поскольку $\Delta A\Big/\frac{\partial \overline{A}}{\partial \mathbf{t}}$ имеет размерность времени).

Беря в качестве A различные {величины, мы получаем те или иные специальные формулировки} этого соотношения.

Если, например, $A \equiv x$, то $d\bar{A}/dt$ – скорость центра тяжести пакета, ΔA – "средняя" ширина пакета и $\Delta A/\bar{A}$ – время t прохождения пакета через {какую-нибудь неподвижную} точку пространства (во всяком случае для времен не слишком больших) {т.е. для небольших расплываний пакета}. Тогда соотношение (3) дает {связь между этим временем t и разбросом ΔE энергии в пакете

$$\Delta E \cdot \mathbf{t} \geq \frac{\hbar}{2} \qquad (4)$$

Это одна из обычных форм толкования соотношения неопределенности между энергией и временем}. Соотношение (4) остается справедливым и для частицы в поле сил, {а не только для свободной частицы}.

Примечания

1. Под этим названием здесь публикуется содержание одной из тетрадей Л.И. Мандельштама: работа относится к периоду его пребывания в Боровом и затем в Москве. В фигурных скобках даны вставки из других тетрадей, содер-

жащих более ранние варианты рукописи. Помещаемый материал лишь в очень малой степени повторяет содержание статьи 49 (том II). Материал обработан И.Е. Таммом.

2. ZS. f. Phys. 69, 59, 1931.
3. Generalisation des relations d'incertitude. Actual Sci. et Ind., 1932.
4. Де Бройль. Введение в волновую механику, стр. 230. Харьков, 1934.
5. "Die Grundlagen der Quantentheorie". Hand - u. Jahrb. der chem. Phys., т. I, стр. 53.
6. Ann. de l'Inst. H. Poincaré, 1931, стр. 223-224.
7. Черта сверху означает среднее.
8. Мы рассматриваем "чистые состояния", а не "смесь".
9. В. Паули. Общие принципы волновой механики, стр. 103. ГТТИ, 1947.
10. "Gruppentheorie u. Quantenmechanik", 2-е изд., стр. 45. Лейпциг, 1931.
11. Loc. cit., стр. 118.