

УДК 530.145  
PACS number(s): 03.065.Bz

## ЧАС У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

О. Сергієнко

Львівський національний університет імені Івана Франка  
кафедра теоретичної фізики  
вул. Драгоманова, 12, 79005 Львів, Україна  
e-mail: zajca2718@rambler.ru

Досліджено поняття часу переходу в квантовій механіці. Розподіл ймовірностей для часу визначається за допомогою потоку густини ймовірності (1-вимірний випадок). Такий підхід унеможливає виникнення проблем, пов'язаних з теоремою Паулі. За допомогою цього методу вивчено часові характеристики модельної квантової системи, проведено порівняння з класичною механікою.

*Ключові слова:* час переходу, модельні квантові системи, розподіл ймовірностей.

Відомо, що у квантовій механіці час відіграє роль параметра. Однак в експериментах широко вимірюються часові характеристики процесів, зокрема, час переходу частинки з однієї точки в іншу. Отже, виникає питання теоретичного розгляду часу як динамічної змінної. Коректна інтерпретація співвідношення невизначеностей для енергії-часу також потребує чогось більшого, ніж просто параметричне трактування часу.

Проблема часу в квантовій механіці на сьогодні вирішена не до кінця. Вона виникла вже під час створення квантової механіки. В її основу покладено теорему Паулі (1926 р.), в якій йдеться про те, що канонічно спряжений до гамільтоніана самоспряжений часовий оператор не може існувати через напівобмеженість спектра гамільтоніана. У схемі доведення цієї теореми насамперед показано еквівалентність таких тверджень:

- 1) Існує самоспряжений оператор  $\hat{T}$ , який є канонічно спряженим до гамільтоніана, тобто  $[\hat{H}, \hat{T}] = i\hbar$ .
- 2) Існує самоспряжений оператор  $\hat{T}$ , в якого ортонормована і повна система власних функцій  $\{|T\rangle\}$  при часових зсувах перетворюється так:  
$$e^{i\hat{T}\tau/\hbar} |T\rangle = |T + \tau\rangle.$$
- 3) Існує самоспряжений оператор  $\hat{T}$ , який генерує унітарні енергетичні зсуви, тобто такі, що для будь-якого енергетичного власного стану  $|E\rangle$  і будь-якого параметра  $\varepsilon$  з розмірністю енергії виконується рівність:

$e^{i\hat{T}\varepsilon/\hbar} |E\rangle = |E + \varepsilon\rangle$ , де оператор  $\hat{T}$  вважається означеним на всьому гільбертовому просторі, котрий утворюється за допомогою власних функцій гамільтоніана.

На підставі цього стверджується, що оскільки умова 3) є несумісною з обмеженістю знизу спектра  $\hat{H}$ , то наявність оператора  $\hat{T}$ , який би задовольняв умови 1) і 2), є неможливим [1].

Довго вважалося, що теорема Паулі доречна, однак останні дослідження [2, 3, 4] засвідчують, що трапляються випадки, для яких це не так.

Існують різні шляхи вирішення квантово-механічної проблеми часу. Одним з них є квантування (різними способами) класичних співвідношень для часу. Отже, було отримано різні (через неоднозначність квантування) вирази, і нелегко встановити, який з них є правильним. Окрім того, цей підхід повністю ігнорує теорему Паулі.

Найважливішими серед таких побудов на основі стандартної квантової механіки є час Ааронова-Бома [5] і аксіоматичний ідеальний час Кійовського [1, 6, 10].

Іншим підходом до цієї проблеми є відмова від постулату самоспряженості оператора, що відповідає фізичній величині, і введення POVM [7, 8]. Тут використано той факт, що для того, аби вимірювані значення справджувалися, самоспряженість оператора не є строго необхідною. У цьому випадку можна отримати (для вільної частинки) розподіл Кійовського [8], який, виявляється, має операційний сенс [9, 10, 11]. Однак цей метод потребує досить радикальних припущень.

На нашу думку, найпростішим шляхом вирішення цієї проблеми є введення густини ймовірності, яка виражається через модуль вектора потоку густини ймовірності. Загалом у разі співставлення теоретичних та експериментальних результатів використовують розподіл імовірностей. Цей підхід також має свої переваги (основна з них – простота) і недоліки.

У статті на основі цього методу досліджено часові характеристики однієї з модельних квантових систем.

**Густина ймовірності для часу переходу частинки у точку з координатою  $l$ .** Розглянемо частинку, яка перебуває в основному стані у потенціальній ямі з безмежно високими стінками. У момент часу  $t=0$  вона отримує змогу рухатися або вздовж необмеженої (зникають обидві стінки, рис. 1), або вздовж напівобмеженої (зникає одна стінка, рис. 2) осі. На відстані  $l$  розміщено екран. Розглянемо питання про час, за який частинка його досягне.

Знаючи хвильову функцію в початковий момент часу  $\psi(x, 0)$ , неважко відшукати часову еволюцію. Очевидно, що  $|\psi(x, t)|^2$  виражає густину ймовірності знаходження частинки в околі координати  $x$  в момент часу  $t$  (ця величина не може відігравати роль густини ймовірності для часу через неможливість нормування

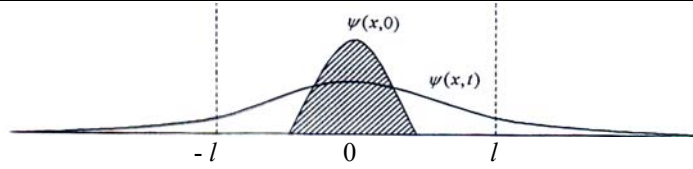


Рис. 1. Необмежений рух

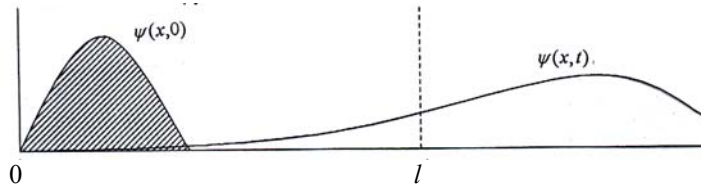


Рис. 2. Напівобмежений рух

за  $t$ ). Отож, імовірність того, що за час  $t$  частинка потрапила на екран, виражається через імовірність знаходження частинки за екраном, тобто:

$$w(l, t) = \int_l^\infty |\psi(x, t)|^2 dx.$$

Інтегруючи рівняння неперервності (1-вимірний випадок):

$$\frac{\partial |\psi(x, t)|^2}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0$$

по  $x$  від  $l$  до  $\infty$  і враховуючи, що:

$$j(\infty, t) = 0,$$

маємо:

$$\int_l^\infty \left( \frac{\partial |\psi(x, t)|^2}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} \right) dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_l^\infty |\psi(x, t)|^2 dx - j(l, t) = 0$$

або:

$$j(l, t) = \frac{\partial w(l, t)}{\partial t}.$$

Проводячи інтегрування за  $t$  від 0 до  $t$  і беручи до уваги, що:

$$w(l, 0) = 0,$$

отримаємо  $w(l, t) = \int_0^t j(l, t) dt$ , де  $j(l, t)$  – потік густини ймовірності, тобто  $j(l, t) dt$

– імовірність зафіксувати частинку на екрані в околі часу  $t$ . Отже,

$$\rho(l, t) = \dot{w}(l, t) = j(l, t) \tag{1}$$

густиною імовірності для часу  $\epsilon$   $j(l, t)$ . Керуючись рівнянням неперервності, маємо умову нормування:

$$\int_0^\infty j(l, t) dt = \text{const.} \tag{2}$$

У випадку руху вздовж напівобмеженої осі  $\text{const}=1$ , а для необмеженої осі  $\text{const}=0,5$ .

Користуючись загальним правилом розрахунку середніх значень, можна отримати вирази для середнього значення часу та середньоквадратичної флуктуації:

$$\langle t \rangle = \frac{\int_0^{\infty} j(l, t) t dt}{\int_0^{\infty} j(l, t) dt}, \quad (3)$$

$$\sqrt{\langle (\Delta t)^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\int_0^{\infty} j(l, t) (t - \langle t \rangle)^2 dt}{\int_0^{\infty} j(l, t) dt}}. \quad (4)$$

**Часова залежність хвильової функції.** Рівняння Шредингера для вільної частинки має такий вигляд:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}.$$

Після введення нових змінних

$$\begin{cases} t = \frac{ma^2}{\hbar} \tau, \\ x = a\xi \end{cases},$$

де  $a$  – ширина потенціальної ями,  $m$  – маса частинки, його записують так:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{i}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2}. \quad (5)$$

Його розв'язок на нескінченій прямій з початковою умовою

$$\Psi_1(\xi, 0) = \varphi(\xi)$$

є таким: 
$$\Psi_1(\xi, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\xi, \xi', \tau) \varphi(\xi') d\xi',$$

де  $G_1(\xi, \xi', \tau) = \frac{1+i}{2\sqrt{\pi\tau}} \exp\left(\frac{i(\xi - \xi')^2}{2\tau}\right),$

тобто

$$\Psi_1(\xi, \tau) = \frac{1+i}{2\sqrt{\pi\tau}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi') \exp\left(\frac{i(\xi - \xi')^2}{2\tau}\right) d\xi'. \quad (6)$$

Розв'язок рівняння (5) на напівпрямій  $\xi \geq 0$  з граничною умовою  $\Psi_2(0, \tau) = 0$  і початковою умовою  $\Psi_2(\xi, \tau) = \varphi(\xi)$  має такий вигляд:

$$\Psi_2(\xi, \tau) = \int_0^{\infty} G_2(\xi, \xi', \tau) \varphi(\xi') d\xi',$$

$$\text{де } G_2(\xi, \xi', \tau) = \frac{1+i}{2\sqrt{\pi\tau}} (\exp(\frac{i(\xi - \xi')^2}{2\tau}) - \exp(\frac{i(\xi + \xi')^2}{2\tau})),$$

отже

$$\Psi_2(\xi, \tau) = \frac{1+i}{2\sqrt{\pi\tau}} \int_0^\infty \varphi(\xi') (\exp(\frac{i(\xi - \xi')^2}{2\tau}) - \exp(\frac{i(\xi + \xi')^2}{2\tau})) d\xi'. \quad (7)$$

Якщо  $\varphi(\xi)$  є хвильовою функцією частинки, що перебуває в основному стані в потенціальній ямі з безмежно високими стінками

$$\varphi(\xi) = \begin{cases} \sqrt{2} \sin \pi\xi, & 0 \leq \xi \leq 1 \\ 0, & \xi > 1, \quad \xi < 0, \end{cases}$$

то залежна від часу хвильова функція є у випадку необмеженої прямої такою:

$$\begin{aligned} \Psi_1(\xi, \tau) = & -\frac{i}{2\sqrt{2}} ((\operatorname{erf}(\frac{1-i}{2}(\frac{1-\xi}{\sqrt{\tau}} + \pi\sqrt{\tau})) + \operatorname{erf}(\frac{1-i}{2}(\frac{\xi}{\sqrt{\tau}} - \pi\sqrt{\tau}))) \times \\ & \times \exp(i\pi\xi) - (\operatorname{erf}(\frac{1-i}{2}(\frac{1-\xi}{\sqrt{\tau}} - \pi\sqrt{\tau})) + \operatorname{erf}(\frac{1-i}{2}(\frac{\xi}{\sqrt{\tau}} + \pi\sqrt{\tau}))) \times \\ & \times \exp(-i\pi\xi)) \exp(-\frac{i\pi^2\tau}{2}), \end{aligned} \quad (8)$$

а для напівпрямої вона має вигляд такий:

$$\begin{aligned} \Psi_2(\xi, \tau) = & -\frac{i}{2\sqrt{2}} ((\operatorname{erf}(\frac{1-i}{2}(\frac{1-\xi}{\sqrt{\tau}} + \pi\sqrt{\tau})) + \operatorname{erf}(\frac{1-i}{2}(\frac{1+\xi}{\sqrt{\tau}} - \pi\sqrt{\tau}))) \times \\ & \times \exp(i\pi\xi) - (\operatorname{erf}(\frac{1-i}{2}(\frac{1-\xi}{\sqrt{\tau}} - \pi\sqrt{\tau})) + \operatorname{erf}(\frac{1-i}{2}(\frac{1+\xi}{\sqrt{\tau}} + \pi\sqrt{\tau}))) \times \\ & \times \exp(-i\pi\xi)) \exp(-\frac{i\pi^2\tau}{2}). \end{aligned} \quad (9)$$

**Час переходу частинки в точку з координатою  $l$ : класичний та квантовий випадки.** В класичній механіці частинка, що вилітає з потенціальної ями з безмежно високими стінками, може потрапити на екран лише у певному часовому проміжку, проте всі значення часу є рівноймовірними. Її імпульс дорівнює

$$p = \frac{\hbar\pi}{a}, \text{ тоді час, за який вона подолає відстань } x, \text{ визначають так:}$$

$$t = \frac{x}{v} = \frac{xm}{p} = \frac{xma}{\hbar\pi}, \text{ або в змінних } \xi, \tau:$$

$$\tau = \frac{\xi}{\pi}.$$

Отже, розподіл імовірностей для часу переходу частинки в точку з  $x=l$  (відповідно  $\xi = L = l/a$ ) має прямокутний вигляд:

$$\rho_{cl}(L, \tau) = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, \frac{2L-1}{2\pi} \leq \tau \leq \frac{2L+1}{2\pi} \\ 0, \tau < \frac{2L-1}{2\pi}, \tau > \frac{2L+1}{2\pi} \end{cases}$$

при  $L > 0$  (відрховується від центру ями –  $\xi = \frac{1}{2}$ );

$$\rho_{cl}(L, \tau) = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, -\frac{2L+1}{2\pi} \leq \tau \leq \frac{1-2L}{2\pi} \\ 0, \tau < -\frac{2L+1}{2\pi}, \tau > \frac{1-2L}{2\pi} \end{cases}$$

при  $L < 0$  для необмеженої осі;

$$\rho_{cl}(L, \tau) = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, \frac{L-1}{\pi} \leq \tau \leq \frac{L+1}{\pi} \\ 0, \tau < \frac{L-1}{\pi}, \tau > \frac{L+1}{\pi} \end{cases}$$

для напівобмеженої осі.

Дослідження графічних залежностей класичного розподілу (рис. 3) і густини ймовірності локалізації частинки в околі  $L$  в момент часу  $\tau$  (рис. 4) при  $L = \frac{l}{a} = 10$  свідчить, що максимум  $|\psi(L, \tau)|^2$  збігається з центром  $\rho_{cl}(L, \tau)$ , тобто найімовірніший час локалізації квантової частинки дорівнює часу переходу частинки з центра ями до екрану в класичному випадку.

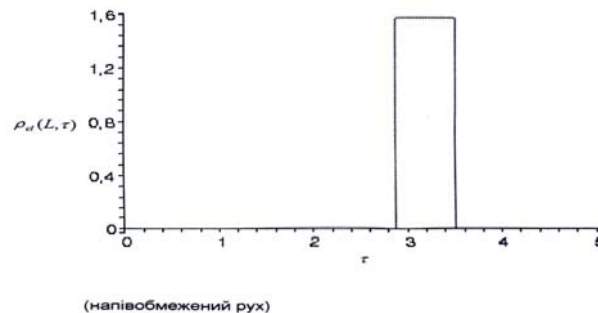
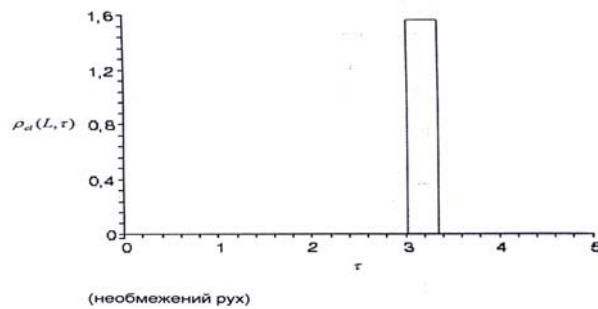


Рис. 3. Класичний розподіл для часу переходу частинки в  $L=10$

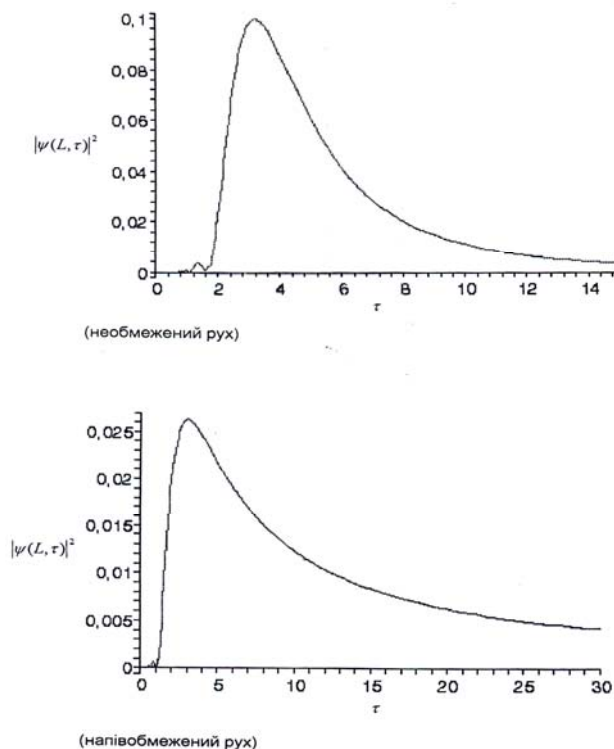


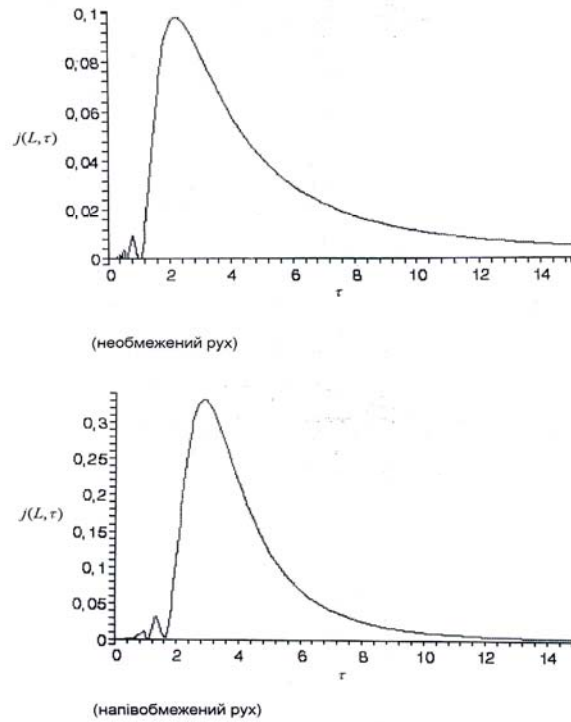
Рис. 4. Густина ймовірності для часу локалізації частинки в околі  $L=10$

Графіки густини ймовірності для часу переходу в точку з  $L = 10$  зображені на рис. 5. Видно, що у випадку необмеженого руху вона спадає при зростанні  $\tau$  повільніше, ніж у випадку напівобмеженого руху. На увагу також заслуговує наявність чітко вираженого додаткового максимуму, що розташований перед головним. При підвищенні точності обчислень він не зникає, отже можна стверджувати, що він справді існує. Щодо інших (менших) додаткових максимумів ми не можемо однозначно сказати, чи вони є реальними, чи це лише наслідок застосування цього методу обчислень. У відповіді на це запитання може дати аналіз поведінки  $j(L, t)$  в околі  $t=0$  з використанням інших чисельних методів.

Для необмеженої прямої  $j(L, \tau)$  при  $\tau \rightarrow \infty$  веде себе так:

$$j = O\left(\frac{1}{\tau}\right),$$

тому  $\langle \tau \rangle = \infty$  і  $\langle (\Delta\tau)^2 \rangle = \infty$  – середній час переходу безмежно великий, але нескінченно великими є і його флуктуації.

Рис. 5. Густина ймовірності для часу переходу частинки в  $L=10$ 

Для руху вздовж напівобмеженої осі  $j(L, \tau)$  при  $\tau \rightarrow \infty$  має таку поведінку:

$$j = O\left(\frac{1}{\tau^4}\right).$$

Найімовірніший час переходу частинки в точку з  $L=10$ :  $\tau_j = 2,83$  – він є більшим за відповідний час для необмеженого руху; середнє значення:  $\langle \tau \rangle = 4,4$ ; середньоквадратичне відхилення:  $\sqrt{\langle (\Delta\tau)^2 \rangle} = 3,27$ .

Також можна зазначити, що найімовірніший час переходу  $\tau_j$  є меншим і від найімовірнішого часу локалізації, і від середнього значення часу як для напівобмеженого ( $\tau_{|v|^2} = 3,18$ ), так і для необмеженого ( $\tau_j = 2,21$ ;  $\tau_{|v|^2} = 3,18$ ) руху.

Визначаючи густину ймовірності для часу переходу частинки у задану точку через модуль потоку густини ймовірності, незважаючи на відсутність самоспряженого часового оператора, можна отримати повний квантовий опис часових характеристик. Перевага цього підходу в тому, що він фактично потребує обчислення лише часової залежності хвильової функції (і потоку). Недоліком цього методу є те, що потік густини ймовірності завжди визначають з точністю до постійного вектора  $A$ . Однак ця проблема є несуттєвою для деяких квантових



систем (зокрема для частинки, що вилітає з потенціальної ями з безмежно високими стінками,  $A=0$ ); вона також зникає в релятивістському випадку [12].

1. *Delgado V., Muga J. G.* Arrival time in quantum mechanics // *Phys. Rev.* 1997. A 56, quant-ph/9704010. P. 3425–3435.
2. *Galapon E. A., Caballar R. F., Bahague R.* Confined quantum time of arrival for vanishing potential // *Phys. Rev.* 2005. A 72, 062107.
3. *Galapon E. A., Delgado V., Muga J. G., Egusquiza I.* Transition from discrete to continuous time-of-arrival distribution for a quantum particle // *Phys. Rev.* 2005. A 72, 042107.
4. *Galapon E. A., Caballar R. F., Bahague Jr. R.T.* Confined quantum time of arrivals // *Phys. Rev. Lett.* 2004. 93, 180406.
5. *Aharonov Y., Bohm D.* Time in the Quantum Theory and the Uncertainty Relation for time and Energy // *Phys. Rev.* 1961. 122, P. 1649-1658.
6. *Kijowski J.* Comment on “Arrival time in quantum mechanics” and “Time of arrival in quantum mechanics” // *Phys. Rev.* 1999. A 59, P. 897-899.
7. *Egusquiza I., Muga J. G.* Free motion time-of-arrival operator and probability distribution // *Phys. Rev.* 1999. A 61, 012104.
8. *Giannitrapani R.* Positive-Operator-Valued Time Observable in Quantum Mechanics // *Phys. Rev.* 2005. A 72, 062107, quant-ph/9611015.
9. *Damboronea J. A., Egusquiza I. L., Hegerfeldt G. C., Muga J. G.* Measurement-based approach to quantum arrival times // *Phys. Rev.* 2002. A 66, 052104.
10. *Hegerfeldt G. C., Seidel D., Muga J. G., Navarro B.* Operator normalized quantum arrival times in the presence of interactions // *Phys. Rev.* 2004. A 70, 012110.
11. *Hegerfeldt G. C., Seidel D., Muga J. G.* Quantum arrival times and operator normalization // *Phys. Rev.* 2003. A 68, 022111.
12. *Md. Manirul Ali, A. S. Majumdar, Diparkan Home and Shyamal Sengupta.* Spin dependent observable effect for free particles using the arrival time distribution // *Phys. Rev.* 2003. A 68, 042105; quant-ph/0306106.

## TIME IN QUANTUM MECHANICS

**O. Serhiyenko**

*Ivan Franko Lviv National University, Chair of Theoretical Physics  
Dragomanov Str., 12, UA-79005 Lviv, Ukraine  
e-mail: zajca2718@rambler.ru*

The concept of the arrival time in quantum mechanics is discussed. The time probability distribution is defined by the probability current density (1-dimensional case). Such an approach excepts the problems related to Pauli's Theorem. The time characteristics of the model quantum system are studied using this method. The comparison with classical mechanics is made.

*Key words:* time of arrival, model quantum systems, probability distribution.

Стаття надійшла до редколегії 17.05.2006

Прийнята до друку 09.06.2008