

Национальный исследовательский университет
Высшая Школа Экономики

курс-майнор 2017-2018 уч.года
«Квантовая физика 'для чайников'»

В.Н.Глазков

Лекция 6

Проблема измерения и соотношение
неопределенностей Гейзенберга.
Вероятностная интерпретация квантовой механики,
волновая функция.

Оглавление

Напоминание о пройденном.....	4
Отказ от детерминизма в квантовой теории.....	4
Проблема измерения в квантовой физике.	5
Принцип неопределённости Гейзенберга.....	7
Необычные последствия соотношения неопределённостей: «отсутствие покоя», нулевые колебания гармонического осциллятора и квантовые кристаллы.....	8
Состояние с наименьшей энергией в квантовой физике.....	8
Нулевые колебания гармонического осциллятора.....	9
Квантовые кристаллы гелия.....	9
Статистическая трактовка квантовой механики.	10
Волновая функция.....	10
Уравнение Шредингера.....	11

Список литературы

1: NIST, NIST Chemistry WebBook, SRD 69: Oxygen, 2017, webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7782447&Mask=1000

Напоминание о пройденном

Напомним два важных результата, о которых мы говорили ранее.

Во-первых (лекция нашего 3 курса), постулат Планка о дискретности передачи энергии при взаимодействии электромагнитного излучения с веществом (позволивший описать фотоэффект, эффект Комптона, излучение абсолютно чёрного тела) оказался критичным для классической картины мира. Так как реально взаимодействие тел в механике или взаимодействие атомов или молекул в задачах молекулярно-кинетической теории сводится к взаимодействию через электрические силы, то и процессы обмена энергией (как минимум, некоторых) «обычных» механических ударах тел окажутся в зоне действия постулата Планка. Однако, уравнения классической физики (формализм Гамильтона¹) предполагают *дифференцируемость* энергии, что по известной математической теореме означает *непрерывность* энергии, как функции координат и импульсов. Противоречие этих двух выводов показывает, что гипотеза Планка, строго говоря, несовместима с классической механикой. Это означает, что принимая гипотезу Планка как проявление более точных законов природы, действующих в микромире², мы не можем одновременно оставить в силе весь формализм классической механики.

Во-вторых (лекция нашего 5 курса), вспомним дифракционный опыт Юнга с одиночными электронами. Результаты этого эксперимента показали, что электрон интерферирует «сам с собой». То есть, мы не можем *в принципе* говорить, что индивидуальный электрон прошёл с определённой стороны от проволоочки «электронной бипризмы»: в каком-то (неясном пока в рамках нашего курса) электрон одновременно проходит по обе стороны от проволоочки.

Отказ от детерминизма в квантовой теории.

Ранее мы показали, что гипотеза Планка, строго говоря, несовместима с классической механикой. Этот вывод, это противоречие показывают, что необходимо установить связь между новой (квантовой) теорией и классической механикой. Необходимо определить область применения старой, хорошо проверенной теории с точки зрения новой теории. И это не так трудно сделать. Действительно, с точки зрения математики производные энергии в уравнении Гамильтона есть предел $\left(\frac{\partial E}{\partial \vec{r}}\right)_x = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta E}{\Delta x}\right)$. Такой предел можно приближенно заменить отношением $\left(\frac{\Delta E}{\Delta x}\right)$, где Δx и ΔE достаточно малы, но изменение энергии достаточно велико по сравнению с квантом энергии: $\Delta E \gg h\nu$. С этой

1 Напомним, что в классической механике есть несколько эквивалентных форм записи уравнений движения. Кроме известных со школы уравнений Ньютона, могут быть записаны уравнения Гамильтона

$$\frac{d\vec{p}_i}{dt} = -\frac{\partial E(\{\vec{r}_i, \vec{p}_i\})}{\partial \vec{r}_i}, \quad \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \frac{\partial E(\{\vec{r}_i, \vec{p}_i\})}{\partial \vec{p}_i},$$

где $E(\{\vec{r}_i, \vec{p}_i\})$ — полная энергия системф, как сумма кинетических и потенциальных энергий составляющих систему частиц.

2 А логика развития науки требует от нас принять это — гипотеза Планка помогает объяснить явления не имеющие объяснения в классической физике.

оговоркой, классические уравнения остаются применимы. А область применения классической теории с точки зрения квантовой являются процессы, в которых характерные изменения энергии велики по сравнению с квантом энергии.

Ничтожность кванта энергии для обычных задач механики (для колебаний реального физического маятника и, тем более, для задач типа вращения Земли по орбите) делает это приближение кажется несущественным. Такая подмена вычисления производной как точного предела на отношение малых, но конечных изменений величин, встречалась и в практических задачах классической механики — из-за конечной точности практических измерений измерение всё меньших приращений становится затруднительным и, с практической точки зрения, при измерении координат или скоростей в задаче приходится останавливаться на точности измерения, приемлемой для данной задачи. Более того, так как в достаточно сложных механических системах аналитические решения обычно невозможны (например, задача трёх тел в небесной механике), то решать уравнения динамики вероятно придётся при помощи численных (компьютерных) методов, где вычисление производных также часто заменяется конечными приращениями.

Однако есть принципиальное отличие в возникающей с принятием гипотезы Планка ситуации от этого осознанного отказа от большой точности при решении конкретных задач классической механики. В рамках классической теории можно утверждать, что, задав желаемую точность нахождения решения задачи классической механики, можно определить необходимую точность задания (измерения) начальных координат и импульсов частиц системы и необходимый шаг численных методов решения. Таким образом, в классической механике точность решения задачи может становиться сколь угодно высокой. Это свойство классической механики называется детерминизмом: *в принципе* классическая механика позволяет вычислить поведение механической системы с *абсолютной* (сколь угодно высокой) точностью. Например, в рамках классической механики гипотетически возможно описать положения всех тел Солнечной системы («работу небесных часов») в произвольный момент времени. В частности, можно было бы решать обратную задачу, двигаясь в прошлое, и, гипотетически, увидеть как возникла Солнечная система. Всё что для этого требуется в классической задаче — это измерить в данный момент времени с достаточной точностью координаты и скорости (импульсы) всех существенных тел Солнечной системы.

Квантовая физика накладывает ограничения на применимость классической теории: как мы уже обсудили, для применимости классической теории изменения координат и импульсов при вычислениях или измерениях не должны становиться настолько малы, чтобы соответствующие изменения энергии стали сравнимы с величиной кванта энергии. Это означает, что мы более не можем даже теоретически достигнуть наперёд заданной точности предсказания положения частей системы. То есть, с учётом квантовой теории строгий детерминизм классической механики пропадает.

Проблема измерения в квантовой физике.

Недетерминизм квантовой физики проявляется не только в рассмотренных выше ограничениях на точность решения задач классической механики. В тех условиях, когда квантовые эффекты становятся существенными (квант энергии становится сравним с характерным масштабом изменения энергии в задаче), возникает другая проблема, называемая проблемой измерения. Мы с ней, фактически, уже столкнулись при рассмотрении опыта Юнга для одиночного электрона: хотя электрон точно пролетел по

установке, мы принципиально не можем описать его траекторию: с точки зрения классической физики электрон одновременно двигался по двум взаимоисключающим траекториям. Рассмотрим эту проблему подробнее.

Классическая механика описывается координатами и импульсами (скоростями) частиц системы. Начальные условия задачи классической механики — это набор координат и импульсов (скоростей) частиц в начальный момент времени. В теории классической механики нет никакой проблемы в том, чтобы измерить (или, что то же самое, задать) и координаты, и импульсы всех частиц одновременно.

Однако это предположение оказывается не таким фундаментальным как может показаться. Это связано с тем, что в процессе измерения происходит взаимодействие изучаемой частицы с «инструментом», которым производится измерение. Чтобы проиллюстрировать это, рассмотрим задачу об измерении координаты или импульса микрочастицы подробнее.

Итак, пусть есть частица и мы хотим определить её координаты в пространстве. Если нужно грубое измерение — мы берём линейку и измеряем координаты частицы. Для более точного измерения мы воспользуемся более точным прибором, например микрометром. Но тут в какой-то момент возникает проблема, связанная с тем, что для того чтобы «рассмотреть» нашу частицу, мы должны её осветить, а тогда точность определения её положения ограничивается дифракционными эффектами: приближённо длиной волны используемого излучения. Мы можем уменьшать длину волны, усиливать интенсивность излучения, чтобы сделать определение положения частицы более точным. Но при этом наше излучение начинает взаимодействовать с частицей, как минимум давить на неё (существование давления света следует из классической электродинамики) — возникает сила, действующая на частицу, возникает смещение частицы под действием этой силы. В результате, к тому моменту когда мы закончили наше измерение частица оказалась в новом положении *из-за взаимодействия с прибором*, который измеряет её положение — так что результат точных измерений потерял практический смысл: вместо получения информации о начальных условиях мы в ходе измерения создали новое состояние частицы, которое мы опять не знаем.

Аналогичная проблема возникнет, если мы попытаемся измерить импульс (скорость) частицы. Определить скорость можно, например, измерив два раза положения частицы — но при повышении точности уже первое измерение исказит состояние частицы, как описано выше, так, что полученный результат не будет иметь никакого отношения к реальной скорости частицы. Можно наоборот, измерить импульс частицы, воспользовавшись законом сохранения импульса — но тогда частица передав весь свой импульс «прибору» остановится, и мы полностью потеряем информацию о координате частицы.

Таким образом, оказывается принципиально невозможным измерить координаты или импульсы объекта, не внося изменений в его состояние. И чем точнее желаемое измерение, тем больше отличается состояние объекта (частицы, например) после измерения от состояния до измерения.

Это ограничение, впрочем, позволяет определить *только* координаты или *только* импульсы частицы со сколь угодно высокой точностью — просто после измерения состояние частицы будет совершенно другим. Но оказывается, что никакими способами нельзя *одновременно* точно измерить координату и проекцию импульса на это направление. Более того, существуют и другие пары величин, которые принципиально нельзя одновременно точно измерить. За историю развития квантовой физики придумывалось множество мысленных (нем. Gedankenexperiment) и реальных экспериментов, но этот результат остался неизменным. Таким образом, его следует считать подтвержденным законом квантовой

физики.

Поясним ещё раз эту проблему на примере координаты и импульса. Дело в том, что гипотетические «приборы» для измерения координаты и импульса выдвигают несовместимые требования. Для точного измерения координаты нам необходимо остановить частицу. Например, вынудить реакцию частицы с зерном фотоэмульсии. При этом нам не важно, куда уйдёт импульс частицы — передастся атому серебра в фотоэмульсии, излучится в виде света или упругих волн в кристалле. Для измерения импульса нам, наоборот, важно чтобы импульс частицы полностью передался «прибору», без неконтролируемых потерь, для чего частица должна «завязнуть» в «приборе» подобно пуле в баллистическом маятнике. При этом нам совершенно не важно, где остановится частица внутри «прибора». Таким образом, пытаясь получить точную информацию о координате мы теряем информацию об импульсе, и наоборот.

Принцип неопределённости Гейзенберга

Сделаем один из упомянутых выше «мысленных экспериментов» для наглядности наших рассуждений. Предположим, что мы пытаемся измерить скорость микрочастицы при помощи эффекта Доплера и одновременно измерить её координату по времени прохождения отражённого луча.

Эффектом Доплера называется изменение частоты излучения при движении источника излучения³. В частности он используется в радарах (в том числе и дорожных). Если источник излучения с частотой ω движется на нас со скоростью V , то за время $T = \frac{2\pi}{\omega}$ (это период колебаний) он сместится к нам на расстояние $l = Vt = \frac{2\pi V}{\omega}$. За это же время фронт волны, излученный в момент времени $t=0$ сместится на $\frac{2\pi c}{\omega}$. Расстояние между двумя фронтами волны, отличающимися по фазе на 2π есть по определению длина волны в неподвижной системе координат: $\lambda' = \frac{2\pi c}{\omega} - \frac{2\pi V}{\omega}$. Отсюда для измеряемой неподвижным наблюдателем частоты излучения $\omega' = \frac{2\pi c}{\lambda'}$, $\omega' \approx \left(1 + \frac{V}{c}\right)\omega$. В схеме радара измеряется частота отражённой волны и эффект удваивается⁴: $\omega' \approx \left(1 + 2\frac{V}{c}\right)\omega$.

В нашем гипотетическом опыте с микрочастицей мы будем считать частоту падающего излучения заданной (используется какой-то монохроматический источник) и необходимо измерить изменение частоты возвращающегося излучения. Для этого необходимо зарегистрировать отражённую волну в течение некоторого времени τ . Теория обработки информации и фурье-анализ говорят, что для измерения частоты с точностью $\Delta\omega$ необходимо измерять данные в течение времени $\tau \sim \frac{1}{\Delta\omega}$. Это измерение измерит скорость частицы с точностью $\Delta V = \frac{c}{2} \frac{\Delta\omega}{\omega}$. Соответственно, координату частицы после этого измерения мы будем знать с точностью $\Delta x = \Delta V \tau \sim \frac{c}{\omega}$ (результат по порядку близок к

³ Мы рассматриваем нерелятивистский случай.

⁴ Для буквального применения полученного ранее результата мы должны два раза менять систему отсчёта и оба раза относительная скорость источника и приёмника одинакова, а эффекты Доплера складываются.

длине волны, что естественно). С другой стороны, в результате измерения к импульсу частицы добавляется изменение импульса отраженного фотона $\Delta p = 2 \frac{\hbar \omega}{c}$. Произведение этих неточностей $\Delta x \Delta p \sim \hbar$.

Таким образом, в квантовой физике существуют пары величин, которые принципиально нельзя измерить одновременно. Лучшее что возможно — это некоторый компромисс, когда, например, и координата, и соответствующая проекция импульса известны с некоторой неопределённостью. Это утверждение называется принципом неопределённости Гейзенберга и записывается как $\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} \cdot \sqrt{\langle (\Delta p_x)^2 \rangle} \sim \hbar$, где $\hbar = h/(2\pi)$ (h — постоянная Планка).⁵ Для наших целей достаточно такой оценочной формы этого соотношения. В принципе, есть его более строгая формулировка (т.н., неравенство Вейля): $\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} \cdot \sqrt{\langle (\Delta p_x)^2 \rangle} \geq \frac{\hbar}{2}$.

Необычные последствия соотношения неопределённостей: «отсутствие покоя», нулевые колебания гармонического осциллятора и квантовые кристаллы

Состояние с наименьшей энергией в квантовой физике

В классической физике полная энергия частицы складывается из кинетической и потенциальной: $E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$. Состоянию с наименьшей энергией соответствует нахождение частицы точно в минимуме потенциальной энергии с нулевым импульсом. Эта ситуация, однако, противоречит соотношению неопределённостей: при этом одновременно оказываются точно заданными и координата, и импульс.

Таким образом, в квантовой задаче в состоянии с наименьшей возможной энергии частица должна иметь «немножко» неопределённую координату и «немножко» неопределённый импульс. Это можно себе представить как «дрожание» частицы вблизи классического положения равновесия — хотя необходимо понимать, что эта аналогия условна: это не дрожание классической частицы, а принципиально квантовый эффект делокализации частицы.

⁵ Эта запись соотношения неопределённости несколько условна. В ней под неопределённостями координаты Δx и импульса Δp_x подразумеваются не средние отклонения от среднего значения $\langle \Delta x \rangle = \langle x - x_0 \rangle$, которые по определению среднего равны нулю, а среднеквадратичные отклонения $\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}$ и $\sqrt{\langle (\Delta p_x)^2 \rangle}$, которые всегда положительны. Более того, существуют более строгие формы записи этого соотношения, такие как неравенство Вейля $\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta p_x)^2 \rangle} \geq \frac{\hbar}{2}$. Однако для качественного понимания наиболее наглядна именно запись в тексте: произведение характерных неопределённостей измерения координаты и импульса порядка постоянной Планка «с чертой».

Нулевые колебания гармонического осциллятора

Изложенные выше соображения разъясняют, почему при точном решении задачи об уровнях гармонического осциллятора возникает добавка в полкванта энергии: $E = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$.

Из-за аналогии с дрожанием частицы вблизи положения равновесия, делокализацию квантовой частицы в основном состоянии (так называют состояние с наименьшей энергией) называют «нулевыми колебаниями», а размах этой делокализации в пространстве - «амплитудой нулевых колебаний». Оценим её для гармонического осциллятора.

Энергия основного состояния $E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}$ может быть сопоставлена с энергией растянутой пружины $\frac{k x^2}{2}$. Отсюда амплитуда отклонения от положения равновесия $x = \sqrt{\frac{\hbar \omega}{k}}$.

Вспоминая, что частота пружинного маятника $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, получаем для амплитуды колебаний $x = \sqrt{\frac{\hbar^2}{k m}}$. Таким образом, чем легче грузик и чем мягче пружина, тем больше амплитуда нулевых колебаний.

Конечно для макроскопического маятника (скажем, $m = 1 \text{ г}$, $k = 1 \text{ Н/см}$) из-за малости постоянной Планка эта величина окажется ничтожно малой. Примеры, где этот эффект окажется существенным нужно искать в микромире. Одним из примеров такого осциллятора являются двухатомные молекулы. Рассмотрим пример молекулы кислорода O_2 . Масса атома кислорода примерно⁶ равна $30 \times 10^{-24} \text{ г}$ (пользуемся тем, что протон и нейтрон, которых в ядре кислорода 16 штук, примерно в 2000 раз тяжелее электрона, масса которого 10^{-27} г). Из спектроскопических исследований [1] известно, что квант колебаний молекулы кислорода соответствует частоте около 1000 см^{-1} (один обратный сантиметр — это единица частоты, соответствующая длине волны 1 см), то есть около 30 ТГц. Соответственно, эффективная жёсткость «пружинки» между атомами $k = \omega^2 m \approx 10^6 \text{ дин/см} = 10 \text{ Н/см}$, а амплитуда нулевых колебаний $4 \times 10^{-10} \text{ см} = 0.04 \text{ \AA}$. Эта величина всего в примерно в 20-30 раз меньше межатомного расстояния в молекуле, то есть уже может быть не так и мала.

Квантовые кристаллы гелия

Как мы видели, амплитуда нулевых колебаний тем больше, чем атомы легче, и тем больше, чем слабее взаимодействие между ними. Экстремальным примером являются кристаллы, формируемые при низких температурах (в несколько кельвин, всего на несколько градусов

⁶ При строгом рассмотрении можно показать, что система из двух взаимодействующих частиц массами m_1 и m_2 эквивалентна (в смысле нахождения энергетических уровней) задаче о движении одной частицы массой $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ во внешнем потенциале, совпадающем с потенциалом взаимодействия частиц $U(\vec{r}) = U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Но с точностью наших рассуждений эта поправка (для молекулы из двух одинаковых атомов $\mu = \frac{m}{2}$) не важна. Поэтому для массы атома можно также использовать грубую оценку.

выше абсолютного нуля) из атомов гелия. Эти атомы лёгкие (в 4 раза легче кислорода) и, как инертные газы, из-за полностью заполненных оболочек очень слабо взаимодействуют друг с другом. Так что «жёсткости пружинок» также ослаблены. Оказывается, что в этом случае амплитуда нулевых колебаний оказывается близка к межатомному расстоянию. При такой делокализации атомов из-за квантовых эффектов кристалл «разваливается»: жидкий гелий не замерзает при температурах вплоть до абсолютного нуля и для стабилизации твёрдой фазы необходимо не только достичь низкой температуры, но и приложить давление около 30 атмосфер.

Статистическая трактовка квантовой механики.

Волновая функция.

Итак, мы показали, что гипотеза Планка оказалась не так безобидна. Принятие этой гипотезы требует отказа от привычного детерминизма классической физики. Как описывать ситуации, когда результат эволюции системы во времени может оказаться неоднозначен? Какими переменными описывать «механические» системы в квантовой физике, если классические координаты и импульс одновременно принципиально не измеримы?

Ответом является использование вероятностной (статистической) интерпретации. Этот подход развивался в работах Гейзенберга и Шредингера, за которые им были присуждены Нобелевские премии по физике. Опишем вкратце, не вдаваясь в математические детали, как строится этот формализм.

Состояние системы описывается так называемой волновой функцией (или Ψ -функцией⁷), зависящей только от одновременно измеримых величин, например, в простейшем одномерном случае, только от координаты $\Psi = \Psi(x)$. В общем случае волновая функция комплексная. Волновая функция по определению задаёт вероятность обнаружения системы (частицы) в данной области координат: $w = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x)|^2 dx$, то есть квадрат модуля волновой функции имеет смысл плотности вероятности.

Название «волновая функция» связано с тем, что для частицы, свободно движущейся в пространстве, зависимость Ψ -функции от координаты оказывается гармонической функцией и изменение волновой функции описывается формально тем же уравнением, что и распространение волн. Фактически, это отражает тот факт, что гипотеза де Бройля о волновых свойствах частиц уже включена в формализм волновой функции.

Тогда задача классической механики о траектории движения частицы превращается в задачу об эволюции волновой функции во времени — о том как меняется вероятность обнаружения частицы в различных областях пространства. Уравнение эволюции волновой функции называется в нерелятивистском случае уравнением Шредингера, в релятивистском — уравнением Дирака.

Из-за связи волновой функции с вероятностью обнаружения частицы, особую ценность приобретают такие состояния частицы, в которых это распределение вероятности остаётся неизменным, стационарным. Такие состояния называют стационарными. Например ими являются электронные состояния в атоме: при «движении» электрона по орбите мы не можем

7 Читается: «пси-функция».

сказать, где электрон находится в данный момент, однако вероятность с которой электрон может быть обнаружен в некоторой области пространства одна и та же в любой момент времени. Существенным свойством квантовой физики является то, что система может находиться и в нестационарном состоянии, являющемся своеобразной «смесью» различных состояний. В случае электрона в атоме, например, это может означать что электрон, находящийся в таком «смешанном» состоянии, будет обнаруживаться при измерении его положения некоторым прибором то на одной, то на другой орбите.

Уравнение Шредингера

Для того, чтобы понять как всё же физики описывают микромир нам понадобится немного познакомиться с формализмом квантовой теории. Это описание не строгое, его цель состоит в том, чтобы просто показать, что такой формализм существует и показать его применение на нескольких простых примерах. Математические детали могут быть пропущены, мы постараемся подчеркнуть смысл получаемых результатов на качественном уровне.

Итак, раз мы описываем состояние частицы на языке статистики, то и эволюция состояния частицы во времени должна тогда описываться тоже на языке вероятностей — как изменение волновой функции со временем. Самая простая форма такой записи: $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$, где

\hat{H} — некоторый *оператор*, действующий на волновую функцию, i — мнимая единица⁸, а \hbar — постоянная Планка (которая пока вписана сюда нашим произволом). Это уравнение называют нестационарным уравнением Шредингера.

Понятие оператора пришло из математики и не является специально сложным. Мы, например, привыкли к вычислению различных функций от численного аргумента. Например, при $x = \pi/3$ мы можем легко вычислить функцию $\cos(x) = 1/2$. Такие «привычные» функции берут в качестве своего аргумента некоторое число, и получают из него другое число. Программисты могут вспомнить функции, определяемые в программе, которые могут иметь аргументы разных типов и возвращать значение совсем другого типа. Оператор — это функция, действующая на функцию, результатом действия которой является другая функция.

Например, можно определить дифференциальный оператор $\hat{A} = \frac{d}{dx}$, тогда для функции

$$f(x) = \cos(x) \text{ можно вычислить } \hat{A} f(x) = \frac{d}{dx} \cos(x) = -\sin(x).$$

Для каждого оператора существует некоторый набор *собственных функций* $f_{\text{собств}}$, для которых верно уравнение $\hat{A} f_{\text{собств}} = A f_{\text{собств}}$, где A — некоторое число. Например, для простого дифференциального оператора \hat{A} такими собственными функциями являются функции вида e^{Ax} .

Можно заметить, что если в нестационарное уравнение Шредингера подставить собственную

8 Мнимой единицей называется число i , такое что $i^2 = -1$. Мнимым числом называются числа вида $a + ib$, для них можно определить операции сложения и умножения с учётом определения мнимой единицы. Мнимые числа могут быть визуализованы как вектора на плоскости, где их действительная часть (a) откладывается по оси X, а мнимая часть (b) - по оси Y. Модулем комплексного числа называется длина такого вектора $\sqrt{a^2 + b^2}$. Для нас будет важно следующее математическое свойство: может быть определена экспонента с мнимым показателем $e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$, модуль такого числа тождественно равен 1.

функцию оператора \hat{H} , удовлетворяющую *стационарному уравнению Шредингера* $\hat{H}\Psi = E\Psi$, то мы получим уравнение $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi$. Тогда зависимость волновой функции от времени имеет вид $\Psi(x, t) = A(x)e^{-iEt/\hbar}$. Тогда по свойству модуля комплексной экспоненты плотность вероятности $|\Psi|^2$ от времени не зависит! Состояние описываемое такой волновой функцией соответствует неизменному во времени распределению вероятности — как раз такому стационарному состоянию, о которых говорилось выше.

Стационарное состояние классифицируется некоторым числом E . Это состояние неизменно во времени, то есть можно говорить, что число E — сохраняющаяся величина. Но в физике есть всего один скалярный закон сохранения — это закон сохранения энергии. Следовательно, это число должно быть связано с энергией. Более строгое рассмотрение показывает, что это число и есть полная энергия частицы. Тогда и оператор \hat{H} — это оператор энергии частицы: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r})$, где \hat{p} — оператор импульса.

Для определения (угадывания, с учётом не строгости нашего курса) оператора импульса можно заметить следующее. Мы понимаем, что правильное описание квантовой частицы должно описать ее волновые свойства. То есть, связь между импульсом частицы и её волновой функцией должна быть той же, что и у обычных волн. Зависимость амплитуды волны от координаты имеет вид $\cos(kx)$ или $\sin(kx)$ в зависимости от начальной фазы. Импульс кванта волны равен $\hbar k$. Объединяя общий вид волны в комплексную форму e^{ikx} получаем, что оператор импульса, дающий правильные собственные значения импульса это $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

Окончательно, для простейшего случая частицы всего с одной координатой получаем вид оператора энергии (гамильтониана):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) .$$

Эти рассуждения замыкают цепочку, позволяющую формализовать задачу о вычислении уровней энергии квантовой системы.