

1. Квантовая механика. Основы

1.1. Предпосылки возникновения квантовой механики

К началу XX в. была создана физическая картина мира, базирующаяся на механике Ньютона и электродинамике Максвелла. Считалось, что существуют две различные формы материи: частицы и волны. Частица — локализованное в пространстве образование, имеющая конечные размеры, массу и т.д. Волна представляет собой изменение состояния среды посредством распространения колебаний в пространстве. Волна характеризуется такими величинами как скорость распространения, длина волны, частота колебаний. С точки зрения классической физики считалось, что между этими двумя формами материи лежит бесконечная пропасть и никакой связи быть не может. Однако, по мере накопления знаний о свойствах материи появился целый ряд экспериментальных фактов, которые нельзя было объяснить с точки зрения классической физики.

1.1.1. Ультрафиолетовая катастрофа и гипотеза Планка

Все тела, имеющие температуру, отличную от нуля градусов Кельвина, излучают электромагнитные волны. Испускание электромагнитных волн за счет внутренней энергии тел получило название **тепловое излучение**. В качестве количественной характеристики величины теплового излучения тел обычно используют энергетическую светимость R (поток энергии, испускаемой единицей поверхности излучающего тела по всем направлениям) и спектральную испускательную способность r_ω или r_λ .

Тепловое излучение состоит из волн различных частот ω (или длин $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$, где c — скорость света). При малом интервале $d\omega$ поток $dR_\omega = r_\omega d\omega$. Энергетическая светимость связана со спектральной испускательной способностью соотношением:

$$R = \int_0^\infty r_\omega d\omega = \int_0^\infty r_\lambda d\lambda, \quad (1.1.1)$$

где величины r_ω и r_λ связаны между собою

$$r_\omega = r_\lambda \frac{2\pi c}{\omega^2} = r_\lambda \frac{\lambda^2}{2\pi c}.$$

Экспериментально было установлено, что энергетическая светимость абсолютно черного тела пропорциональна четвертой степени температуры, т.е.

$$R = \sigma T^4, \quad (1.1.2)$$

где $\sigma = 5.64 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \text{К}^4}$ — постоянная Стефана–Больцмана, а соотношение (1.1.2) получило название **закон Стефана–Больцмана**.

Экспериментальное исследование зависимости спектральной испускательной способности r_λ показало, что она имеет максимум, положение которого зависит от температуры тела и может быть найдено из **закона смещения Вина**:

$$T\lambda_{\max} = b, \quad (1.1.3)$$



Рис. 1.1. Экспериментальная зависимость спектральной испускательной способности абсолютно черного тела

где $b = 2.9 \cdot 10^{-3} \text{ мК}$ — постоянная Вина.

Наиболее успешной попыткой получения закон распределения энергии в спектре излучения абсолютно черного тела можно считать формулу, полученную для спектральной испускательной способности Рэлеем и Джинсом.

Основываясь на классическом представлении о равномерном распределении энергии по степеням свободы, для спектральной испускательной способности абсолютно черного тела они получили следующее соотношение:

$$r_{\lambda,T} = \frac{2\pi c}{\lambda^4} kT \text{ или } r_{\nu,T} = \frac{2\pi \nu}{c^2} kT, \quad (1.1.4)$$

где $k = 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}}$ — постоянная Больцмана. Формула (1.1.4) справедлива только в области малых частот и не согласуется с законом Вина. Попытка получить из формулы Рэлея—Джинса закон Стефана—Больцмана вообще приводит к абсурду:

$$R = \int_0^{\infty} r_{\nu,T} d\nu = \frac{2\pi kT}{c^2} \int_0^{\infty} \nu^2 d\nu \rightarrow \infty!$$

Этот результат получил название «**ультрафиолетовой катастрофы**» в классической электродинамике, так как с точки зрения классической физики вывод Рэлея—Джинса был сделан безупречно. Итак, было получено две формулы, описывающие излучение абсолютно черного тела: одна для коротковолновой части спектра (формула Вина), другая — для длинноволновой (формула Рэлея—Джинса). Задача состояла в том, чтобы получить выражение, описывающее тепловое излучение во всем диапазоне частот.

Для того, чтобы объяснить распределение энергии в спектре испускания абсолютно черного тела (рис. 1.1), Макс Планк в 1900 г. выдвинул гипотезу о квантах, согласно которой обмен энергией между электромагнитным излучением и веществом происходит дискретными порциями, или **квантами** (позже их называли фотонами) — подобно частицам, а не волнам (дуализм «волна—частица» для света). Энергия кванта ε связана с частотой ν соотношением $\varepsilon = h\nu$. Коэффициент пропорциональности $h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж с}$,

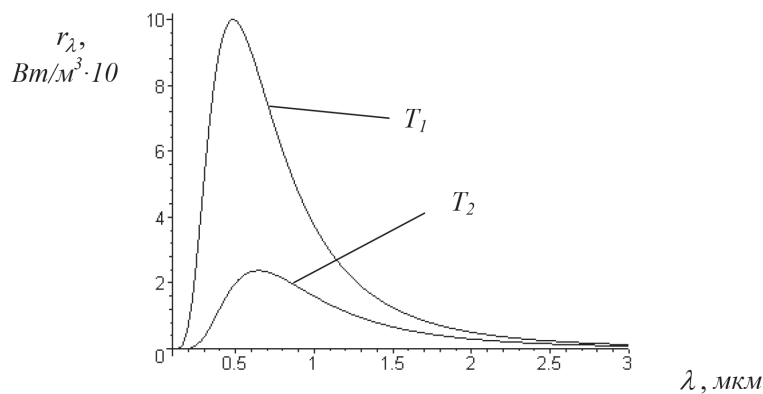


Рис. 1.2. Распределение энергии в спектре испускания нагретого тела, рассчитанное по формуле Планка. $T_1 = 6000 \text{ К}$, $T_2 = 4500 \text{ К}$.

названный впоследствии **постоянной Планка**, имеет размерность действия и явился новой фундаментальной физической константой, специфической для микромира. Исходя из этого предположения, Планк вывел формулы для распределения энергии в спектре испускания нагретых тел

$$r_{\omega} = \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) - 1} \quad (1.1.5)$$

или

$$r_{\lambda} = \frac{4\pi^2 c^2 \hbar}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{2\pi c h}{\lambda kT}\right) - 1}. \quad (1.1.6)$$

¹На практике очень часто при расчетах используют не частоту ν , а круговую частоту $\omega = 2\pi\nu$, при этом энергия кванта $\varepsilon = \frac{\hbar \omega}{2\pi} = \hbar \omega$, где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Формулы (1.1.5–1.1.6), носящие в настоящее время название **формул Планка**, хорошо согласуются с экспериментальными результатами во всем диапазоне длин волн или частот (см. рис 1.2). Интегрируя формулу Планка по частоте или длине волны, легко получить закон

Стефана–Больцмана, а дифференцируя по λ или ω и приравнявая нулю производную — закон смещения Вина, причем значения постоянных Стефана–Больцмана и Вина, рассчитанные теоретически с использованием формулы Планка, хорошо совпадают с их величинами, полученными экспериментально. Таким образом, для того, чтобы объяснить распределение энергии при тепловом излучении, Планку пришлось ввести дискретность в испускании света нагретыми телами, т.е. впервые пришлось ввести квантование энергии. Гипотеза Планка получила дальнейшее развитие при объяснении явлений фотоэффекта и эффекта Комптона.

1.1.2. Фотоэлектрический эффект. Эффекта Комптона

Явление образования электронов на поверхности металла, облучаемого светом, получило название **фотоэффекта**. Оно было открыто Г. Герцем в 1887 г. С точки зрения классической физики на электрон, слабо связанный в металле, действует сила

$$\mathbf{F} = -e\mathbf{E}(t), \quad (1.1.7)$$

где $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t)$ — напряжённость электрического поля электромагнитной волны. Уравнение Ньютона для электрона, на который действует излучение, будет иметь вид:

$$m\dot{\mathbf{v}}(t) = -e\mathbf{E}_0 \cos(\omega t) \quad (1.1.8)$$

Проинтегрируем его, взяв простейшее начальное условие $v(0) \approx 0$:

$$\mathbf{v}(t) = -\frac{e\mathbf{E}_0}{m\omega} \sin(\omega t) \quad \Rightarrow \quad v^{max} = \frac{eE_0}{m\omega}, \quad T_e^{max} = \frac{e^2 E_0^2}{2m\omega^2}. \quad (1.1.9)$$

Итак, расчёты приводили к тому, что максимальная кинетическая энергия вылетевших электронов должна быть обратно пропорциональна частоте электромагнитного излучения ω и пропорциональна интенсивности света E_0^2 .

Экспериментальное изучение фотоэффекта, начатое А.Г. Столетовым в 1888 году показало, что максимальная энергия выбиваемых из металлов электронов прямо пропорциональна частоте падающего света ω и не зависит от E_0^2 . При уменьшении частоты падающего света ниже определённого значения ω_k , электроны вообще перестают вылетать из металлов (**красная граница фотоэффекта**). У каждого металла, ω_k было своим.

Возникшее противоречие между теорией и экспериментом разрешил А. Эйнштейн² в 1905 году благодаря полному отказу от волновой теории света в этом явлении, предположив, что свет не только *излучается и поглощается порциями*, но и *распространяется как*

²Чтобы понять революционность идеи Эйнштейна в решении проблемы, напомним непрложные положения классической физики о частицах и волнах, которые он нарушил.

- В природе существуют два вида движения — это движение частиц и волн и эти движения не переходят друг в друга.
- Частица — локализована, волна — протяжённая, нелокализована.
- Движение частиц связано с переносом вещества и/или электрического заряда; движение волны не связано с переносом вещества или электрического заряда.

частица, получившая название **фотона**. Тем самым подтвердилась гипотеза И. Ньютона XVII века о корпускулярной природе света!

Фотон у взаимодействует с атомом A вещества таким образом, что сам он поглощается, а один из электронов вылетает из атома, который становится ионом A^+ :

$$\gamma + A \rightarrow e^- + A^+. \quad (1.1.10)$$

Законы сохранения импульса и энергии для такого процесса имеют вид:

$$\mathbf{P}_\gamma + \mathbf{P}_A = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_A^+, \quad E_\gamma + E_A = E_e + E_A^+.$$

Поскольку происходит превращение энергии в вещество, постольку в законе сохранения надо учитывать полные энергии частиц. В системе отсчёта, где атом покоится:

$$E_\gamma + m_A c^2 = m_e c^2 + T_e + m_A^+ c^2 + T_A^+ \Rightarrow E_\gamma = T_e + (m_e + m_A^+ - m_A) c^2 + \frac{(\mathbf{P}_A^+)^2}{2m_A^+}.$$

Оценим величину T_A^+ . Из закона сохранения импульса имеем $|\mathbf{P}_\gamma| \geq |\mathbf{P}_A^+|$, и:

$$T_A^+ = \frac{(\mathbf{P}_A^+)^2}{2m_A^+} \leq \frac{\mathbf{P}_\gamma^2}{2m_A^+} = \frac{E_\gamma^2}{2m_A^+ c^2}. \quad (1.1.11)$$

Очевидно, что последняя величина мала по сравнению с энергией покоя атома. Пренебрегая T_A^+ , получим:

$$E_\gamma \approx T_e + U_I, \quad (1.1.12)$$

$U_I = (m_e + m_A^+ - m_A) c^2 \geq 0$ — потенциал ионизации атома вещества. При некоторых ν , как следует из приближённого равенства $h\nu \approx T_e + U_I$, $T_e = 0$ и электроны перестают вылетать из металлов. Интенсивность света (количество фотонов) никак не влияет на величину кинетической энергии электронов, что и было отмечено в эксперименте.

Комптоновское рассеяние — это явление упругого рассеяния электромагнитной волны рентгеновского диапазона на свободных или слабо связанных электронах. Впервые его обнаружил американский физик Артур Комптон в 1922 году.

По классической теории (*пудинговая модель атома* Дж. Томсона, 1897г.) электрон, под действием переменной силы, обусловленной электрической составляющей электромагнитной волны (1.1.7), совершает вынужденные колебания с той же частотой ω , что и вынуждающая сила. В результате таких колебаний, сам электрон излучает электромагнитную волну той же самой частоты. Иначе, частота падающего света ω_i — должна была бы быть равной частоте рассеянного света ω_f и не зависеть от угла рассеяния θ .

Комптон в проведённом им эксперименте (1923 г) получил результат, изображённый на рис. 1.3. Объяснение своим результатам он дал сам, используя представление Эйнштейна о распространении света в виде квантов. Электромагнитное излучение рентгеновского

-
- Свободные частицы движутся прямолинейно, а количества движения нескольких частиц складываются по правилу сложения векторов: $\sum_n \mathbf{P}_n$. Волна распространяется не прямолинейно, огибая препятствия (дифракция), а сложение нескольких волн приводит к сложному явлению интерференции, когда колебания складываются по закону $\left| \sum_n A_n(\omega_n) \right|^2 = A^2$.

диапазона он рассматривал как частицу фотон большой энергии. Тогда процесс комптоновского рассеяния может быть записан как столкновение двух частиц:

$$\gamma + e \rightarrow \gamma' + e'. \quad (1.1.13)$$

Закон сохранения энергии для этого процесса имеет вид:

$$E_\gamma + T_e = E'_\gamma + T'_e,$$

из которого следует:

$$E'_\gamma \equiv \hbar\omega_f = \hbar\omega_i - (T'_e - T_e), \quad (T'_e - T_e) > 0, \quad \omega_f < \omega_i. \quad (1.1.14)$$

Чем больше угол рассеяния фотона, тем интенсивнее он взаимодействует с электроном и тем больше передача энергии конечному электрону, а значит меньше E'_γ и, соответственно, $\omega_f < \omega_i$, как это показал эксперимент.

В этих двух рассмотренных явлениях электромагнитное излучение проявило себя чисто в виде квантов — частиц. Однако во всех других случаях — это волна (Гюйгенс, Френель, Фарадей, Максвелл). Заметим, что в одном и том же явлении свет не проявляет себя одновременно и как частица, и как волна. Свойство света проявлять себя в одном случае (явлении) как волна, а в другом — как частица, было названо **дуальностью** света.

Таким образом, гениальность гипотезы Планка состоит в том, что, как выяснилось, законы взаимодействия света с веществом могут быть объяснены только благодаря дуализму «волна–частица» для света. Причиной же «ультрафиолетовой катастрофы» как раз и являлось игнорирование корпускулярных свойств света.

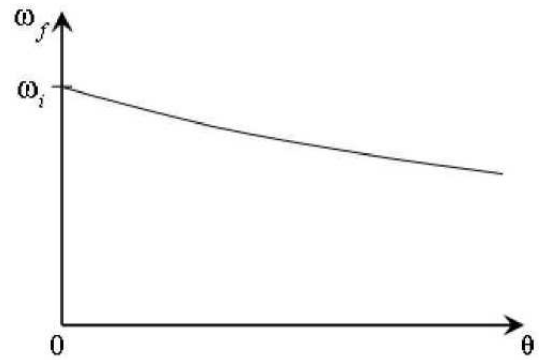


Рис. 1.3. Зависимость частоты рассеянного света от угла рассеяния в опыте Комптона

1.1.3. Закономерности в атомных спектрах. Модель атома Томсона. Опыты Резерфорда

Спектр испускания нагретых твердых тел (тепловое излучение) является сплошным, а спектр испускания разреженных газов состоит из отдельных спектральных линий, и получил название **линейчатого**. Изучение атомных спектров послужило мощным толчком в изучении строения атома. Было замечено, что отдельные линии в линейчатых спектрах расположены не беспорядочно, а объединяются в группы или серии. Наиболее хорошо этот набор прослеживается в спектре простейшего атома — водорода. Экспериментальное исследование спектра показало, что длины волн, излучаемые атомом водорода, могут быть описаны формулой:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right). \quad (1.1.15)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ — целое число, $m = n + 1, n + 2, n + 3, \dots$, а R — постоянная Ридберга, экспериментально установленное значение которой равно $R = 109737.3 \text{ см}^{-1}$. В зависимости от номера n длины волн серий лежат либо в ультрафиолетовой ($n = 1$ — серия

Лаймана), видимой ($n = 2$ — серия Бальмера), инфракрасной ($n = 3$ — серия Пашена, $n = 4$ — Брэкета, $n = 5$ — Пфунда) области спектра.

Оставаясь на позициях классической физики, невозможно было объяснить ни происхождение линейчатых спектров, ни, тем более, сериальные закономерности в атомных спектрах.

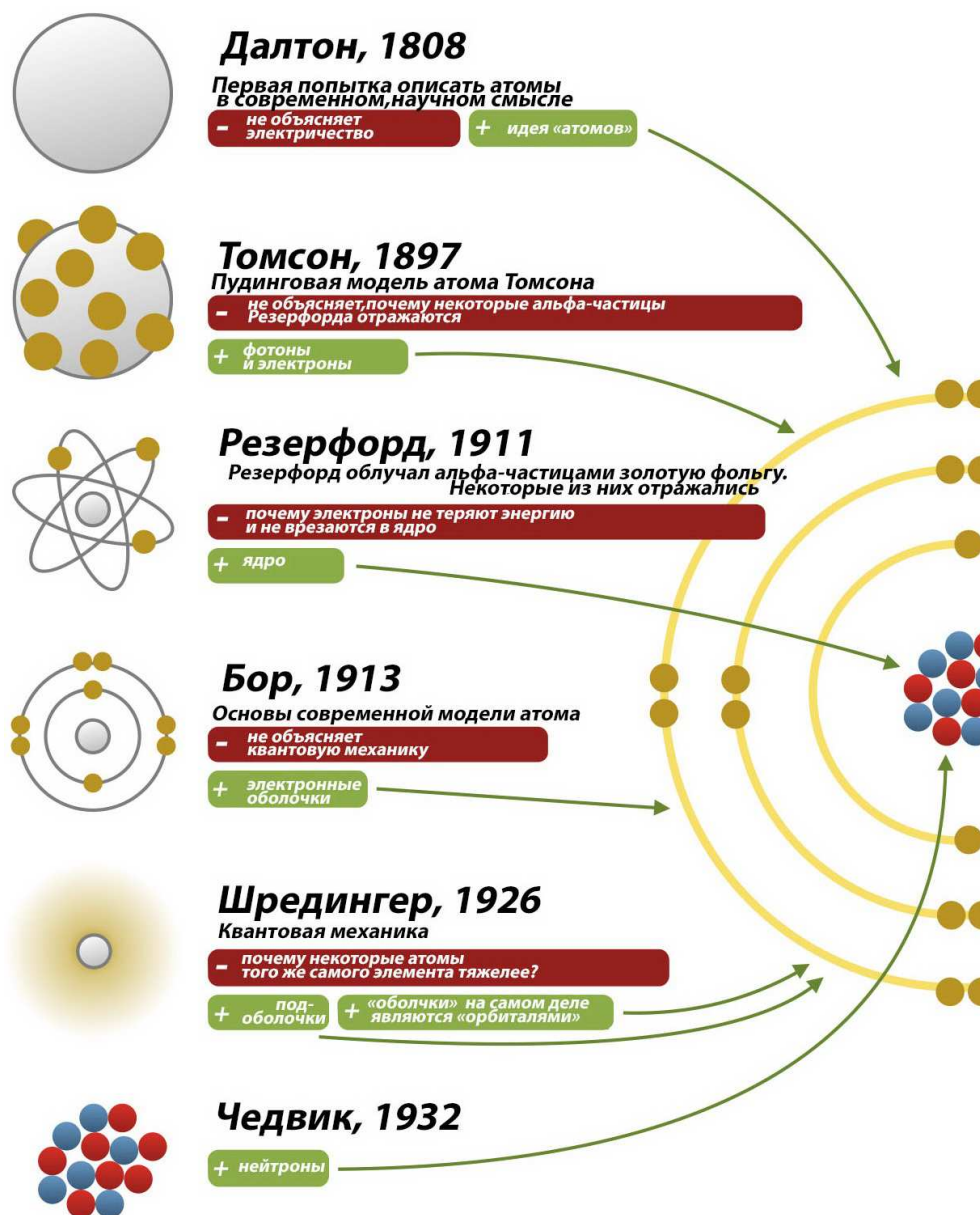


Рис. 1.4. Историческое развитие модели строения атома с учетом вкладов ученых от Дальтона до Чедвика

В 1897 году Томсон предложил модель атома, согласно которой, атом представлял собой равномерно заполненный положительным электричеством шар, внутри которого находится электрон.

Длинам волн в видимой области спектра примерно соответствует частота $\omega \approx 3 \cdot 10^{15}$ рад/с. Численное значение для радиуса атома, в соответствии с теорией Томсона, $R \approx 3 \cdot 10^{-10}$ м, что по порядку величины хорошо согласуется с размерами атома, полученными из газокINETической теории. Несмотря на хорошее совпадение размеров атомов

с их оценками из других теорий, модель атома Томсона потерпела полную неудачу при объяснении результатов опытов Резерфорда.

Резерфорд с сотрудниками исследовал процесс рассеяния α -частиц (дважды ионизированных атомов гелия) при прохождении их через тонкие слои вещества (металлическую фольгу). Оказалось, что большинство α -частиц проходит через фольгу, не испытывая заметных отклонений и только некоторые из них (примерно 1 из 10 000) испытывают заметные отклонения, причем угол рассеяния мог достигать 180° . Анализируя результаты своего опыта, Резерфорд в 1911 г. предложил **планетарную модель** атома. Согласно этой модели, в центре атома находится положительно заряженное тяжелое ядро, вокруг которого по орбитам движутся электроны. Заряд ядра равен суммарному заряду электронов, а его размеры, вычисленные из результатов эксперимента, составляют порядка 10^{-15} м.

Планетарная модель атома Резерфорда, хорошо объяснявшая эксперименты по рассеянию α -частиц, оказалась в полном противоречии с законами классической электродинамики. Электрон, движущийся по замкнутой орбите, движется с ускорением (центростремительным), а согласно законам классической электродинамики, если заряженная частица движется с ускорением, она должна непрерывно излучать электромагнитные волны. Процесс излучения сопровождается потерей энергии, так что электрон, теряя скорость, должен упасть на ядро.

1.1.4. Постулаты Бора. Модель атома водорода по Бору

Датский физик Нильс Бор задался целью связать воедино квантовый характер испускания и поглощения света, закономерности в атомных спектрах и результаты опытов Резерфорда. Для этого ему пришлось ввести ряд постулатов, находящиеся в противоречии с законами классической физики:

- I существуют «стационарные» орбиты, по которым движутся электроны. Электрон, находящийся на стационарной орбите, хотя и движется с ускорением, но не излучает электромагнитные волны;
- II из бесчисленного множества орбит, возможных с точки зрения классической физики, осуществляются только те, у которых момент импульса электрона $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v}$ кратен постоянной Планка $\hbar$, т.е.

$$mv_n r_n = \hbar n, \quad (1.1.16)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ — номер орбиты, v_n — скорость электрона на n -ой орбите, r_n — ее радиус;

- III при переходе с одной орбиты на другую испускается (поглощается) квант с энергией $\hbar\omega$ равной разности энергий на соответствующих орбитах, т.е.

$$\hbar\omega = E_n - E_m, \quad (1.1.17)$$

где E_i — энергия электрона на i -ой орбите.

Используя квантовые постулаты, Бор, исходя из классических представлений о движении электрона, построил теорию строения атома водорода.

В соответствии с этой теорией, радиус n -ой орбиты:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} n^2, \quad (1.1.18)$$

откуда радиус первой орбиты атома получил название **боровский радиус**, величина которого для атома водорода равна $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529 \text{ \AA}$.

Используя соотношение для радиусов орбит (1.1.18) получим выражение значений энергии электрона в следующем виде:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} \frac{1}{n^2}. \quad (1.1.19)$$

Как следует из выражения (1.1.19), энергия электрона в атоме принимает не непрерывный, а дискретный спектр значений. При переходе электрона из состояния m в состояние n излучается квант с энергией:

$$\hbar\omega = E_m - E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (1.1.20)$$

Отсюда длина волны света, испущенного при переходе:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2\pi c\hbar} \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right). \quad (1.1.21)$$

Сравнивая соотношение (1.1.19) с формулой Бальмера (1.1.15), для постоянной Ридберга R получим выражение:

$$R = \frac{1}{2\pi c\hbar} \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2}, \quad (1.1.22)$$

удивительно точно согласующееся с ее экспериментальным значением.

Опыты Франка-Герца (1914 г.) и Штерна-Герлаха (1922 г.) в какой-то мере подтвердили постулаты Бора. Последние позволили также верно воспроизвести энергетический спектр атома водорода — простейшей атомной системы, однако уже для атома гелия данная техника оказалась совершенно непригодной. Таким образом, проблема существования дискретных уровней энергии атома тоже решается не полностью в рамках механики Ньютона, пусть и дополненной новыми постулатами. Причиной неудач в решении проблем атомной физики является то, что постулаты Бора вводились *ad hoc*, т. е. «задним числом», для корректировки существующей теории. Отметим, что такой же гипотезой *ad hoc* было и предположение Планка о наличии микроскопических осцилляторов в нагретом теле при исследовании равновесного излучения. Требовался переход к новой концепции механического движения применительно к микромиру. Такой переход осуществился в течение первой четверти XX века.

1.1.5. Гипотеза де Бройля и её опытное подтверждение

В 1924г. французский князь Л. де-Бройль, находясь под впечатлением обнаруженной дуальности света, высказал «дилетантское» утверждение, что и с массивным движущимся телом можно связать волновое движение, длину волны которого определил выражением:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (1.1.23)$$

где p — импульс тела. Главное в гипотезе де-Бройля то, что движущиеся частицы могут проявлять волновые свойства с длиной волны де Бройля (1.1.23). И что проблемы адекватного описания движения в микромире есть результат игнорирования волновых свойств частиц. То есть, движущаяся частица может проявлять себя в некоторых случаях (ситуациях) как волна. Оставался вопрос — в каких? Ответа на этот вопрос долго ждать не пришлось.

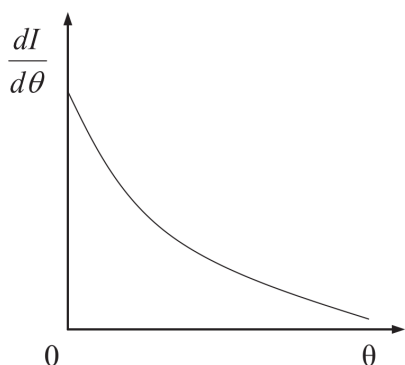


Рис. 1.5. Зависимость интенсивности рассеянных электронов от угла рассеяния от аморфных мишеней

В 1925г. в опытах американских экспериментаторов К. Девиссона и Л. Джермера пучком электронов с энергией до 100 эВ облучали разные вещества — мишени (более подробно опыт будет рассмотрен в следующей главе). Регистрировалась интенсивность рассеянных электронов в зависимости от угла рассеяния θ . Типичная картина зависимости интенсивности рассеянных электронов от угла рассеяния показана на рис. 1.5. Когда же в качестве мишени им случайно попался монокристалл никеля, они, вдруг, обнаружили не монотонное уменьшение, а чередования уменьшений с увеличением интенсивности рассеянных электронов с ростом θ . Разумное объяснение этим пикам (см. рис. 1.6) можно было дать только с точки зрения волновой теории. Сначала «волна движущихся электронов» дифрагировала на центрах кристаллической решётки — ионах никеля (пространственная дифракционная решетка), а затем, отражаясь, приходила к наблюдателю от разных центров рассеяния и, интерферируя, давала чередуемое максимумы и минимумы в соответствии с длиной волны движущего электрона, равной $\lambda = h/p_e$. Оказалось, что поведение электронов аналогично поведению электромагнитных волн.

Дальнейшее подтверждение гипотезы де-Бройля в опытах Л.С. Тартаковского и Г. Томсона, наблюдавших дифракционную картину при прохождении пучка быстрых электронов ($E \approx 50$ кэВ) через фольгу из различных металлов. Затем была обнаружена дифракция нейтронов, протонов, атомных пучков и молекулярных пучков. Появились новые методы исследования вещества — нейтронография и электронография и возникла электронная оптика.

Кроме того, в 1913 г. Дж. Франком и Г. Герцем были проведены опыты, в которых изучалось прохождение через пары ртути пучка электронов, ускоренных электрическим полем. В опытах было экспериментально установлено, что при столкновении электронов с атомами, энергия электронов изменяется дискретными порциями. Несколько позднее в 1922 г. О. Штерном и В. Герлахом был выполнен опыт по изучению расщепления узкого пучка нейтральных атомов серебра, проходящего через область с неоднородным магнитным полем. Этот опыт показал, что компоненты магнитного момента атома в направлении внешнего магнитного поля имеют дискретные значения.

Итак, накопленные в первой четверти XX века сведения указывали на следующее:

1. высокоэнергетическое электромагнитное поле и микрочастицы вещества обладают

одновременно свойствами волн и частиц; поэтому их нельзя рассматривать ни как волны, ни как частицы, в обычном смысле этих слов.

2. некоторые физические величины могут принимать только дискретные значения.

В этой связи классическая физика не могла дать ни правильного описания движения микрочастиц, ни объяснить дискретность процессов. Возникла необходимость в создании теории, которая учитывала бы корпускулярно-волновой дуализм и основывалась на представлениях, принципиально отличных от представлений классической физики. Такая теория была построена и называется она квантовой механикой.

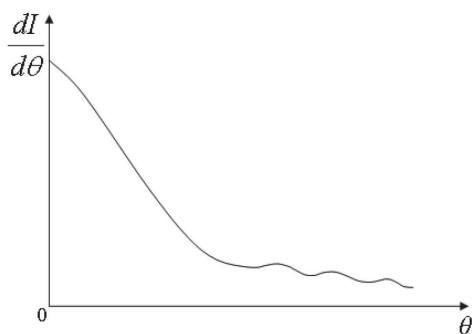


Рис. 1.6. Зависимость интенсивности рассеянных электронов от угла рассеяния от монокристалла никеля

ки микрочастиц, например, спин. В квантовой теории отсутствует лапласов детерминизм, присущий классической механике. Характер движения стал вероятностным, однако вероятностная интерпретация законов микромира принципиально отличается от вероятностной интерпретации законов классической статистической механики. В последней вероятностный подход обусловлен большим числом степеней свободы макросистемы. В микромире же даже в случае единственной частицы ее движение уже носит вероятностный характер.

Квантовая теория была официально признана в 1926 г. после доклада Н. Бора на Конгрессе в Копенгагене. Самым удивительным для того времени фактом было возникающее в новой теории квантование (дискретизация) энергии микрочастицы в случае ее финитного движения (в ограниченной области пространства). Поэтому новая наука стала называться квантовой механикой. Из-за волнового характера движения микрочастиц ее также называли и волновой механикой. На самом же деле наука вышла на новый уровень организации материи — микромир — и законы движения в нем оказались отличными от законов движения макроскопических тел. Поэтому более правильным было бы название «механика микромира», но сохранилось традиционное — квантовая механика.

Отметим, что при создании квантовой механики были использованы два подхода. Первый, заложенный М. Борном, привел в начале 1925 г. к созданию В. Гейзенбергом «матричной механики», которая основывалась на корпускулярных свойствах микрочастиц. Второй, включающий идеи де-Бройля, позволил Э. Шредингеру в конце 1925 г. создать «волновую механику», которая опиралась на волновые свойства микрочастиц. В дальнейшем выяснилось, что это две интерпретации, две разные формы записи квантовой механики.

Гипотеза Л. де-Бройля для частиц вещества перекликалась с гипотезой М. Планка для частиц света. Она была развита позднее М. Борном и приведена им к строгой математической формулировке. Таким образом, идея дуализма «волна-частица» была распространена на все объекты микромира. Далее уточнились понятия измеримости и совместной измеримости физических величин. Потребовалось даже отказаться от некоторых привычных понятий классической механики, например, от понятия траектории микрочастицы (поскольку в общем случае волновое движение несовместимо с движением по траектории!), и ввести новые для понимания физические характеристики

Она внесла гигантский вклад в исследование материи на атомном и субатомном уровне. Квантовая теория дает теоретический базис для создания новых материалов с заданными свойствами. На основе достижений квантовой механики стало возможным использование ядерной энергии и создание лазеров.

Квантовая механика не отменяет целиком положения классической механики. Она лишь переформулировала их применительно к микромиру. Классическая механика является предельным случаем квантовой для макромира (при формальном предельном переходе $\hbar \rightarrow 0$). Отметим, что формулы Планка (1.1.5–1.1.6), как и другие законы микромира, тоже могут быть получены в строгом квантовомеханическом подходе, не использующем гипотезу об осцилляторах.

1.2. Квантовые состояния

1.2.1. Волновые функции

Принципиальное различие между классическим и квантовым описанием проявляется уже на начальном этапе построения теории движения микрочастиц. Как и в классической механике, прежде чем анализировать физические характеристики данной квантовой системы и их изменение с течением времени, необходимо указать способ задания ее состояния в определенный момент времени t . Механическое состояние классической системы в момент времени t полностью определяется заданием ее обобщенных координат $q_i(t)$ и скоростей $\dot{q}_i(t)$ (или импульсов $p_i(t)$) в этот момент. Число этих величин равно удвоенному числу степеней свободы системы.

В квантовой механике задание состояния системы является значительно менее подробным (к тому же, ввиду отсутствия траектории у квантовой частицы ее координата и импульс вообще не могут иметь одновременно определенных значений). Подобно тому, как начальное состояние классической системы может быть различным (в зависимости от величин $q_i(0)$ и $p_i(0)$), квантовая система в начальный момент времени также может быть приготовлена в различных состояниях, отличающихся, например, значениями (или даже числом) физических величин, которые могут быть одновременно измерены для системы в этих состояниях. В данный момент мы пока не можем сказать ничего более определенного о свойствах конкретного квантового состояния и в дальнейшем будем неоднократно уточнять данное понятие. Однако общим для любого квантового состояния является математический способ его задания (изображения): квантовое состояние всегда изображается с помощью волновой функции - некоторой комплексной функции координат и времени³ $\Psi(\xi, t)$ (ξ — совокупность всех обобщенных координат; для частицы в трехмерном евклидовом пространстве $\xi = \mathbf{r}$; в общем случае число обобщенных координат равно числу степеней свободы квантовой системы). Для каждой конкретной квантовой системы класс функций $\Psi(\xi, t)$, которые могут описывать ее все возможные (т. е. физически реализуемые) состояния, достаточно широкий и на математическом языке эти функции образуют гильбертово пространство $\mathbb{L}^2$. Приведем простейший пример квантового состояния и соответствующей волновой функции. Для описания движения свободной (т. е. не подверженной действию внешних сил) частицы с заданным импульсом $\mathbf{p}$ (вот первый пример

³В качестве аргумента (динамической переменной) волновой функции можно выбрать не только координату, но и другие величины: импульс, энергию и т.д.

квантового состояния!) Л. де-Бройль предложил использовать плоскую волну:

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = C \exp\left(i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r} - Et}{\hbar}\right), \quad (1.2.1)$$

где m и $E = \mathbf{p}^2/2m$ — масса и энергия частицы, а C — некоторая постоянная. Функцию (1.2.1) принято называть **волной де-Бройля**. Ее частота ω и длина λ связаны соответственно с энергией и импульсом частицы такими же, как и у фотона, соотношениями:

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}. \quad (1.2.2)$$

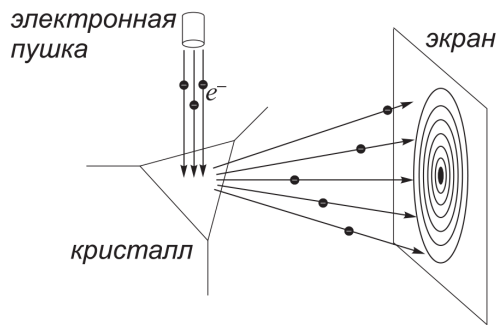


Рис. 1.7. Схема эксперимента Дэвиссона и Джермера

В 1924 г. гипотеза де-Бройля являлась постулативной. Она перекликалась с гипотезой Планка в смысле дуализма «волна–частица», но логически полностью противоположна ей. Если Планк приписывал электромагнитному полю присущие веществу корпускулярные свойства, то де-Бройль поступил наоборот: он предположил, что частицы вещества при определенных условиях проявляют волновые свойства, присущие полю.

Типичные значения длины волны де Бройля для электрона, ускоренного электрическим полем с разностью потенциалов в диапазоне $1 \div 10^4$ эВ, $\lambda \sim 0.1 \div 10$ Å. Поэтому для наблюдения волновых свойств электронов оптические дифракционные решетки непригодны. В кристаллах же ионы расположены упорядоченно на расстояниях $4 \div 5$ Å. Поэтому кристаллические решетки являются и естественными дифракционными решетками в диапазоне длин волн де-Бройля⁴. В 1927 г. Дэвиссон и Джермер поставили такой эксперимент (рис. 1.7) и впервые обнаружили дифракционную картину в угловом распределении электронов.

В общем случае (т. е. не только для свободного движения) волновая функция находится из решения соответствующего линейного однородного дифференциального уравнения, поэтому она определяется с точностью до произвольного постоянного множителя — нормировочной константы. Если волновые функции отличаются только постоянным множителем, то соответствующие им состояния физически эквивалентны.

Волновая функция сама по себе является ненаблюдаемой величиной⁵. М. Борн в 1926 г. предложил следующую вероятностную интерпретацию волновой функции $\Psi(\xi, t)$: квадрат ее модуля пропорционален плотности вероятности обнаружения частицы в момент времени t в точке с координатой ξ ;

$$|\Psi(\xi, t)|^2 \equiv \Psi^*(\xi, t)\Psi(\xi, t) \sim \omega(\xi, t), \quad (1.2.3)$$

т.е. волновую функцию следует толковать статистически.

Для понимания данного утверждения проделаем мысленный эксперимент. Будем пропускать монохроматический пучок электронов сквозь две узкие щели, позади которых располагается фотопластинка (дифракция на двух щелях). При этом на фотопластинке будет наблюдаться дифракционная картина (рис. 1.8а), т. е. движение электронов подобно волновому. Затем поставим этот же эксперимент с более низкой интенсивностью пучка

⁴Для наблюдения типичных волновых явлений (дифракции и интерференции) необходимо выполнение соотношения $\lambda \sim d$, где d — постоянная решетки.

⁵С ненаблюдаемыми величинами сталкивались и ранее: например, в электродинамике ненаблюдаемыми величинами являются потенциалы электромагнитного поля.

(пропуская практически по одному электрону с той же самой энергией). На фотопластинке в случайном порядке возникнут отдельные пятна в местах электронных ударов (рис. 1.8б). Однако с увеличением времени экспозиции эти пятна складываются в сплошные полосы, т.е. возникает та же самая дифракционная картина, что и на рис. 1.8а, подтверждая вероятностный характер движения в микромире. Реальный эксперимент такого рода был поставлен в 1949 г. в Физическом институте Академии наук СССР (Фабрикант, Биберман, Сушкин) и подтвердил гипотезу М. Борна.

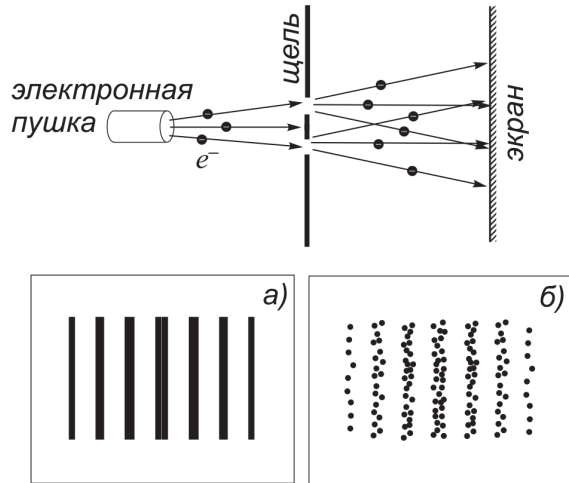


Рис. 1.8. Дифракция пучка электронов на двух щелях

В состояниях финитного движения частица локализована в конечной области пространства, так что надлежащим выбором нормировочной константы соотношение (1.2.3) можно превратить в строгое равенство:

$$|\Psi(\xi, t)|^2 \omega(\xi, t). \quad (1.2.4)$$

Согласно теории вероятностей, условие нормировки для волновой функции финитного движения можно сформулировать следующим образом:

$$\int |\Psi(\xi, t)|^2 d\xi = 1, \quad (1.2.5)$$

где интегрирование ведется по всему конфигурационному пространству (достоверное событие). Интеграл в (1.2.5) конечен, только если функция $|\Psi(\xi, t)|^2$ на больших расстояниях спадает достаточно быстро. В состояниях инфинитного движения, в частности, описываемых волной де-Бройля, этот интеграл расходится, поэтому ниже условие нормировки для этого случая будет сформулировано иным образом. Там, где это не оговорено отдельно, мы будем считать волновые функции нормированными на единицу. Из условия (1.2.5) видно, что даже нормированная волновая функция определяется не однозначно, а с точностью до произвольного постоянного фазового множителя $e^{i\delta}$, который выбирается так, чтобы по возможности упростить вид волновой функции.

У волновой функции нет универсальной размерности. Ее размерность определяется только элементом интегрирования:

$$[\Psi(\xi, t)] = [d\xi]^{-1/2}. \quad (1.2.6)$$

Только при выполнении (1.2.6) интегральное выражение в (1.2.5) будет безразмерным.

Чтобы волновая функция являлась объективной характеристикой состояния микрочастицы, она должна удовлетворять ряду ограничительных условий. Функция Ψ , характеризующая вероятность обнаружения микрочастицы в элементе объема, должна быть:

- *конечной* (вероятность не может быть больше единицы);
- *однозначной* (вероятность не может быть неоднозначной величиной);
- *непрерывной* (вероятность не может меняться скачком).

Укажем на существенное отличие квантового движения от распространения истинной волны (например, электромагнитной). Если имеются N источников электромагнитных

волн, то результирующая волна будет по-прежнему зависеть только от одной пространственной переменной. В случае системы N микрочастиц ее полная волновая функция будет зависеть от N пространственных переменных: $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t)$. Все предыдущие выводы, а также формулы (1.2.1)-(1.2.6) легко обобщаются на этот случай. Теперь, однако, в качестве элемента интегрирования следует взять $d\xi = d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$ — элемент так называемого конфигурационного пространства.

1.2.2. Принцип суперпозиции состояний

Как уже говорилось выше, *всякое состояние квантовой системы описывается соответствующей волновой функцией Ψ_α , где индекс α указывает набор параметров, характеризующих данное состояние и отличающих его от других возможных квантовых состояний той же самой системы.* Это положение является **первым постулатом** в формальной схеме построения квантовой механики и дает математический способ описания квантовых состояний. Утверждается, что *волновые функции всех возможных состояний квантовой системы образуют гильбертово пространство $\mathbb{L}^2$* ⁶. Скалярное произведение двух функций Ψ и Φ в этом пространстве определяется следующим образом:

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int \Psi^*(\xi) \Phi(\xi) d\xi. \quad (1.2.7)$$

Обозначение скалярного произведения символом $\langle \Psi | \Phi \rangle$ называется дираковской скобкой. Дираковский формализм часто позволяет упростить и унифицировать запись математических выкладок в квантовой теории. В частности, условие нормировки (1.2.5) в дираковских обозначениях имеет вид

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int \Psi^*(\xi) \Psi(\xi) d\xi = 1. \quad (1.2.8)$$

Вторым постулатом квантовой теории, имеющим принципиальное значение для понимания физики квантовых явлений, является **принцип суперпозиции состояний**. Он утверждает: *если квантовая система может находиться в состояниях с волновыми функциями Ψ_1 и Ψ_2 , то она может находиться и в состоянии с волновой функцией*

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2, \quad (1.2.9)$$

где C_1 и C_2 — произвольные комплексные константы. Состояние Ψ называется суперпозицией состояний Ψ_1 и Ψ_2 .

Из принципа суперпозиции следует, в частности, что уравнение для волновой функции должно быть линейным, а также парадоксальный с точки зрения классической механики факт, что физические величины, имеющие определенные значения в состояниях Ψ_1 и Ψ_2 , могут не иметь определенного значения в состоянии Ψ (которое также является физически реализуемым состоянием системы!). В качестве примера снова рассмотрим волну де Бройля (1.2.1). Рассмотрим теперь суперпозицию двух волн де Бройля с одной и той же энергией (для простоты) и различными по направлению импульсами p_1 и p_2 (модули которых одинаковы):

$$\Psi(\mathbf{r}) = C_1 e^{i\mathbf{p}_1 \mathbf{r} / \hbar} + C_2 e^{i\mathbf{p}_2 \mathbf{r} / \hbar},$$

⁶множество интегрируемых с их квадратами функций

где временной множитель опущен. При $p_1 = p_2$ эту функцию невозможно привести к виду (1.2.1), т.е. состоянию, являющемуся суперпозицией волн де-Бройля, нельзя приписать определенное значение импульса.

1.2.3. Нормировка волн де-Бройля и некоторые ее свойства

При описании свободной частицы в виде волны де-Бройля (1.2.1) возникают две трудности.

Первая связана с невозможностью нормировать данную функцию условием (1.2.5), поскольку $|\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)|^2 = |C|^2 = \text{const}$ и интеграл (1.2.5) по всему пространству расходится. Эта расходимость физически обусловлена тем, что в состояниях (1.2.1) все положения частицы равновероятны.

Найдем константу C . Искусственно ограничим область движения частицы большим объемом в форме куба, длина ребра которого L , так что интегрирование будет вестись по ограниченному объему L^3 . Введем декартовы координаты, оси которых совпадают с ребрами куба (рис. 1.9). При больших L (по сравнению с длиной волны λ) влиянием стенок куба на движение частицы можно пренебречь. Поэтому подчиним (1.2.1) периодическим граничным условиям:

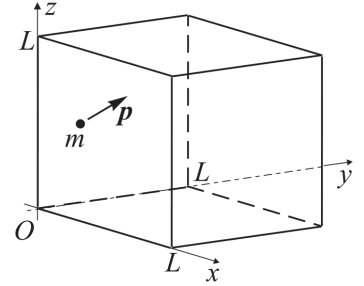


Рис. 1.9.

$$\Psi_{\mathbf{p}}(x, y, z) = \Psi_{\mathbf{p}}(x + L, y, z) = \Psi_{\mathbf{p}}(x, y + L, z) = \Psi_{\mathbf{p}}(x, y, z + L)^7. \quad (1.2.10)$$

Волновая функция (1.2.10), переписанная через волновой вектор $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, примет вид

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = C e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = C e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}. \quad (1.2.11)$$

Вследствие условия (1.2.10), вектор $\mathbf{k}$ в (1.2.11) может принимать лишь дискретные значения:

$$\mathbf{k} = \{k_x, k_y, k_z\} = \frac{2\pi}{L} \{n_x, n_y, n_z\}, \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}. \quad (1.2.12)$$

Таким образом, при движении в ограниченном объеме импульс волны де-Бройля квантуется. Легко заметить, однако, что при неограниченном увеличении объема (т. е. при $L \rightarrow \infty$) эта дискретность исчезает.

В ограниченном объеме нормировочная константа C вычисляется из условия (1.2.5), так что нормированная на единицу в объеме V волна де-Бройля выглядит следующим образом:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (1.2.13)$$

Ее размерность удовлетворяет условию (1.2.6).

Система функций (1.2.13) обладает свойствами ортогональности

$$\int_V \Psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3r = \frac{1}{V} \int_V e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d^3r = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \delta_{n'_x n_x} \delta_{n'_y n_y} \delta_{n'_z n_z} \quad (1.2.14)$$

⁷ время t в аргументе опускаем, поскольку временной множитель в (1.2.10) сокращается

и полноты

$$\sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^8. \quad (1.2.15)$$

Пусть теперь частица в момент времени $t = 0$ находится в состоянии с волновой функцией $\Psi(\mathbf{r})$, удовлетворяющей периодическим граничным условиям (1.2.10) и, подобно волне де-Бройля (1.2.13), нормированной на единицу внутри большого куба с ребром L . Тогда $\Psi(\mathbf{r})$ можно разложить в ряд Фурье по волнам де-Бройля (1.2.13):

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (1.2.16)$$

Коэффициенты $C_{\mathbf{k}}$ находятся в соответствии с условием ортогональности (1.2.14):

$$C_{\mathbf{k}} = \int_V \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3r = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}) d^3r. \quad (1.2.17)$$

Таким образом, волновую функцию произвольного состояния микрочастицы можно представить в виде суперпозиции волн де-Бройля.

Вторая трудность связана с понятием скорости распространения волны. Пусть v — классическая скорость частицы. Тогда фазовая скорость волны де-Бройля (а никакой другой скорости у волны де-Бройля попросту нет!)

$$v_{\phi} = \frac{w}{k} = \frac{E}{p}, \quad (1.2.18)$$

где $k = p/\hbar$ — волновой вектор, не совпадает с v . Действительно, в нерелятивистском случае ($E = p^2/2m$):

$$v_{\phi} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2},$$

тогда как в релятивистском случае ($E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$):

$$v_{\phi} = \frac{E}{p} = \sqrt{c^2 + \frac{m^2 c^4}{p^2}} > c. \quad (1.2.19)$$

В области микромира нас интересует релятивистский случай, то оказывается, что фазовая скорость волн де-Бройля больше скорости света в вакууме. Как известно, фазовая скорость волн может быть как меньше, так и больше c в отличие от групповой скорости волн.

Связь групповой скорости с фазовой определяется через формулу Рэлея:

$$u = v_{\phi} - \lambda \left(\frac{dv_{\phi}}{d\lambda} \right). \quad (1.2.20)$$

В том случае, если $dv_{\phi}/d\lambda > 0$ имеют дело с нормальной дисперсией, и $u < v_{\phi}$. Так как фазовая скорость волн де-Бройля оказывается зависящей от длины волны: $v_{\phi} \sim \lambda$

⁸Векторы $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ выбираются в соответствии с (1.2.12):

$$\sum_{\mathbf{k}} (\dots) = \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} (\dots)$$

(1.2.19), то дебройлевские волны обладают дисперсией даже в вакууме. В соответствии с современной физической интерпретацией фазовая скорость дебройлевских волн имеет чисто символическое значение, поскольку эта интерпретация относит их к числу принципиально ненаблюдаемых величин.

Групповую скорость волны де-Бройля свободной частицы в релятивистском случае можно найти по формуле:

$$u = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}} = \frac{pc^2}{E} = \frac{mvc^2}{mc^2} = v. \quad (1.2.21)$$

Следовательно, групповая скорость волн де-Бройля равна скорости частицы. Этот результат имеет существенное значение и сыграл в свое время важную роль в развитии принципиальных основ квантовой механики. Дело в том, что после обнаружения волновых свойств у частиц вещества и установления корпускулярно-волновой двойственности свойств частиц была сделана попытка рассматривать частицы как волновые пакеты сколь угодно малой протяженности и таким образом «освободиться» от двойственности свойств частиц. Это как будто соответствовало тому, что частица локализована в данный момент времени в определенной малой области пространства. С другой стороны, эта гипотеза как будто подтверждалась тем, что групповая скорость распространения максимума амплитуды «узкого» пакета совпадает со скоростью частицы. Однако эта гипотеза оказалась ошибочной. Дело в том, что все составляющие пакет синусоидальные волны распространяются независимо друг от друга. При наличии большой дисперсии, свойственной волнам, связанным с частицами вещества, фазовые скорости распространения отдельных составляющих волнового пакета различны и волновой пакет «расплывается». Для частиц с массой порядка массы электрона время расплывания пакета оказывается ничтожно малым (порядка 10^{-26} с!), в то время как сама частица является стабильным образованием. Таким образом, попытка «избавиться» от корпускулярно-волновой двойственности свойств частиц вещества с помощью рассмотрения их как волновых пакетов не удалась. Причина этого весьма глубокая — двойственность свойств частиц является объективной закономерностью, проявляющейся в многочисленных явлениях, изучаемых физикой.

1.3. Физические величины в квантовой теории

Рассмотрим частицу в произвольном состоянии $\Psi(\mathbf{r})$. Вычислим вначале среднее значение координаты $\langle \mathbf{r} \rangle$ в этом состоянии. В соответствии с (1.2.4), плотность вероятности различных значений координаты $\omega(\mathbf{r})$ дается квадратом модуля волновой функции. Поэтому, пользуясь теоремой о математическом ожидании, получаем:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int_V \mathbf{r} \omega(\mathbf{r}) d^3r = \int_V \Psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \Psi(\mathbf{r}) d^3r. \quad (1.3.1)$$

Любое произведение декартовых компонент $\mathbf{r}$ также усредняется в соответствии с (1.3.1):

$$\langle x^{n_x} y^{n_y} z^{n_z} \rangle = \int_V x^{n_x} y^{n_y} z^{n_z} \omega(\mathbf{r}) d^3r = \int_V \Psi^*(\mathbf{r}) x^{n_x} y^{n_y} z^{n_z} \Psi(\mathbf{r}) d^3r,$$

где n_x, n_y, n_z — произвольные числа. Поэтому после разложения функции $F_1(\mathbf{r})$ в ряд Тейлора мы приходим к следующей формуле:

$$\langle F_1(\mathbf{r}) \rangle = \int_V \Psi^*(\mathbf{r}) F_1(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3r. \quad (1.3.2)$$

Среднее значение импульса в состоянии $\Psi(\mathbf{r})$ невозможно вычислить по формуле (1.3.1) с простой заменой $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{p}$, поскольку нам пока неизвестно распределение импульсов в данном состоянии. Чтобы получить его, воспользуемся разложением (1.2.16), а также условиями нормировки и ортогональности волн де-Бройля (1.2.14):

$$\int_V |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1 = \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}'}^* c_{\mathbf{k}} \underbrace{\int_V \Psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3r}_{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} = \sum_{\mathbf{k}} |c_{\mathbf{k}}|^2. \quad (1.3.3)$$

Полученное соотношение $\sum_{\mathbf{k}} |c_{\mathbf{k}}|^2 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} = 1$ похоже на условие нормировки в теории вероятностей. Поэтому по аналогии с $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ величине $\omega_{\mathbf{k}}$ можно придать смысл вероятности обнаружения значения импульса $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ в состоянии $\Psi(\mathbf{r})$ ⁹.

Подобно координате среднее значение импульса вычисляем по теореме о математическом ожидании с распределением $\omega_{\mathbf{k}}$. Для нахождения $c_{\mathbf{k}}$ воспользуемся (1.2.17):

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \hbar \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \omega_{\mathbf{k}} = \hbar \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} c_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}} = \hbar \sum_{\mathbf{k}} \iint \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') \mathbf{k} \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') d^3r d^3r'.$$

Преобразуем выражение для $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$: $\mathbf{k} \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') = \frac{1}{\sqrt{V}} \nabla e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'} = i \nabla_{\mathbf{r}'} \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}')$, а действие оператора $\nabla_{\mathbf{r}'}$ перенесем с функции $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$ на $\Psi(\mathbf{r}')$ интегрированием по частям. В результате получим:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} \rangle &= i\hbar \sum_{\mathbf{k}} \iint \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'} \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') d^3r d^3r' = \\ &= \iint \underbrace{\sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}_{\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \Psi^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}'}) \Psi(\mathbf{r}') d^3r' d^3r = \int_V \Psi^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla) \Psi(\mathbf{r}) d^3r. \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

По аналогии с соответствующими вычислениями $\langle F_1(\mathbf{r}) \rangle$ для $\langle F_2(\mathbf{p}) \rangle$ получаем:

$$\langle F_2(\mathbf{p}) \rangle = \int_V \Psi^*(\mathbf{r}) F_2(-i\hbar \nabla) \Psi(\mathbf{r}) d^3r. \quad (1.3.5)$$

Выражения (1.3.2) и (1.3.5) имеют одинаковую структуру:

$$\langle F \rangle = \int_V \Psi^*(\mathbf{r}) \hat{F}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3r. \quad (1.3.6)$$

⁹в данном случае распределение по импульсам получается дискретным в отличие от непрерывного распределения по координатам.

Конструкция $\hat{F}(\mathbf{r})$ называется **оператором величины** F . Так, оператор координаты — это просто вектор $\mathbf{r}$: $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ (1.3.2); оператор импульса $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ содержит операцию векторного дифференцирования (1.3.5).

Если обобщить соотношение (1.3.6) на произвольную физическую величину F

$$\langle F \rangle = \int \Psi^*(\xi) \hat{F} \Psi(\xi) d\xi, \quad (1.3.7)$$

то $\langle F \rangle$ называют **средним значением физической величины** F в состоянии $\Psi(\xi)$. Функция $\Psi(\xi)$ предполагается нормированной на единицу условием (1.2.5).

Если соотношение (1.3.7) выполняется для произвольного состояния, то $\hat{F}$ называется оператором величины F . Таким образом, всякой физической величине в квантовой механике сопоставляется соответствующий оператор, так что среднее значение этой величины в произвольном квантовом состоянии микросистемы дается формулой (1.3.7)¹⁰. Как правило, для обозначения оператора используется та же буква, что и для соответствующей физической величины, но только со шляпкой.

С математической точки зрения оператор представляет собой некий способ перехода от одной волновой функции к другой. Задать оператор означает указать такой способ. Запись $\hat{F}\Psi(\xi)$ означает действие оператора $\hat{F}$ на функцию $\Psi(\xi)$, которое в общем случае не сводится к обычному умножению. Результатом действия оператора на функцию будет новая функция:

$$\hat{F}\Psi(\xi) = \Phi(\xi). \quad (1.3.8)$$

В соответствии с определениями оператора (1.3.8) и скалярного произведения в $\mathbb{L}^2$ (1.2.7), формулу (1.3.7) можно переписать в дираковских обозначениях:

$$\langle F \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle. \quad (1.3.9)$$

Оператор всегда задается на определенном множестве (классе) функций. Как правило, это функции из $\mathbb{L}^2$, удовлетворяющие стандартным условиям. Дополнительные требования к классу функций диктуются постановкой конкретной задачи.

1.3.1. Алгебра операторов

Введем правила математических действий над операторами, предполагая, что эти операторы заданы на определенном классе функций.

Равенство двух операторов $\hat{F} = \hat{G}$. Операторы $\hat{F}$ и $\hat{G}$ равны друг другу, если при их действии на одну и ту же произвольную¹¹ функцию $\Psi(\xi)$, из класса, на котором определены рассматриваемые операторы, получаются одинаковые функции:

$$\hat{F}\Psi(\xi) = \hat{G}\Psi(\xi).$$

¹⁰В классической механике физические величины являются обычными вещественными функциями обобщенных координат и обобщенных импульсов

¹¹Требование произвольности функции $\Psi(\xi)$ существенно! Совпадение результатов действия операторов $\hat{F} = -\xi$ и $\hat{G} = \frac{d}{d\xi}$ на функцию $e^{-\xi^2/2}$ не означает равенства $\frac{d}{d\xi} = -\xi$, поскольку оно выполняется не для произвольной функции.

Нулевой оператор $\hat{0}$. Оператор называется нулевым, если при его действии на произвольную функцию $\Psi(\xi)$ результатом является тождественный нуль:

$$\hat{0}\Psi(\xi) \equiv 0.$$

Единичный оператор $\hat{1}$. Оператор называется единичным, если его действие на произвольную функцию $\Psi(\xi)$ не изменяет последнюю:

$$\hat{1}\Psi(\xi) = \Psi(\xi).$$

Умножение оператора на константу: $\alpha\hat{F}$. При умножении оператора на константу получается новый оператор, действие которого на произвольную функцию $\Psi(\xi)$ задается правилом:

$$(\alpha\hat{F})\Psi(\xi) = \alpha(\hat{F}\Psi(\xi)).$$

Сумма операторов: $\hat{F} + \hat{G}$. Суммой операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ называется оператор, действие которого на произвольную функцию $\Psi(\xi)$ заключается в действии на нее каждого оператора по отдельности с последующим сложением результатов:

$$(\hat{F} + \hat{G})\Psi(\xi) = (\hat{F}\Psi(\xi)) + (\hat{G}\Psi(\xi)).$$

Поскольку сумма функций не зависит от порядка следования слагаемых, то сумма операторов подчиняется «переместительному закону»:

$$\hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}.$$

Произведение операторов: $\hat{F}\hat{G}$. Произведением операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ называется оператор, действие которого на произвольную функцию $\Psi(\xi)$ заключается в последовательном действии на нее сначала оператора $\hat{G}$, а затем $\hat{F}$:

$$(\hat{F}\hat{G})\Psi(\xi) = \hat{F}(\hat{G}\Psi(\xi)).$$

В отличие от суммы произведение операторов в общем случае зависит от порядка следования сомножителей: $\hat{F}\hat{G} \neq \hat{G}\hat{F}$, т.е. в общем случае произведение операторов некоммутативно. Если все же имеет место равенство между произведениями $\hat{F}\hat{G}$ и $\hat{G}\hat{F}$, то операторы $\hat{F}$ и $\hat{G}$ называют **коммутирующими**. В квантовой механике оказывается удобным ввести специальную конструкцию, построенную из произведений операторов, — **коммутатор**:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}. \quad (1.3.10)$$

Очевидно, что в случае коммутирующих операторов он становится нулевым оператором. Также вводится **антикоммутатор**:

$$\{\hat{F}, \hat{G}\} = \hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}. \quad (1.3.11)$$

Таким образом, при аналитических действиях с операторами всегда необходимо следить за порядком следования сомножителей в произведениях. Если возникает необходимость изменения порядка сомножителей, то необходимо учитывать коммутационное соотношение между операторами.

Обратный оператор: $\hat{F}^{-1}$. Оператором, обратным к $\hat{F}$, будем называть такой оператор $\hat{F}^{-1}$, для которого выполняется соотношение¹²:

$$\hat{F}^{-1}\hat{F} = \hat{F}\hat{F}^{-1} = \hat{1}.$$

Целая положительная степень оператора: $\hat{F}^n$. Это n -кратное перемножение оператора $\hat{F}$ на себя:

$$\hat{F}^n = \underbrace{\hat{F} \cdot \dots \cdot \hat{F}}_{n \text{ раз}}.$$

Функция от оператора. Если функция $f(z)$ допускает разложение в ряд Тейлора в окрестности нуля $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n$, то, заменив в правой части z на некоторый оператор $\hat{F}$, получим операторную функцию $\hat{f}(\hat{F})$, которая является оператором, действие которого на произвольную функцию $\Psi(\xi)$ определяется следующим образом:

$$\hat{f}(\hat{F})\Psi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{F}^n \Psi(\xi).$$

Отметим, что после вычисления действия оператора Рп на Φ ряд в правой части уже может не суммироваться в аналитическом виде. Функция от оператора уже встречалась ранее (см. (1.3.5)).

1.3.2. Эрмитово сопряжение операторов

Оператор $\hat{F}^+$ называется *эрмитово сопряженным* по отношению к $\hat{F}$, если оба оператора заданы на одном и том же классе функций и для произвольных функций $\Phi(\xi)$ и $\Psi(\xi)$ из этого класса выполняется равенство следующих скалярных произведений:

$$\langle \hat{F}\Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | \hat{F}^+\Psi \rangle, \quad (1.3.12)$$

то есть скалярное произведение функции $\hat{F}\Phi$ на Ψ равно скалярному произведению функции Φ (на которую уже не действует оператор $\hat{F}$) на функцию $\hat{F}^+\Psi$, получаемую из Ψ действием некоторого оператора $\hat{F}^+$, который и называется эрмитово сопряженным к $\hat{F}$. Учитывая свойство скалярного произведения ($\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle^*$) и вводя обозначение $\langle \Psi | \hat{F}\Phi \rangle \equiv \langle \Psi | \hat{F} | \Phi \rangle$, определение (1.3.12) можно переписать в следующем виде:

$$\langle \Phi | \hat{F}^+ | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Phi \rangle^*. \quad (1.3.13)$$

Конструкция $\langle \Phi | \hat{G}^+ | \Psi \rangle$ называется *матричным элементом* оператора $\hat{G}$ между состояниями $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$, которые иногда называются «обкладками». «Обкладки» являются аналогом матричных индексов. В интегральной форме определение (1.3.13) имеет следующий вид:

$$\int \Phi^*(\xi) \hat{F}^+ \Psi(\xi) d\xi = \int \Psi(\xi) \hat{F}^* \Phi^*(\xi) d\xi. \quad (1.3.14)$$

¹²В соответствии с некоммутативностью произведения, запись типа $\frac{\hat{F}}{\hat{G}}$ некорректна. Необходимо использовать обратный оператор: $\hat{F}\hat{G}^{-1}$ либо $\hat{G}^{-1}\hat{F}$ (при этом могут получиться различные результаты).

Все три записи (1.3.12-1.3.14) являются эквивалентными.

Эрмитово сопряжение произведения операторов изменяет порядок следования сомножителей на обратный:

$$(\hat{F}\hat{G})^+ = \hat{G}^+\hat{F}^+. \quad (1.3.15)$$

Оператор называется **самосопряженным**, или **эрмитовым**, если он совпадает со своим эрмитовым сопряжением:

$$\hat{F}^+ = \hat{F}. \quad (1.3.16)$$

Определение эрмитова оператора в интегральной форме на основе (1.3.14) и (1.3.16):

$$\int \Phi^*(\xi) \hat{F} \Psi(\xi) d\xi = \int \Psi(\xi) \hat{F}^* \Phi^*(\xi) d\xi \quad (1.3.17)$$

а также в дираковских обозначениях (1.3.13):

$$\langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Phi \rangle^*, \quad (1.3.18)$$

которое указывает на полную аналогию с эрмитовыми матрицами.

На основании (1.3.15) можно заключить, что для двух эрмитовых операторов:

$$(\hat{F}\hat{G})^+ = \hat{G}\hat{F},$$

т.е. *произведение эрмитовых операторов будет самосопряженным только в случае их коммутации*. Коммутатор и антикоммутатор эрмитовых операторов будут соответственно антиэрмитовым и эрмитовым:

$$[\hat{F}, \hat{G}]^+ = -[\hat{G}, \hat{F}], \quad \{\hat{F}, \hat{G}\}^+ = \{\hat{F}, \hat{G}\}.$$

Оператор $\hat{U}$ называется **унитарным**, если его эрмитово сопряжение совпадает с обратным оператором:

$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^+. \quad (1.3.19)$$

1.3.3. Определенные значения физических величин

Для выполнения принципа суперпозиции оператор физической величины обязан быть *линейным*, т.е. для любых функций Φ , Ψ и комплексной константы α должны выполняться равенства:

$$\hat{F}(\alpha\Psi) = \alpha\hat{F}\Psi, \quad \hat{F}(\Phi + \Psi) = \hat{F}\Phi + \hat{F}\Psi. \quad (1.3.20)$$

Поскольку измерительные приборы дают вещественные значения величины F , ее *среднее значение* $\langle F \rangle$ *обязано быть вещественным в любых состояниях*. Этого можно достичь, потребовав от оператора $\hat{F}$ самосопряженности:

$$\langle F \rangle^* = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \langle F \rangle.$$

Таким образом, *операторы физических величин обязаны быть линейными и эрмитовыми*.

В таблице 1.1 собраны операторы важнейших физических величин, которые используются как в классической, так и в квантовой механике. Существуют и чисто квантовые характеристики состояний микрообъектов, не имеющие классических аналогов, например, **четность** P . Ей соответствует *оператор инверсии* $\hat{I}$.

Таблица 1.1. Операторы основных физических величин

Физическая величина	Оператор
<i>Координата</i>	
$\mathbf{r} = \mathbf{i}x + \mathbf{j}y + \mathbf{k}z = \sum_k \mathbf{e}_k x_k$	$\hat{\mathbf{r}}\Psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r}\Psi(\mathbf{r})$
<i>Импульс</i>	
$\mathbf{p} = \mathbf{i}p_x + \mathbf{j}p_y + \mathbf{k}p_z = \sum_k \mathbf{e}_k p_k$	$\hat{\mathbf{p}}\Psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\Psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\Psi(\mathbf{r})$
<i>Орбитальный момент</i>	
$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix},$ $L_x = yp_z - zp_y,$ $L_y = zp_x - xp_z,$ $L_z = xp_y - yp_x$	$\hat{\mathbf{L}} = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = -i\hbar \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix},$ $\hat{L}_x = -i\hbar \left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right),$ $\hat{L}_y = -i\hbar \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right),$ $\hat{L}_z = -i\hbar \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)$
<i>Кинетическая энергия</i>	
$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$	$\hat{T}\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\Psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\mathbf{r})$
<i>Потенциальная энергия</i>	
$U = U(\mathbf{r}, t)$	$\hat{U}\Psi(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)$
<i>Полная энергия</i>	
$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t)$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}, t)$ оператор Гамильтона
<i>Четность</i>	
P	$\hat{I}\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(-\mathbf{r}, t)$ оператор инверсии

1.3.4. Измеримость физической величины в квантовой механике

Информацию о состоянии микрообъекта можно получить только в результате измерения. Однако измерение физических величин в квантовой и классической механике существенно различается. Прежде всего квантовую систему нужно привести в то состояние, в котором величину F необходимо измерить. Пусть $\Psi(\xi)$ есть волновая функция этого состояния. В результате того или иного измерения состояние микрообъекта разрушается (например, для фиксации летящего электрона на его пути ставят фотопластинку; после взаимодействия с ней этот электрон поглощается и уже не может быть зафиксирован повторно тем же способом). Для повторного измерения квантовую систему необходимо вновь привести в то же самое состояние и т. д. Среднее значение величины F получается усреднением результатов таких многократных измерений. Если известна волновая функция квантовой системы, то среднее значение F вычисляется по формуле (1.3.7).

Такой способ измерения физической величины F дает с математической точки зрения последовательность случайных чисел. Характеристикой их разброса относительно

среднего значения служит *среднеквадратичное отклонение*:

$$\langle (\Delta F)^2 \rangle = \langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle. \quad (1.3.21)$$

Очевидно, что ненулевые значения $\langle (\Delta F)^2 \rangle$ могут получаться даже в случае идеального прибора с нулевой погрешностью. Такая неопределенность в значении величины F есть объективное свойство движения в микромире. Поэтому возникает проблема поиска состояний с *определенными* значениями F . Определенность значения величины F в некотором состоянии квантовой системы означает, что при каждом акте ее измерения в данном состоянии будет получаться *одно и то же значение* этой величины.

Зададимся целью поиска таких состояний Ψ , в которых $\langle (\Delta F)^2 \rangle = 0$. Для этого введем вспомогательный эрмитов оператор $\widehat{\Delta F} = \widehat{F} - \langle F \rangle$ и выполним следующие преобразования:

$$\langle (\widehat{\Delta F})^2 \rangle = \langle \Psi | (\widehat{\Delta F})^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | \widehat{\Delta F} | (\widehat{\Delta F}) \Psi \rangle = \langle (\widehat{\Delta F}) \Psi | (\widehat{\Delta F}) \Psi \rangle = \int |(\widehat{\Delta F}) \Psi(\xi)|^2 d\xi \geq 0.$$

Данная положительно определенная квадратичная форма обращается в нуль только в таких состояниях, для которых $(\widehat{\Delta F}) \Psi(\xi) = 0$, или, в соответствии с определением $\widehat{\Delta F}$,

$$\widehat{F} \Psi(\xi) = \langle F \rangle \Psi(\xi). \quad (1.3.22)$$

Уравнение (1.3.22) является математическим выражением условия измеримости величины F в данном состоянии Ψ : величина F будет измеримой только в таких состояниях, волновая функция которых удовлетворяет уравнению (1.3.22).

Проанализируем математические аспекты уравнения (1.3.22). Из теории операторов известно, что такие функции называются *собственными функциями* оператора. Действие оператора на них заключается в умножении функций на константы — *собственные значения* оператора:

$$\widehat{F} \Psi_F(\xi) = F \Psi_F(\xi). \quad (1.3.23)$$

С математической точки зрения уравнение (1.3.23) — уравнение для собственных функций и собственных значений оператора $\widehat{F}$. Задача состоит в отыскании нетривиальных ($\Psi_F(\xi) \neq 0$) решений уравнения (1.3.23) с заданными граничными условиями. Выбор последних диктуется стандартными условиями, которым подчиняется волновая функция (конечность, однозначность, непрерывность). В общем случае $\widehat{F}$ представляет собой линейный дифференциальный оператор, так что уравнение (1.3.23) является линейным однородным дифференциальным уравнением, как правило не выше второго порядка. Однородность приводит к неоднозначности его решений: они определены с точностью до произвольного постоянного множителя, т. е. должны быть нормированы.

Множество всех собственных значений оператора называется **спектром оператора**. Если этот набор дискретный, то спектр называется *дискретным*, а если заполняет некоторый интервал, — *непрерывным*. Дискретный спектр реализуется при финитном движении, непрерывный — при инфинитном. Существуют и операторы, имеющие одновременно и дискретный, и непрерывный спектр собственных значений.

Пример оператора с дискретным спектром — оператор проекции орбитального момента на ось z , имеющий следующий вид в полярных координатах $\widehat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$:

$$\widehat{L}_z \Psi_{m_l}(\varphi) = \hbar m_l \Psi_{m_l}(\varphi), \quad \Psi_{m_l}(\varphi) = \frac{e^{im_l \varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad m_l = 0, \pm 1, \dots, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi. \quad (1.3.24)$$

Такое квантование наблюдаемых значений физической величины при финитном движении специфично для микромира и не имеет места в классической механике. Пример оператора с непрерывным спектром — оператор проекции импульса $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$:

$$\hat{p}_x \Psi_{p_x}(x) = p_x \Psi_{p_x}(x), \quad \Psi_{p_x}(x) = \frac{e^{ip_x x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \quad x, p_x \in \mathbb{R}. \quad (1.3.25)$$

Рассмотрим для определенности собственное значение F_n из дискретного спектра оператора $\hat{F}$. Если F_n соответствует одна собственная функция $\Psi_n(\xi)$, то такое собственное значение называется *невырожденным*. Если же для собственного значения F_n имеется l линейно независимых собственных функций $\Psi_{n1}(\xi), \dots, \Psi_{nl}(\xi)$,

$$\hat{F}\Psi_{nk}(\xi) = F_n \Psi_{nk}(\xi), \quad k = 1, \dots, f$$

то такое собственное значение называется *вырожденным* с кратностью вырождения f .

Условие (1.3.22) дает *необходимое* и *достаточное* условие измеримости величины F в заданном состоянии Ψ , которое должно быть одной из собственных функций оператора $\hat{F}$. Пока остается открытым вопрос о том, какое же случайное значение величины F дает ее однократное измерение в произвольном состоянии Ψ ? В квантовой теории постулируется *тождественность определенных значений величины F собственным значениям ее оператора*. Другими словами, даже если состояние Ψ не является собственной функцией $\hat{F}$ при измерении величины F в этом состоянии, мы всякий раз будем получать одно из собственных значений оператора $\hat{F}$.

1.3.5. Свойства собственных функций и собственных значений линейного эрмитова оператора. Случай дискретного спектра

Сформулируем общие свойства собственных функций и собственных значений линейного эрмитова оператора $\hat{F}$, предполагая его спектр дискретным:

$$\hat{F}\Psi_n(\xi) = F_n \Psi_n(\xi).$$

1. *Собственные значения вещественны.* Очевидно, что в состоянии Ψ_n среднее значение величины F совпадает с определенным F_n . В случае эрмитова оператора $\hat{F}$ среднее значение величины F всегда вещественно. Отсюда следует и вещественность всех собственных значений.
2. *Собственные функции линейного эрмитова оператора взаимно ортогональны.* Рассмотрим два различных собственных значения: F_n и $F_{n'}$ ($n \neq n'$). Для них справедливы уравнения:

$$\hat{F}\Psi_n(\xi) = F_n \Psi_n(\xi); \quad \hat{F}^* \Psi_{n'}^*(\xi) = F_{n'} \Psi_{n'}^*(\xi)^{13}. \quad (1.3.26)$$

Умножим первое уравнение в (1.3.26) слева на $\Psi_{n'}^*(\xi)$, второе — на $\Psi_n(\xi)$, проинтегрируем по ξ и вычтем одно из другого:

$$\langle \Psi_{n'} | \hat{F} | \Psi_n \rangle - \langle \Psi_n | \hat{F} | \Psi_{n'} \rangle^* = \underbrace{(F_n - F_{n'})}_{\neq 0} \langle \Psi_{n'} | \Psi_n \rangle. \quad (1.3.27)$$

¹³над $F_{n'}$ отсутствует знак комплексного сопряжения вследствие вещественности собственных значений

Матричные элементы в (1.3.27) равны друг другу вследствие эрмитовости $\hat{F}$ (см. (1.3.18)). Поэтому $\langle \Psi_{n'} | \Psi_n \rangle = 0$, $n' \neq n$, т. е. функции $\Psi_{n'}$ и Ψ_n ортогональны в $\mathbb{L}^2$. Поскольку при финитном движении волновые функции нормируемы на единицу, для собственных функций оператора с дискретным спектром можно сформулировать условие ортонормировки, включающее в себя и случай $n' = n$:

$$\langle \Psi_{n'} | \Psi_n \rangle = \int \Psi_{n'}^*(\xi) \Psi_n(\xi) d\xi = \delta_{n'n} \equiv \delta_{F_{n'} F_n}. \quad (1.3.28)$$

Поскольку число собственных значений оператора обычно превышает единицу, к собственным значениям и собственным функциям в уравнении (1.3.23) добавляются нумерующие их индексы (в основном, в случае дискретного спектра) — **квантовые числа**. Они однозначно соответствуют собственным значениям. Приведенное выше доказательство ортогональности неприменимо к собственным функциям $\Psi_{n\alpha}(\xi)$ ($\alpha = 1, 2, \dots, f$), соответствующим f -кратно вырожденному собственному значению F_n . Поэтому, вообще говоря, эти функции не обязаны быть ортогональными друг другу. Тем не менее и их можно ортогонализировать — построить f различных взаимно ортогональных и нормированных линейных комбинаций (процедура Шмидта, известная из курса линейной алгебры). Таким образом, мы будем считать, что всякий линейный эрмитов оператор имеет ортонормированную систему собственных функций $\Psi_{n\alpha}(\xi)$: $\langle \Psi_{n\alpha} | \Psi_{n'\alpha'} \rangle = \delta_{n'n} \delta_{\alpha'\alpha}$.

3. *Собственные функции эрмитова оператора образуют полную систему в пространстве $\mathbb{L}^2$. Полнота означает разложимость любой функции $\Psi(\xi)$ из $\mathbb{L}^2$ в обобщенный ряд Фурье по собственным функциям оператора $\hat{F}$:*

$$\Psi(\xi) = \sum_n c_n \Psi_n(\xi). \quad (1.3.29)$$

Если справедливо разложение (1.3.29), то формула для c_n получается из условия ортонормировки (1.3.28):

$$c_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle = \int \Psi_n^*(\xi) \Psi(\xi) d\xi. \quad (1.3.30)$$

Из курса линейной алгебры известно, что полная ортонормированная система элементов данного пространства называется его *базисом*. Поэтому система собственных функций линейного эрмитова оператора $\hat{F}$ иногда называется *базисом пространства $\mathbb{L}^2$* , порождаемым оператором $\hat{F}$.

Строгое доказательство полноты системы собственных функций эрмитова оператора дается в курсе функционального анализа. Математическое условие полноты системы $\{\Psi_n(\xi)\}$ можно записать в двух видах.

- Если справедливо разложение (1.3.29), то легко получить следующее условие (аналогичное условию замкнутости в теории рядов Фурье) для всякой функции $\Psi(\xi)$:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{n'n} c_{n'}^* c_n \underbrace{\langle \Psi_{n'} | \Psi_n \rangle}_{\delta_{n'n}} = \sum_n |c_n|^2. \quad (1.3.31)$$

- Из соотношения (1.3.31) можно получить условие полноты системы функций $\Psi_n(\xi)$ и в следующем виде, не содержащем произвольной функции $\Psi(\xi)$:

$$\sum_n \Psi_n(\xi) \Psi_n^*(\xi') = \delta(\xi - \xi'). \quad (1.3.32)$$

Для доказательства перепишем (1.3.31) с учетом формулы (1.3.30) для c_n :

$$\begin{aligned} \sum_n |c_n|^2 &= \sum_n c_n^* c_n = \sum_n \int \Psi_n(\xi) \Psi_n^*(\xi) d\xi \int \Psi_n^*(\xi') \Psi(\xi') d\xi' = \\ &= \int \left\{ \int \Psi^*(\xi) \left[\sum_n \Psi_n(\xi) \Psi_n^*(\xi') \right] d\xi \right\} \Psi(\xi') d\xi' = \\ &= \int \Psi^*(\xi') \Psi(\xi') d\xi'. \end{aligned} \quad (1.3.33)$$

Из этого равенства следует, что $\Psi^*(\xi') = \int \Psi^*(\xi) \left[\sum_n \Psi_n(\xi) \Psi_n^*(\xi') \right] d\xi$ что, в соответствии с основным свойством δ -функции, и дает условие полноты в форме (1.3.32). Можно также проверить и обратное утверждение: из условия (1.3.32) следует справедливость соотношения (1.3.31) для любой функции $\Psi(\xi)$ из $\mathbb{L}^2$.

Если функция $\Psi(\xi)$ в левой части (1.3.29) нормирована на единицу, то из условия полноты (1.3.31) следует «условие нормировки» коэффициентов:

$$\sum_n |c_n|^2 = 1. \quad (1.3.34)$$

Оно полностью идентично соответствующему соотношению для коэффициентов разложения (1.2.13) по волнам де-Бройля. $|c_n|^2$ есть вероятность получения значения $F = F_n$ при измерении F в состоянии $\Psi(\xi)$. Смысл этого утверждения становится совершенно понятным, если (учитывая полноту системы собственных функций оператора $\hat{F}$) представить среднее значение величины F в состоянии $\Psi(\xi)$ в виде:

$$\langle F \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 F_n. \quad (1.3.35)$$

Условие (1.3.34) соответствует условию нормировки в теории вероятностей, а (1.3.35) — определению математического ожидания дискретной случайной величины F . Так решается вопрос о вероятности получения того или иного определенного значения величины F при ее измерении в состоянии $\Psi(\xi)$.

1.3.6. Свойства собственных функций и собственных значений линейного эрмитового оператора. Случай непрерывного спектра

Переформулируем утверждения предыдущего раздела для оператора с дискретным спектром, на случай оператора с *непрерывным* спектром:

$$\hat{F} \Psi_F(\xi) = F \Psi_F(\xi).$$

Роль квантовых чисел здесь играет величина F , принимающая непрерывный ряд значений. Утверждение о вещественности собственных значений по-прежнему остается в силе. Соотношения же ортонормировки и полноты требуют уточнения. Действительно, как можно видеть на примере оператора $\hat{p}_x$ (1.3.25), в случае $p'_x = p_x$ нормировочный интеграл в (1.3.28) расходится:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p_x}^*(x) \Psi_{p_x}(x) dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \rightarrow \infty.$$

Физически причина данной расходимости заключается в том, что ситуация с бесконечными пределами интегрирования является в некоторой степени искусственной, поскольку реальное движение всегда происходит в конечной области пространства. С такой проблемой мы уже сталкивались при нормировке волн де Бройля. Для ее решения мы ограничили область движения частицы. Здесь же мы изложим другой способ, позволяющий обойти трудности с расходимостями при анализе волновых функций непрерывного спектра.

Поскольку собственные функции эрмитова оператора с непрерывным спектром ненормируемы стандартным образом (хотя и конечны во всем пространстве), они уже не принадлежат гильбертову пространству L^2 . Тем не менее, как показывается в функциональном анализе, они по-прежнему образуют базис этого пространства, то есть всякая нормируемая функция $\Psi(\xi)$ может быть представлена в виде «обобщенного интеграла Фурье», соответствующего замене суммирования в разложении (1.3.29) на интегрирование по всем возможным значениям F :

$$\Psi(\xi) = \int c_F \Psi_F(\xi) dF. \quad (1.3.36)$$

Соответственно математическая запись условия полноты системы функций $\Psi_F(\xi)$ получается из (1.3.31) заменой c_n на c_F и интегрированием по F :

$$\langle \Psi | \Psi \rangle \equiv \int \Psi^*(\xi) \Psi(\xi) d\xi = \int |c_F|^2 dF. \quad (1.3.37)$$

Если функция $\Psi(\xi)$ нормированная, то из (1.3.37) следует «условие нормировки» для коэффициентов c_F :

$$\int |c_F|^2 dF = \int c_F^* c_F dF = 1. \quad (1.3.38)$$

Обобщение нормировочного условия (1.3.28) на случай состояний непрерывного спектра можно получить, если переписать соотношение (1.3.37) (с учетом (1.3.38)) в виде (после изменения порядка интегрирования):

$$\underbrace{\int \Psi^*(\xi) \Psi(\xi) d\xi}_1 = \iint \left\{ \int \Psi_{F'}^*(\xi) \Psi_F(\xi) d\xi \right\} c_{F'}^* c_F dF' dF = 1. \quad (1.3.39)$$

Отсюда видно, что для согласования с (1.3.38) необходимо, чтобы квадратная скобка в выражении (1.3.39) являлась дельта-функцией $\delta(F' - F)$:

$$\langle \Psi_{F'} | \Psi_F \rangle = \int \Psi_{F'}^*(\xi) \Psi_F(\xi) d\xi = \delta(F' - F). \quad (1.3.40)$$

Полученное соотношение обобщает (1.3.28) на случай состояний непрерывного спектра и называется *нормировкой на дельта-функцию*: хотя интеграл от $|\Psi_F(\xi)|^2$ по F по-прежнему

расходится, условие (1.3.40) позволяет подобрать независимый от ξ коэффициент в $\Psi_F(\xi)$ так, чтобы коэффициент при дельта-функции в (1.3.40) равнялся единице.

Существует и другое обоснование условия нормировки (1.3.40). Для непрерывно меняющейся величины физически бессмысленно говорить о ее *абсолютно точном значении* F — следует говорить о ее значении в интервале $(F, F + \Delta F)$, где $\Delta F \ll F$. Тогда вместо $\Psi_F(\xi)$ следует рассматривать *волновые пакеты*:

$$\Delta\Psi_F(\xi) = \int_{F-\Delta F}^{F+\Delta F} \Psi_F(\xi) dF.$$

Они локализованы в пространстве и могут нормироваться как и в случае финитного движения. П.А.М. Дирак показал, что в этом случае можно сохранить всю математику состояний дискретного спектра, если нормировать $\Psi_F(\xi)$ на δ -функцию. Для этого δ -функция и была введена!

С учетом (1.3.40) легко получить явный вид коэффициента c_F в разложении (1.3.36), умножая его на $\Psi_{F'}(\xi)$ и интегрируя по ξ :

$$c_F = \langle \Psi_F | \Psi \rangle = \int \Psi_F^*(\xi) \Psi(\xi) d\xi. \quad (1.3.41)$$

Здесь видна полная аналогия с формулой (1.3.30) для дискретного спектра.

Полностью аналогично выводу соотношения (1.3.32) для случая дискретного спектра (с заменой суммирования по n на интегрирование по F), для состояний непрерывного спектра условие полноты (1.3.37) также можно переписать в эквивалентном виде на языке функций $\Psi_F(\xi)$:

$$\int \Psi_F(\xi) \Psi_F^*(\xi') dF = \delta(\xi - \xi'). \quad (1.3.42)$$

Подобно $|c_n|^2$, величине $|c_F|^2 dF$ следует придать смысл вероятности обнаружения величины F в интервале $[F, F + \Delta F]$ при ее измерении в состоянии Ψ , т. е. $|c_F|^2$ есть *плотность вероятности распределения определенных значений F в состоянии Ψ* .

Таким образом, для формального перехода от дискретного спектра к непрерывному во всех соответствующих выражениях необходимо сделать следующие замены:

$$F_n \rightarrow F, \quad \sum_n (\dots) \rightarrow \int (\dots) dF, \quad \delta_{n'n} \rightarrow \delta(F' - F).$$

1.3.7. Одновременно измеримые величины

Определенное значение величины F можно указать только для конкретного специально выбранного состояния (описываемого собственной функцией оператора $\hat{F}$). В квантовой теории совместная измеримость двух физических величин F и G подразумевает *существование таких состояний квантовой системы, в которых как величина F , так и величина G имеют определенные значения*. Данная проблема специфична только для микромира и принципиально отсутствует в макромире.

Математическое условие совместной измеримости двух величин состоит, естественно, в наличии у их операторов общих собственных функций, т. е. общего базиса:

$$\hat{F}\Psi_n(\xi) = F_n\Psi_n(\xi), \quad \hat{G}\Psi_n(\xi) = G_n\Psi_n(\xi). \quad (1.3.43)$$

Поэтому проблему совместной измеримости можно сформулировать как поиск универсального критерия, позволяющего установить наличие у операторов общих собственных функций без явного решения уравнений (1.3.43).

Критерий формулируется следующим образом: *для того, чтобы линейные операторы $\hat{F}$ и $\hat{G}$ имели общие собственные функции, необходимо и достаточно, чтобы эти операторы коммутировали.*

Для простоты будем предполагать спектр обоих операторов дискретным и невырожденным. Докажем *необходимость*, т. е. установим *коммутативность операторов с общим базисом*. Возьмем произвольную¹⁴ функцию $\Psi(\xi)$ и подействуем на нее коммутатором $[\hat{F}, \hat{G}]$, предварительно разложив ее по базису операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ в соответствии с (1.3.29):

$$\begin{aligned} [\hat{F}, \hat{G}]\Psi(\xi) &= \sum_n c_n (\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})\Psi_n(\xi) = \sum_n c_n (\hat{F}G_n - \hat{G}F_n)\Psi_n(\xi) = \\ &= \sum_n c_n (G_n\hat{F} - F_n\hat{G})\Psi_n(\xi) = \sum_n c_n (G_nF_n - F_nG_n)\Psi_n(\xi) \equiv 0. \end{aligned}$$

Мы пришли к определению нулевого оператора, т. е. доказали необходимость критерия: $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$.

Докажем *достаточность*, т. е. установим *наличие общих собственных функций у коммутирующих операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$* . Переформулируем вопрос несколько иначе. Пусть $\Psi_n(\xi)$ — собственная функция оператора $\hat{F}$. Докажем, что она является собственной функцией и для коммутирующего с ним оператора $\hat{G}$:

$$\hat{F}\Psi_n(\xi) = F_n\Psi_n(\xi) \Rightarrow \hat{G}\Psi_n(\xi) = G_n\Psi_n(\xi).$$

Подействуем на функцию $\Psi_n(\xi)$ оператором $\hat{G}\hat{F}$. С одной стороны, по определению произведения операторов,

$$\hat{G}\hat{F}\Psi_n(\xi) = \hat{G}(\hat{F}\Psi_n(\xi)) = \hat{G}F_n\Psi_n(\xi) = F_n \underbrace{\hat{G}\Psi_n(\xi)}_{\Omega_n(\xi)} = F_n\Omega_n(\xi).$$

С другой в силу коммутативности $\hat{F}$ и $\hat{G}$,

$$\hat{G}\hat{F}\Psi_n(\xi) = \hat{F} \underbrace{\hat{G}\Psi_n(\xi)}_{\Omega_n\xi} = \hat{F}\Omega_n\xi.$$

Сопоставляя последние два равенства, приходим к выводу:

$$\hat{F}\Omega_n\xi = F_n\Omega_n(\xi).$$

Это означает, что у оператора $\hat{F}$ при невырожденном собственном значении F_n есть *две* собственные функции: $\Psi_n(\xi)$ и $\Omega_n(\xi) = \hat{G}\Psi_n(\xi)$. Но в таком случае эти функции в силу линейности операторов должны отличаться только постоянным множителем:

$$\hat{G}\Psi_n(\xi) = G_n\Psi_n(\xi)$$

т. е. функция $\Psi_n(\xi)$ является *общей собственной функцией для обоих операторов*.

¹⁴из пересечения $\mathbb{L}^2$ -пространств операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$.

Данный критерий обобщается и на случай вырожденного спектра. Пусть спектр оператора $\hat{F}$ вырожден, т. е. одному собственному значению F отвечают сразу несколько собственных функций. Другими словами, квантовое число F не определяет однозначно квантовое состояние системы. В этом случае всегда существуют взаимно коммутирующие операторы $\hat{G}_1, \hat{G}_2, \dots$ (в частном случае, один оператор $\hat{G}$), коммутирующие с $\hat{F}$. Любая собственная функция $\Psi_{FG_1G_2\dots}(\xi)$ этих операторов характеризуется определенным набором квантовых чисел $F, G_1, G_2, \dots$, которые однозначно фиксируют квантовое состояние. Набор коммутирующих операторов, собственные значения которых однозначно определяют квантовое состояние системы, называется *полным набором* (об этом будет рассмотрено в следующей главе).

Заметим, что доказанный критерий требует только линейности и справедлив даже для неэрмитовых операторов. Как следствие, *для совместной измеримости двух физических величин необходимо и достаточно, чтобы их операторы коммутировали.*

Приведем примеры пар совместно измеримых величин: $(x, p_y), (z, L_z), (p_x, L_x), (L_z, \mathbf{L}^2)$; и примеры пар совместно неизмеримых величин: $x, p_x, (x, L_y), (p_x, L_y), (L_x, L_y)$. Обратим особое внимание на одноименные декартовы компоненты координаты и импульса: они совместно неизмеримы, т. е. в микромире *отсутствует понятие классической траектории!*

1.3.8. Соотношения неопределенностей

Рассмотрим две совместно неизмеримые величины F и G . Для них отсутствуют состояния, в которых они обе имели бы определенные значения. Это проявляется в том, что их измерение в любом *одном и том же* состоянии даст *хотя бы для одной* из этих величин ненулевой разброс определенных значений. Как известно, такой разброс характеризуется среднеквадратичным отклонением. Получим общее соотношение между среднеквадратичными отклонениями $\langle(\Delta F)^2\rangle$ и $\langle(\Delta G)^2\rangle$ в произвольном состоянии Ψ .

Пусть $\hat{F}$ и $\hat{G}$ — операторы физических величин F и G , и $[\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{K}$. Докажем, что в любом квантовом состоянии Ψ выполняется следующее соотношение:

$$\langle(\Delta F)^2\rangle\langle(\Delta G)^2\rangle \geq \frac{\langle K \rangle^2}{4}. \quad (1.3.44)$$

Прежде чем приступить к доказательству, покажем, что оператор $\hat{K}$ — самосопряженный. Заметим для начала, что $(\hat{F}\hat{G})^+ = \hat{G}^+\hat{F}^+$. Подвергнем теперь эрмитовому сопряжению обе стороны равенства $[\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{K}$. Справа получим $-i\hat{K}^+$, а слева

$$\begin{aligned} [\hat{F}, \hat{G}]^+ &= (\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})^+ = (\hat{G}^+\hat{F}^+ - \hat{F}^+\hat{G}^+) = \\ &= (\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G}) = -(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}) = -[\hat{F}, \hat{G}] = -i\hat{K}^+. \end{aligned}$$

Поэтому $\hat{K}^+ = \hat{K}$.

Докажем соотношение (1.3.44). Рассмотрим оператор отклонения от среднего $\Delta\hat{F} = \hat{F} - \langle F \rangle$. Для него имеем

$$\begin{aligned} \langle\Delta F\rangle &= \langle\Psi|(\hat{F} - \langle F \rangle)\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{F}\Psi\rangle - \langle F \rangle\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle F \rangle - \langle F \rangle = 0, \\ (\Delta\hat{F})^+ &= (\hat{F} - \langle F \rangle)^+ = \hat{F} - \langle F \rangle = \Delta\hat{F}. \end{aligned}$$

По определению, $\langle(\Delta F)^2\rangle = \langle\Psi|(\Delta F)^2\Psi\rangle$. Всё то же справедливо для оператора $\Delta\hat{G} = \hat{G} - \langle G\rangle$:

$$\langle\Delta G\rangle = 0, \quad (\Delta\hat{G})^+ = \Delta\hat{G}, \quad \langle(\Delta G)^2\rangle = \langle\Psi|(\Delta G)^2\Psi\rangle.$$

При этом $[\Delta\hat{F}, \Delta\hat{G}] = i\hat{K}$.

Введем теперь новый оператор $\alpha\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G}$, где α — произвольное действительное число. Тогда

$$\langle(\alpha\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G})\Psi|(\alpha\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G})\Psi\rangle = f(\alpha) \geq 0.$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} f(\alpha) &= \langle\Psi|(\alpha\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G})^+(\alpha\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G})\Psi\rangle = \langle\Psi|(\alpha\Delta\hat{F} - i\Delta\hat{G})(\alpha\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G})\Psi\rangle = \\ &= \alpha^2\langle(\Delta F)^2\rangle + \langle(\Delta G)^2\rangle + i\alpha\langle\Psi|(\Delta\hat{F}\Delta\hat{G} - \Delta\hat{G}\Delta\hat{F})\Psi\rangle = \\ &= \alpha^2\langle(\Delta F)^2\rangle + \langle(\Delta G)^2\rangle + i\alpha\langle\Psi|i\hat{K}\Psi\rangle = \alpha^2\langle(\Delta F)^2\rangle + \langle(\Delta G)^2\rangle - \alpha\langle K\rangle. \end{aligned}$$

Но так как

$$f(\alpha) = \alpha^2\langle(\Delta F)^2\rangle - \alpha\langle K\rangle + \langle(\Delta G)^2\rangle \geq 0, \quad \forall\alpha,$$

то должно быть выполнено условие (дискриминант квадратичной функции $f(\alpha)$ неположителен)

$$\langle K\rangle^2 - 4\langle(\Delta F)^2\rangle\langle(\Delta G)^2\rangle \leq 0,$$

что и доказывает соотношение (1.3.44).

Неравенство (1.3.44) выполняется в *произвольном* состоянии и поэтому решает поставленную задачу. Оно называется **соотношением неопределенностей**. Раскроем его смысл. В случае совместно неизмеримых величин $\hat{K} \neq 0$, и правая часть (1.3.44) может обратиться в нуль лишь в *некоторых состояниях при определенных свойствах симметрии* (при этом, естественно, оба сомножителя в левой части не обязаны обращаться в нуль одновременно). А это означает *принципиальную невозможность выбора состояния с нулевым разбросом определенных значений как для F , так и для G* : при $\langle(\Delta F)^2\rangle \rightarrow 0$ $\langle(\Delta G)^2\rangle \rightarrow \infty$ и наоборот.

В качестве примера рассмотрим соотношение (1.3.44) применительно к координате и импульсу (**соотношение Гейзенберга**, полученное им в 1927 г.):

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_x)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (1.3.45)$$

Если подбирать состояние таким образом, чтобы свести к нулю неопределенность координаты, то, в соответствии с (1.3.46), неопределенность импульса неограниченно возрастет.

Вернемся теперь к вопросу о траектории движения, понятие которой отсутствует в микромире. Рассмотрим, например, движение тела массой 1 кг со скоростью 1 м/с. Пусть приемлемой погрешностью в определении скорости будет 0.001 м/с. Оценим с помощью соотношения неопределенностей (1.3.46) неточность в значении величины координаты. Она оказывается порядка $5 \cdot 10^{-32}$ м, что на много порядков меньше размеров атомного ядра и совершенно несравнимо с величинами погрешностей при измерении координат в реальном эксперименте. Таким образом, в макромире соотношение неопределенностей практически не сказывается (точнее — неопределенности пренебрежимо малы). Причиной является наличие малого параметра $\hbar$ в правой части соотношения неопределенностей.

В случае *совместно измеримых* величин $\hat{K} = 0$ и правая часть (1.3.44) оказывается строго нулевой. А это означает *возможность выбора состояния с нулевым разбросом определенных значений и для F , и для G* .

Если Ψ_0 — волновая функция состояния, в котором соотношение неопределенностей превращается в строгое равенство, то Ψ_0 — волновая функция **когерентного** состояния. Нетрудно установить уравнение, которому удовлетворяет функция Ψ_0 . В самом деле, вернемся к доказательству соотношения неопределенностей. Знак равенства в этом соотношении при $\Psi = \Psi_0$ означает, что дискриминант квадратичной функции $f(\alpha)$ равен нулю, и, следовательно, в точке $\alpha_0 = \frac{\langle K \rangle}{2\langle (\Delta F)^2 \rangle}$ функция $f(\alpha)$ обращается в нуль. Но если $f(\alpha_0) = 0$, то

$$(\alpha_0 \Delta \hat{F} + i \Delta \hat{G}) \Psi_0 = 0.$$

Это и есть уравнение, которое определяет волновую функцию Ψ_0 .

Аналогично можно вывести и соотношение неопределенностей «энергия–время», хотя его интерпретация требует осторожности, так как не существует оператора, представляющего время:

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle \langle (\Delta \tau)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad (1.3.46)$$

это соотношение получило название **неравенство Бора-Гейзенберга**. Это соотношение можно понимать одним из трёх возможных способов:

- ΔE — неопределенность энергии состояния микрообъекта, пребывающего в этом состоянии время $\Delta \tau$;
- ΔE — неопределенность энергии микрообъекта в некотором процессе длительностью $\Delta \tau$;
- ΔE — максимальная точность определения энергии квантовой системы, достижимая путём процесса измерения, длящегося время $\Delta \tau$.

Единого мнения о выводимости этого соотношения из остальных аксиом квантовой механики нет.

1.4. Квантовая динамика

До сих пор рассуждения о схеме построения квантовой механики относились к фиксированному моменту времени. В связи с этим формулировку изложенной теории нельзя считать законченной, поскольку в соотношениях между состояниями и динамическими переменными физической системы отсутствует связь между различными моментами времени, т. е. не определено динамическое поведение системы. Чтобы установить каким образом состояние системы изменяется во времени, будем исходить из принципа соответствия с классической механикой.

В классической физике движение системы во времени носит причинный характер и полностью детерминировано. В квантовой механике в момент времени, когда производится измерение динамической переменной, физическая система возмущается и ее состояние меняется непредсказуемым образом. Однако в отсутствие возмущений, обусловленных производимыми над системой измерениями, причинность имеет место и в квантовой механике. В этот период эволюция квантовой системы во времени подчиняется уравнениям

движения, которые позволяют по известному состоянию в один момент времени t_0 однозначно определить состояние в последующие моменты t .

1.4.1. Временное уравнение Шредингера

Относительно общего вида уравнения для волновой функции $\Psi(\xi, t)$ можно лишь утверждать, что оно должно быть линейным и однородным (на основании принципа суперпозиции) и выражать первую производную $\partial\Psi/\partial t$ волновой функции по времени через значение самой волновой функции в тот же момент времени t . Последнее обстоятельство обусловлено тем, что волновая функция $\Psi(\xi, t)$ полностью определяет состояние системы в момент времени t , а, следовательно, и производную $\partial\Psi/\partial t$ в этот момент времени (аналогично тому, как в классической механике задание обобщенных координат и скоростей ($q_i(t)$ и $\dot{q}_i(t)$) однозначно определяет и обобщенные ускорения $\ddot{q}_i(t)$). В наиболее общем виде уравнение, удовлетворяющее указанным условиям, можно записать следующим образом:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\xi, t) = \hat{H} \Psi(\xi, t), \quad (1.4.1)$$

где $\hat{H}$ — некоторый подлежащий определению линейный оператор, имеющий размерность энергии (учитывая введенный для удобства множитель $i\hbar$ в левой части уравнения (1.4.1)).

Из требования сохранения нормировки волновой функции с течением времени можно установить также, что оператор $\hat{H}$ должен быть самосопряженным (эрмитовским). Для этого умножим слева уравнение (1.4.1) на $\Psi^*(\xi, t)$, а уравнение, комплексно-сопряженное к (1.4.1):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\xi, t) = \hat{H}^* \Psi^*(\xi, t), \quad (1.4.2)$$

— $\Psi(\xi, t)$. Вычтем теперь второе соотношение из первого, и полученное равенство проинтегрируем по всем возможным значениям ξ , вынося в левой части производную по времени за знак интеграла:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | \Psi \rangle = \left\{ \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle^* \right\}.$$

Для обращения левой части в этом соотношении в нуль (т. е. для сохранения нормировочного интеграла во времени) выражение в фигурных скобках в правой части также должно обратиться в нуль, что и означает самосопряженность оператора $\hat{H}$ в соответствии с (1.3.18).

В общем случае произвольной квантовой системы явный вид линейного самосопряженного оператора $\hat{H}$ (который может также параметрически зависеть от времени при воздействии на систему переменных внешних полей) должен быть постулирован. Наводящие соображения для такого постулирования дает пример свободной частицы с определенным импульсом, для которой вид оператора $\hat{H}$ можно установить теоретически из следующих рассуждений. Подстановка волны де-Бройля (1.2.1) в уравнение (1.4.1) приводит его к виду

$$E \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t), \quad (1.4.3)$$

Поскольку для свободного электрона $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$, правая часть (1.4.3) после действия оператора $\hat{H}$ на пространственную часть функции $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$ также должна превратиться в

$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$. Наиболее простой оператор $\hat{H}$, приводящий правую часть к такому виду, есть

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}.$$

Таким образом, уравнение (1.4.1) для волны де-Бройля можно представить в виде:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \hat{T}\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t), \quad (1.4.4)$$

где $\hat{H}$ есть оператор кинетической энергии электрона:

$$\hat{T} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2. \quad (1.4.5)$$

Как известно, в классической механике кинетическая энергия свободной частицы $T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ совпадает с ее функцией Гамильтона $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = T. \quad (1.4.6)$$

Поэтому оператор, действующий на $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$ в правой части (1.4.4), может быть получен из функции Гамильтона (1.4.5) заменой $\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Другими словами, в правой части (1.4.4) мы имеем *гамильтониан* $\hat{H}$ (оператор Гамильтона) свободной частицы:

$$\hat{H} = \hat{T} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (1.4.7)$$

Теперь становится понятной идея обобщения уравнения (1.4.4) на случай электрона во *внешнем силовом поле с потенциальной функцией* $V(\mathbf{r}, t)$. В этом случае классическая функция Гамильтона дается суммой кинетической энергии и потенциальной функции: $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t)$. Заменяя в ней кинетическую энергию на оператор $\hat{T}$, получаем гамильтониан электрона во внешнем поле

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}, t). \quad (1.4.8)$$

Теперь можно предположить, что уравнение (1.4.1) с гамильтонианом (1.4.8), или (в развернутой записи) уравнение

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.4.9)$$

и является уравнением для волновой функции электрона во внешнем поле $V(\mathbf{r}, t)$. Уравнение (1.4.1) для волновой функции, в котором оператор $\hat{H}$ является гамильтонианом квантовой системы, было предложено Э. Шредингером в 1926 г. и является основным уравнением квантовой механики. Оно называется **временным уравнением Шредингера** и в квантовой теории играет ту же роль, что и уравнения Ньютона в классической механике: зная состояние системы в начальный момент времени $t = t_0$ (т. е. начальное состояние $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$), оно позволяет получить волновую функцию этого состояния в произвольный момент времени t .

На основании анализа структуры уравнения (1.4.9) можно сформулировать следующее правило для формального построения уравнения Шредингера квантовой системы, для которой классическая функция Гамильтона имеет известный вид $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r})$: в классическом соотношении $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = E$ осуществляется замена

$$\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}, \quad E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad (1.4.10)$$

а затем к обеим его частям справа добавляется функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

Для важного случая системы N взаимодействующих частиц с парным взаимодействием $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, движущихся во внешнем силовом поле $V(\mathbf{r}, t)$, гамильтониан принимает вид:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \right) \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N V_i(\mathbf{r}_i, t) + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N U_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \quad (1.4.11)$$

Здесь m_i — масса i -й частицы, а $\nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2}$ — оператор дифференцирования по радиус-вектору i -й частицы.

Самый общий вид временного уравнения Шредингера в конфигурационном пространстве

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\xi, t) = \hat{H}(\xi, t)\Psi(\xi, t), \quad (1.4.12)$$

получается из классического соотношения $\mathcal{H}(p_\xi, \xi) = E$ по аналогии с (1.4.9) с помощью обобщенной замены

$$p_\xi \rightarrow \hat{p}_\xi, \quad E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad (1.4.13)$$

где p_ξ — обобщенный импульс, соответствующий обобщенной координате ξ ¹⁵.

Приведенные выше соображения о явном виде оператора $\hat{H}$ в уравнении (1.4.1) для одной квантовой частицы во внешнем силовом поле, а также его обобщение для системы N взаимодействующих частиц, *не являются строгим выводом* уравнения Шредингера. В квантовой механике уравнение Шредингера *постулируется* подобно уравнению Ньютона в классической механике и уравнениям Максвелла в классической электродинамике.

Временное уравнение Шредингера является уравнением в частных производных *второго* порядка по координатам и *первого* порядка по времени. В отличие от волновых уравнений классической физики (электродинамики и акустики), уравнение Шредингера содержит *первую производную по времени с мнимым коэффициентом*, что обеспечивает существование осциллирующих во времени решений уравнения Шредингера. В качестве *начального условия* следует взять значение волновой функции в начальный момент времени $\Psi(\xi, 0)$. *Граничные условия* определяются стандартными условиями (требованием конечности, однозначности и непрерывности).

¹⁵ При этом необходимо обеспечить самосопряженность гамильтониана! В частности, при наличии в функции Гамильтона произведений типа $x p_x$ для перехода к гамильтониану необходимо произвести нетривиальную замену $x p_x \rightarrow \frac{1}{2}\{x, \hat{p}_x\}$.

1.4.2. Плотность потока вероятности

Согласно гипотезе М. Борна, квадрат модуля волновой функции дает плотности вероятности распределения частицы. Объемная же плотность $\rho_{cl}(\mathbf{r}, t)$ скалярной физической величины (массы, заряда, энергии и т.д.) подчиняется *уравнению непрерывности*

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{cl}(\mathbf{r}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}_{cl}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (1.4.14)$$

выражающему *закон сохранения* этой физической величины. Здесь $\mathbf{j}_{cl}(\mathbf{r}, t)$ — плотность ее потока.

Поскольку для плотности вероятности распределения микрочастицы в 3-мерном пространстве

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (1.4.15)$$

нормировочный интеграл не меняется с течением времени¹⁶, для этой плотности тоже должно выполняться уравнение непрерывности (1.4.14). Требуется лишь *выразить плотность потока вероятности $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ через волновую функцию* подобно (1.4.15).

Для установления вида $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ запишем уравнение, комплексносопряженное уравнению Шредингера (1.4.9):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\mathbf{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \right\} \Psi^*(\mathbf{r}, t). \quad (1.4.16)$$

Умножим теперь уравнение (1.4.9) на $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$, а (1.4.16) — на $\Psi(\mathbf{r}, t)$ и вычтем из первого соотношения второе:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi^*(\mathbf{r}, t)|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \{ \Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \Psi^*(\mathbf{r}, t) \}. \quad (1.4.17)$$

Левая часть (1.4.17) сводится к производной произведения функций, т. е. в соответствии с (1.4.15) к производной $\rho(\mathbf{r}, t)$ по времени. Правую часть (1.4.17) можно преобразовать по формулам векторного анализа:

$$\operatorname{div}(f \operatorname{grad} g) = \nabla(f \nabla g) = (\nabla f)(\nabla g) + f \nabla^2 g \quad \Rightarrow \quad f \nabla^2 g = \operatorname{div}(f \nabla g) - (\nabla f)(\nabla g).$$

Следовательно,

$$\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \Psi^*(\mathbf{r}, t) = \operatorname{div} \{ \Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t) \}. \quad (1.4.18)$$

Учитывая (1.4.15) и (1.4.18) и сопоставляя (1.4.14) и (1.4.17), получаем следующее выражение для плотности потока вероятности в состоянии с волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}, t)$:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)]. \quad (1.4.19)$$

Напомним, что m — масса частицы. Обратим внимание, что у $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0$ в случае вещественной волновой функции.

Стандартное условие непрерывности волновой функции необходимо для обеспечения конечности плотности потока вероятности.

¹⁶ вследствие сохранения вещества в нерелятивистской механике

Рассмотрим электрон в состоянии с волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}, t)$. В соответствии с (1.4.15) пространственное распределение заряда в состоянии $\Psi(\mathbf{r}, t)$ есть

$$\rho_e(\mathbf{r}, t) = -e\rho(\mathbf{r}, t) = -e|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (1.4.20)$$

Здесь $-e$ ($e > 0$) — заряд электрона. В классической механике распределение точечного заряда задается δ -функцией. В квантовой механике плотность заряда оказывается «размазанной»¹⁷ вследствие отсутствия определенной траектории движения электрона. Аналогичным образом из (1.4.19) получаем выражение для плотности электрического тока, создаваемого электроном в состоянии $\Psi(\mathbf{r}, t)$:

$$\mathbf{j}_e(\mathbf{r}, t) = -\frac{e\hbar}{2mi} [\Psi^*(\mathbf{r}, t)\nabla\Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t)\nabla\Psi^*(\mathbf{r}, t)]. \quad (1.4.21)$$

В применении к волне де-Бройля (1.2.1) плотность потока вероятности по формуле (1.4.19) имеет вид:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j} = |C|^2 \frac{\mathbf{p}}{m}.$$

Поэтому волну де-Бройля можно нормировать и на заданный вид плотности потока вероятности. В частности, при $C = 1$ *плотность потока в плоской волне совпадает с классической скоростью движения частицы*:

$$\mathbf{j} = \frac{\mathbf{p}}{m} = \mathbf{v}.$$

1.4.3. Стационарные состояния

В микромире особая роль отводится системам со стационарным гамильтонианом, т. е. не зависящим от времени явно ($\hat{H}(\xi, t) = \hat{H}(\xi)$), что соответствует, в частности, микрочастицам, движущимся в постоянных внешних полях. Для таких систем согласно известному методу разделения переменных можно получить решения временного уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\xi, t) = \hat{H}(\xi) \Psi(\xi, t) \quad (1.4.22)$$

с факторизованной зависимостью от времени и координат:

$$\Psi(\xi, t) = T(t) \Psi(\xi). \quad (1.4.23)$$

Используя функцию (1.4.23), составим по отдельности левую и правую стороны уравнения (1.4.9):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\xi, t) = i\hbar \Psi(\xi) \frac{\partial T(t)}{\partial t} \quad (1.4.24)$$

и

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\xi, t) + V(\xi) \Psi(\xi, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} T(t) \Delta \Psi(\xi) + V(\xi) T(t) \Psi(\xi). \quad (1.4.25)$$

¹⁷ «облако» электрического заряда

Приравняем выражения (1.4.24) и (1.4.25), и, разделив обе стороны уравнения на $\Psi(\xi, t) = T(t)\Psi(\xi)$, получим:

$$\frac{i\hbar \frac{\partial T(t)}{\partial t}}{T(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \Psi(\xi)}{\Psi(\xi)} + V(\xi). \quad (1.4.26)$$

В равенстве (1.4.26) левая сторона является функцией времени, правая же — функцией координат. Это равенство должно выполняться в любой точке и в любой момент времени. Но это возможно лишь в том случае, если обе стороны равны постоянной величине. Обозначим её буквой E и выясним физический смысл этой константы разделения. Для этого воспользуемся методом размерностей. Одним из правил этого метода является утверждение, что складывать (вычитать) и приравнивать можно только однородные величины. Но справа в формуле (1.4.26) одно из слагаемых — это потенциальная энергия. Следовательно, и все остальные члены в формуле (1.4.26) имеют смысл энергии. А потому и величина E является энергией. И поскольку она составляется из двух частей, одна из которых связана с кинетической энергией, а вторая — с потенциальной, то величина E является полной (механической) энергией квантово-механической системы (или частицы), состояние которой определяется волновой функцией $\Psi(\xi, t)$. Таким образом, уравнение (1.4.26) распадается на два дифференциальных уравнения:

$$\frac{i\hbar \frac{\partial T(t)}{\partial t}}{T(t)} = E \quad (1.4.27)$$

и

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \Psi(\xi)}{\Psi(\xi)} + V(\xi) = E. \quad (1.4.28)$$

Уравнение (1.4.27) решается методом разделения переменных:

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E T(t) \Rightarrow T(t) = T_0 \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E t \right\}, \quad (1.4.29)$$

где T_0 — произвольный постоянный множитель. Особенностью функции (1.4.29) является то, что она сохраняет свой смысл для любой квантово-механической задачи, так как не зависит от вида потенциальной энергии.

Рассмотрим уравнение (1.4.28), умножив обе стороны его на функцию $\Psi(\xi)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\xi) + V(\xi) \Psi(\xi) = E \Psi(\xi). \quad (1.4.30)$$

Приходим к выводу, что константа разделения является собственным значением гамильтониана. Тогда уравнение (1.4.30) можем представить в виде:

$$\hat{H} \Psi_E(\xi) = E \Psi_E(\xi), \quad (1.4.31)$$

которое называют **стационарным уравнением Шредингера**. Оно определяет состояния с определенными значениями величины, соответствующей гамильтониану. Ее размерность совпадает с размерностью энергии, поэтому E в уравнении (1.4.31) есть *определенное*

значение энергии. По этой причине гамильтониан также называется **оператором полной энергии**.

Состояния с определенными значениями энергии называются **стационарными**.

Таким образом, если гамильтониан не зависит явно от времени, квантовая система может находиться в стационарных состояниях. Структура их волновых функций

$$\Psi_E(\xi, t) = \Psi_E(\xi) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E t \right\}, \quad (1.4.32)$$

где E — определенное значение энергии, $\Psi_E(\xi)$ — функция, зависящая только от координат. Эти величины определяются из решения стационарного уравнения Шредингера (1.4.31). Граничные условия к нему определяются общими стандартными условиями для волновой функции. Множитель T_0 из выражения (1.4.29) можно считать включенным в (1.4.32), так как функция $\Psi_E(\xi)$ еще будет нормироваться.

В случае *непрерывного* движения энергетический спектр квантовой системы *непрерывен*. При решении стационарного уравнения Шредингера функция $\Psi_E(\xi)$ определяется по заданному E в соответствии с граничными условиями.

В случае *дискретного* движения энергетический спектр квантовой системы *дискретен*, т. е. в системе имеются *энергетические уровни*. Они определяются так, чтобы для функций $\Psi_E(\xi)$ выполнялись соответствующие граничные условия, т. е.

$$\Psi_E(\xi) \Big|_{\xi \rightarrow 0} = 0 \quad (1.4.33)$$

для обеспечения конечности нормировочного интеграла.

Состояние с наименьшей энергией называется **основным**. Его общим свойством является *невыврожденность*. Все остальные состояния — *возбужденные*: ближайшее по энергии к основному — первое возбужденное, затем второе и т.д. В зависимости от симметрии системы возбужденные состояния могут быть вырожденными.

Перечислим общие свойства стационарных состояний.

1. *Зависимость волновых функций стационарных состояний от времени определяется только значением энергии E и имеет вид $e^{-iEt/\hbar}$.* По этой причине в волновых функциях стационарных состояний зависимость от времени, как правило, не указывается. Мнимая единица в показателе экспоненты появилась из-за мнимого коэффициента при первой производной по времени в уравнении Шредингера (1.4.22), поэтому его решение осциллирует во времени, несмотря на отсутствие второй производной по времени в (1.4.22).
2. *В стационарных состояниях плотность вероятности и плотность потока вероятности не зависят от времени.* Действительно, выражения для них (1.89) и (1.93) не содержат операторов, действующих на t , а полные волновые функции входят в них в виде квадратичных комбинаций $|\Psi|^2$, поэтому вся зависимость от времени сокращается: $|e^{-iEt/\hbar}|^2 = 1$.
3. *Если оператор физической величины не зависит явно от времени, то ее среднее значение в стационарном состоянии не зависит от времени.*

Перечисленные свойства делают стационарные состояния удобными для исследования квантовых систем с не зависящим от времени гамильтонианом.

Рассмотрим трехмерное движение частицы с массой m в постоянном силовом поле с потенциальной энергией $V(\mathbf{r})$. Стационарное уравнение Шредингера (1.4.31) в этом случае приобретает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_E(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi_E(\mathbf{r}). \quad (1.4.34)$$

По своей структуре оно идентично классическому уравнению для *стоячих волн* в среде с *переменным показателем преломления*.

1.4.4. Закон причинности в квантовой механике

Устанавливая смысл волновой функции, мы сформулировали и основную задачу квантовой механики: состояние квантово-механической системы будет определено, если будет известна волновая функция, соответствующая этому состоянию системы. Теперь мы знаем, как находить волновую функцию: необходимо решить уравнение Шредингера. Так как временная функция $T(t)$ имеет один и тот же вид во всех задачах, то решать нужно лишь координатное уравнение Шредингера. А затем полную волновую функцию задачи составляем в виде произведения временной и координатной волновых функций. Основанием такой операции является теорема умножения вероятностей, которая справедлива для независимых событий.

В силу однородности хода времени любой момент времени можно принять за начальный, нулевой момент времени, и тем самым определить волновую функцию в этот момент времени. Это и будет начальным условием задачи, которое необходимо при решении дифференциальных уравнений. Знание волновой функции в нулевой момент времени позволяет определить вероятность данного состояния системы.

В отличие от классической физики, в квантовой механике нельзя говорить об абсолютном, достоверном, однозначном знании состояния квантово-механической системы. Из-за корпускулярно-волнового дуализма свойств частиц системы можно говорить лишь о вероятностном состоянии системы. Но вероятностное толкование выводов квантовой механики не устраняет объективности этих выводов, не устраняет действия закона причинности. Он лишь приобретает новый, вероятностный характер. Знание волновой функции в нулевой момент времени позволяет определить ее в любой последующий момент времени. Тем самым мы имеем возможность установить вероятность нахождения системы в новом состоянии. Таким образом, уравнение Шредингера позволяет связать исходное состояние квантово-механической системы в нулевой момент времени с состоянием системы в момент времени t . И то, что эти состояния связаны вероятностными законами, не уменьшает их реальности, достоверности. И в квантовой механике закон причинности не отменяется, а в силу квантово-механических свойств частиц и систем частиц имеет новое, вероятностное проявление.

1.4.5. Дифференцирование операторов по времени

Если ввести явным образом время t в определение (1.3.7) для среднего значения

$$\langle F \rangle = \int \Psi^*(\xi, t) \hat{F} \Psi(\xi, t) d\xi, \quad (1.4.35)$$

то видно, что в общем случае среднее значение величины F зависит от времени, причем эта зависимость может быть обусловлена как тем, что квантовая система находится в нестационарном состоянии $\Psi(\xi, t)$, так и явной зависимостью от времени самого оператора физической величины: $\hat{F} = \hat{F}(t)$, так что $\partial\hat{F}/\partial t \neq 0$ ¹⁸. Хотя производную по времени от среднего значения величины F легко определить прямым дифференцированием соотношения (1.4.35), естественно попытаться получить более общий результат — построить оператор производной величины F по времени, то есть оператор $\widehat{\frac{dF}{dt}}$ соответствующий величине $\frac{dF}{dt}$ который, в частности, позволит получить и производную от среднего значения величины F по общей формуле (1.4.35) для средних значений:

$$\frac{d}{dt}\langle F \rangle = \left\langle \frac{dF}{dt} \right\rangle = \int \Psi^*(\xi, t) \widehat{\frac{dF}{dt}} \Psi(\xi, t) d\xi. \quad (1.4.36)$$

Вид искомого оператора легко получить дифференцированием выражения (1.4.35), выполняя дифференцирование под знаком интеграла и рассматривая подынтегральное выражение как произведение трех сомножителей:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle F \rangle &= \langle \partial_t \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{F} | \partial_t \Psi \rangle = \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \hat{H} \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} | \Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | \hat{F} | \hat{H} \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.4.37)$$

Полная производная в этих вычислениях заменена частной, поскольку волновые функции и оператор $\hat{F}$ зависят от времени только явно. Преобразуем теперь первое слагаемое в последней строке (1.4.37), учитывая самосопряженность гамильтониана:

$$\langle \hat{H} \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \langle \hat{H} \Psi | \hat{F} \Psi \rangle = \langle \hat{F} \Psi | \hat{H} \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \hat{H} \hat{F} | \Psi \rangle.$$

В результате (1.4.37) принимает вид:

$$\frac{d}{dt}\langle F \rangle = \langle \Psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} | \Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | [\hat{F}, \hat{H}] | \Psi \rangle = \langle \Psi | \widehat{\frac{dF}{dt}} | \Psi \rangle.$$

Чтобы данное равенство, в соответствии с определением (1.4.36), выполнялось для произвольного состояния Ψ , должно выполняться операторное равенство:

$$\widehat{\frac{dF}{dt}} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}]. \quad (1.4.38)$$

Выражение (1.4.38) решает поставленную задачу, т. е. дает определение *оператора производной по времени физической величины F* через частную производную оператора $\hat{F}$ по времени и коммутатор оператора $\hat{F}$ с гамильтонианом. Соотношение (1.4.38) можно понимать и как определение производной по времени оператора $\hat{F}$ физической величины F . т.е. оператора $\frac{d\hat{F}}{dt}$, не забывая при этом об условности этого понятия: это не определение производной по времени абстрактного оператора, а производная по времени оператора $\hat{F}$,

¹⁸правда, это случается крайне редко — лишь для некоторых характеристик системы, находящейся во внешнем переменном силовом поле

относящегося к конкретной квантовой системе с гамильтонианом $\hat{H}$. Поэтому, например, для свободного электрона $\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = 0$, а для электрона во внешнем поле с потенциальной энергией $U(\mathbf{r})$ оператор производной импульса уже отличен от нуля: $\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = -\nabla U(\mathbf{r})$.

По своей структуре соотношение (1.4.38) с $\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{d\hat{F}}{dt}$ аналогично соответствующему уравнению для производной по времени классической величины $\mathcal{F}(q_i, p_i, t)$ в механической системе с функцией Гамильтона $\mathcal{H}(q_i, p_i, t)$

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}\},$$

где

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{H}\} = \sum_i \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right)$$

— скобка Пуассона, и получается из него при помощи формальных замен:

$$\mathcal{F} \rightarrow \hat{F}; \quad \mathcal{H} \rightarrow \hat{H}; \quad \{\dots, \dots\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[\dots, \dots]. \quad (1.4.39)$$

По аналогии второе слагаемое в правой части (1.4.38) называется **квантовой скобкой Пуассона**.

С помощью (1.4.38) можно получить следующие соотношения:

$$\frac{d}{dt}(\alpha \hat{F}) = \alpha \frac{d\hat{F}}{dt}, \alpha = \text{const}; \quad \frac{d}{dt}(\hat{F} + \hat{G}) = \frac{d\hat{F}}{dt} + \frac{d\hat{G}}{dt}; \quad \frac{d}{dt}(\hat{F}\hat{G}) = \frac{d\hat{F}}{dt}\hat{G} + \hat{F}\frac{d\hat{G}}{dt},$$

аналогичные соответствующим формулам математического анализа для дифференцирования функций (следует лишь соблюдать порядок следования сомножителей в произведениях операторов).

1.4.6. Интегралы состояния

Интегралом состояния квантовой системы (или сохраняющейся величиной) называется физическая величина, среднее значение которой в любом состоянии рассматриваемой квантовой системы не зависит от времени.

В соответствии с формулой (1.4.36) критерием сохранения величины F является обращение в нуль оператора ее производной по времени $\frac{d\hat{F}}{dt}$ или, согласно уравнению (1.4.38), выполнение условия

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{H}] = 0. \quad (1.4.40)$$

Можно также сказать, что величина F сохраняется, если оператор ее производной равен нулю.

С точностью до замен (1.4.39) условие (1.4.40) аналогично соответствующему условию сохранения величины $\mathcal{F}(q_i, p_i, t)$ в классической механике (где она называется интегралом движения механической системы). В механике скобка Пуассона, построенная из классических интегралов движения $\mathcal{F}$ и $\mathcal{G}$, сама является интегралом движения. На

основании критерия (1.4.40) можно показать, что и в квантовой механике величина, соответствующая коммутатору операторов двух сохраняющихся величин, также является интегралом состояния.

В наиболее важном случае, когда оператор $\hat{F}$ не зависит от времени (т. е. его частная производная по времени равна нулю), величина F , согласно (1.4.40), сохраняется *только в случае коммутативности $\hat{F}$ с гамильтонианом*. Таким образом, наличие интегралов состояния полностью определяется типом физического взаимодействия в квантовой системе, т. е. видом гамильтониана $\hat{H}$, а точнее — его пространственно-временной симметрией.

1.4.7. Связь законов сохранения с симметрией пространства и времени

Закон сохранения и превращения энергии. Опытным путем установлено, что время течет равномерно в отсутствии гравитационного поля. Это означает, что любой момент времени можно принять за начало отсчета времени. Такое свойство времени называют его *однородностью*.

Рассмотрим замкнутую систему. Её полная энергия не изменяется во времени. Поэтому можно написать, что

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0,$$

где $\hat{H}$ — оператор Гамильтона. Составим уравнение (1.4.38) для оператора Гамильтона:

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{H} - \hat{H}\hat{H}).$$

Но так как все слагаемые справа равны нулю, то мы тот час же получаем $\frac{d\hat{H}}{dt} = 0$. А тогда для среднего значения полной энергии замкнутой системы можно составить следующее выражение:

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = \int \Psi^* \frac{d\hat{E}}{dt} \Psi d\tau = \int \Psi^* \frac{d\hat{H}}{dt} \Psi d\tau = 0,$$

Но полученный результат и означает сохранение энергии в замкнутой системе.

Таким образом, в квантовой механике для замкнутой системы закон сохранения и превращения энергии выполняется для среднего значения полной энергии, в то время как в классической механике этот закон выполняется точно в любой момент времени. Вместе с тем, мы установили связь закона сохранения и превращения энергии с однородностью хода времени.

Закон сохранения количества движения. Покажем, что закон сохранения количества движения следует из однородности пространства. Пусть состояние частицы (системы) задается волновой функцией $\Psi(r)$, за некоторый промежуток времени частица переместится на некоторое расстояние δr и её состояние определится новой функцией $\Psi(r + \delta r)$. Считая перемещение δr малой величиной по сравнению с r , произведем разложение волновой функции в ряд Тейлора, учтем лишь первые два члена разложения:

$$\Psi(r + \delta r) = \Psi(r) + \delta r \frac{\partial \Psi(r)}{\partial r} + \dots = \left(1 + \delta r \frac{\partial}{\partial r} \right) \Psi(r).$$

Рассматривая это равенство как операторное уравнение, можно выражение, стоящее в скобках, считать оператором, который, действуя на функцию $\Psi(r)$ преобразует ее в функцию $\Psi(r + \delta r)$. Назовем оператор $\left(1 + \delta r \frac{\partial}{\partial r}\right)$ оператором *переноса* или *трансляции* и обозначим его символом:

$$\hat{T} = \left(1 + \delta r \frac{\partial}{\partial r}\right). \quad (1.4.41)$$

Составим коммутатор оператора Гамильтона и оператора трансляции:

$$[\hat{H}, \hat{T}] = \hat{H}\hat{T} - \hat{T}\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right) \left(1 + \delta r \frac{\partial}{\partial r}\right) - \left(1 + \delta r \frac{\partial}{\partial r}\right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right).$$

Упростим задачу. Предположим, что внешнее поле отсутствует, т. е. $U = 0$. А тогда в коммутаторе остаются лишь дифференциальные операторы, которые переставимы и коммутатор оказывается тождественно равным нулю. А это означает, что операторы $\hat{H}$ и $\hat{T}$ коммутируют. Чтобы выяснить смысл полученного результата, преобразуем оператор трансляции $\hat{T}$, выразив его через оператор импульса $\hat{p}$. Оператор $\hat{T}$ содержит два члена, но первое — просто число, следовательно, действие оператора трансляции связано с действием второго члена $\delta r \frac{\partial}{\partial r}$. Множитель δr является постоянной величиной, поэтому активной частью оператора трансляции является оператор дифференцирования $\frac{\partial}{\partial r}$, который легко связать с оператором импульса, откуда $\frac{\partial}{\partial r} = \frac{i}{\hbar}\hat{p}$. Таким образом, с точки зрения операторного действия операторы импульса и трансляции с точностью до постоянных множителей эквивалентны друг другу. Поэтому, справедливо следующее равенство:

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = \frac{d\hat{p}}{dt} = 0,$$

что следует из коммутации оператора трансляции с оператором Гамильтона и независимости этого оператора от времени.

Если составить выражение для $\frac{d\langle p \rangle}{dt} = 0$, то мы тотчас же получаем закон сохранения количества движения для замкнутой системы, не подверженной действию внешних сил (полей):

$$\langle p \rangle = \text{const.}$$

Все, что было сказано выше об условиях выполнимости законов сохранения в квантовой механике, имеет прямое отношение и к закону сохранения импульса. В рассматриваемом случае: закон сохранения выполняется в замкнутой системе лишь для среднего значения импульса. Напомним еще раз, что это есть результат проявления корпускулярно-волнового дуализма квантовых систем. Таким образом, мы установили связь закона сохранения импульса с однородностью пространства.

Закон сохранения момента количества движения. Установим связь закона сохранения момента количества движения с изотропией пространства. *Изотропия* пространства (равноправие всех направлений) проявляется в инвариантности свойств замкнутых систем относительно произвольных поворотов. Такая инвариантность имеет место для

систем, находящихся в центрально-симметричном поле, если поворот осуществляется относительно центра поля.

Определим оператор бесконечно малого поворота. Будем обозначать бесконечно малый поворот на угол $\delta\varphi$ вектором $\delta\vec{\varphi}$, направленным вдоль оси вращения и по абсолютной величине равным углу поворота. Изменение радиуса-вектора $\vec{r}$ при таком повороте определяется выражением:

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r} + [\delta\vec{\varphi} \cdot \vec{r}].$$

Вычислим соответствующее изменение волновой функции, учитывая лишь первые два члена в разложении волновой функции в ряд Тейлора:

$$\Psi(\vec{r} - [\delta\vec{\varphi} \cdot \vec{r}]) = (1 - \delta\vec{\varphi}[\vec{r} \cdot \nabla]) \Psi(\vec{r}).$$

Как и в случае установления вида оператора трансляции видим, что в качестве оператора поворота на бесконечно малый угол $\delta\varphi$ можно взять оператор

$$\widehat{R}_{\delta\varphi} = 1 - \delta\vec{\varphi}[\vec{r} \cdot \nabla]. \quad (1.4.42)$$

Сравним (1.4.42) с оператором момента количества движения (таблица 1.1):

$$\widehat{R}_{\delta\varphi} = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \cdot \widehat{\mathbf{L}}\right). \quad (1.4.43)$$

Инвариантность оператора Гамильтона относительно произвольных бесконечно малых поворотов определяется его коммутацией с оператором $\widehat{R}_{\delta\varphi}$ или с проекцией оператора углового момента на произвольное направление оси вращения

$$\vec{n} \widehat{\mathbf{L}} \widehat{H} = \widehat{H} \vec{n} \widehat{\mathbf{L}},$$

где $\vec{n}$ — единичный вектор оси вращения. Из этого равенства следует, что в свободном пространстве, а так же в любом центрально-симметричном поле интегралом движения является проекция момента на произвольное направление. Из операторов бесконечно малых поворотов вокруг некоторой оси, определяемой единичным вектором $\vec{n}$, можно составить оператор поворота вокруг той же оси на любой конечный угол.

Если внешнее поле имеет аксиальную симметрию, то оператор Гамильтона инвариантен лишь по отношению к вращению вокруг аксиальной оси симметрии и сохраняется только проекция углового момента на это направление.

В сферически-симметричных (центральных) силовых полях сохраняется квадрат орбитального момента. В классической механике в этом случае вместо L_z и $\mathbf{L}^2$ интегралом движения является вектор орбитального момента $\mathbf{L}$ (и, естественно, все его декартовы компоненты). В квантовой механике его декартовы компоненты неизмеримы совместно, зато совместно измеримыми будут квадрат орбитального момента вместе с любой декартовой компонентой.

Рассмотренные выше преобразования трансляции и поворота относятся к классу непрерывных преобразований. Инвариантность оператора Гамильтона по отношению к этим преобразованиям приводит к законам сохранения энергии, импульса и момента импульса, которые соответствуют законам сохранения классической механики.

Наряду с непрерывными преобразованиями условия симметрии могут приводить к дискретным преобразованиям, не сводящимся к бесконечно малым. Однако, в классической механике инвариантность к таким преобразованиям не приводит к законам сохранения. В квантовой механике отсутствует принципиальное различие между непрерывными и дискретными преобразованиями, поэтому законы сохранения в квантовой механике следуют и из инвариантности по отношению к дискретным преобразованиям.

Преобразование инверсии. Операция *пространственной инверсии* (отражения) состоит в замене $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$. Соответствующий оператор обозначается $\hat{I}$ и определяется следующим образом:

$$\hat{I}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r}). \quad (1.4.44)$$

В двумерном случае после отражения $(x, y) \rightarrow (-x, -y)$ новая система координат с помощью поворота на 180° превращается в исходную, так что такое преобразование нельзя считать инверсией. В трехмерном же случае после отражения трех осей изменяется *ориентация* системы координат: правая система превращается в левую и наоборот. При этом исходная и новая системы координат не сводятся друг к другу с помощью поворотов. Именно такое преобразование является инверсией.

Приведем явный вид преобразования инверсии в трехмерном пространстве в наиболее важных системах координат:

декартовы координаты: $x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z$;

сферические координаты: $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \pi + \varphi$.

Найдем собственные значения и собственные функции оператора инверсии. В соответствии с (1.4.44) и из определения единичного оператора следует, что $\hat{I}^2 = 1$. Поэтому оператор $\hat{I}^2$ имеет лишь единственное собственное значение, равное единице. Спектр оператора $\hat{I}$, очевидно, будет состоять из двух собственных значений, равных ± 1 :

$$\hat{I}\Psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \pm\Psi_{\pm}(\mathbf{r}). \quad (1.4.45)$$

Таким образом, *собственными функциями оператора инверсии являются любые четные и нечетные функции, удовлетворяющие стандартным условиям.*

Физическая характеристика системы, соответствующая оператору инверсии, называется **четностью** и обозначается буквой P . Она не имеет классического аналога и свойственна лишь квантовому описанию явлений в микромире. В отличие от известных прежде характеристик квантовой системы, *четность не аддитивна, а мультипликативна*, т. е. в состояниях с определенной четностью четность составной системы равняется произведению четностей составляющих ее частей. Состояния с четностью $+1$ называются *четными*, а с четностью -1 — *нечетными*.

Благодаря коммутации оператора инверсии с оператором Гамильтона мы устанавливаем новый закон сохранения — **закон сохранения четности**. Четность состояния является интегралом движения. Однако в 1956 году три физика Ли, Янг и Ву установили, что при слабых взаимодействиях (они наблюдали распад K -мезонов) закон сохранения четности не выполняется. Академик Л. Ландау ввел *комбинированный закон сохранения четности*: к пространственной инверсии необходимо добавить изменение знака заряда

(т. е. частицу заменить античастицей). В 70-х гг. XX в. был постулирован усложненный закон сохранения, так называемый *закон сохранения PCT*. Для выполнения этого закона необходимо не только изменить знак у координат, заменить частицу на античастицу, но и заменить T на $(-T)$, где T — временная координата, относительно которой уравнение Шредингера не обладает симметрией (в уравнении Шредингера производная по времени — первого порядка и соответствующий член изменяет свой знак при изменении направления хода времени).

Полные наборы интегралов состояния. Познакомившись с основными положениями квантовой механики, можно более детально рассмотреть вопрос об иерархии возможных состояний квантовой системы. Мы будем рассматривать наиболее важный случай, когда гамильтониан не зависит от времени и следовательно существуют *стационарные* состояния системы, в которых энергия сохраняется, а вся временная зависимость волновой функции описывается простым экспоненциальным множителем (см. выражение (1.4.32)). Это один из возможных типов квантовых состояний системы. Конечно, можно приготовить систему в момент времени $t = 0$ и в произвольной суперпозиции стационарных состояний с различными энергиями, но теперь уже при $t > 0$ система будет находиться в *нестационарном* состоянии, ее волновая функция будет сложным образом зависеть от времени, и каждое измерение энергии будет давать лишь одно из собственных значений гамильтониана. Ясно, что в нестационарных состояниях система описывается менее полным образом, чем в стационарных (теряется информация об одной из возможных характеристик системы — энергии), хотя формально такие состояния наравне со стационарными входят в полную совокупность возможных квантовых состояний системы (образующих гильбертово пространство функций). Эта ситуация кардинально отлична от классической механики, в которой любое механическое состояние системы в любой момент времени описывается с одинаковой степенью полноты заданием обобщенных координат и импульсов. Поэтому возникает вопрос, какие состояния квантовой системы можно считать описанными наиболее полным образом (или, по-другому, в каких состояниях должна находиться система, чтобы путем измерений можно было получить наиболее детальную информацию о физических характеристиках системы, допускаемую квантовой механикой)? Ответ на этот вопрос дают теоремы о существовании интегралов состояния и об условиях совместной измеримости нескольких физических величин: максимально полно описанное квантовое состояние характеризуется максимальным числом *независимых совместно измеримых* интегралов состояния рассматриваемой квантовой системы (эта совокупность интегралов состояния называется **полным набором**). Поскольку не все интегралы состояния данной квантовой системы одновременно измеримы (т. е. соответствующие операторы коммутируют), полные наборы могут быть выбраны по-разному. В качестве примера укажем, что для свободной частицы полный набор сохраняющихся величин может включать как импульс $\mathbf{p}$, так и E , L_z и $\mathbf{L}^2$. Как видно, в обоих случаях максимально полно описанные квантовые состояния характеризуются тремя независимыми сохраняющимися физическими характеристиками, число которых равно числу степеней свободы частицы.

Поскольку общая система собственных функций эрмитовых операторов, соответствующих полному набору интегралов состояния, образует базис гильбертова пространства, можно сказать, что волновая функция любого квантового состояния является либо

одним из элементов этого базиса (тогда это состояние описывается наиболее полным образом), либо может быть представлена в виде линейной суперпозиции волновых функций указанного базисного набора полным образом описанных состояний (тогда это состояние описано менее информативно, чем это в принципе допускается квантовой механикой). В более общей формулировке квантовой механики состояния, описываемые (любой) волновой функцией, называются «чистыми». Оказывается, квантовая система может находиться и в состояниях (называемых «смешанными»), которым нельзя приписать определенную волновую функцию, а можно указать лишь *вероятности* нахождения системы в различных чистых состояниях.

2. Квантовая механика. Простейшие задачи

2.1. Одномерное движение. Общие положения

2.1.1. Частица в прямоугольной потенциальной яме

2.1.2. Прохождение через потенциальный барьер

2.1.3. Линейный гармонический осциллятор

2.1.4. Одномерное движение в однородном поле

2.2. Момент количества движения (момент импульса)

2.3. Общие свойства движения в центральном поле

2.4. Задача двух тел

2.5. Движение в кулоновском поле притяжения. Атом водорода

2.5.1. Распределение заряда электрона в атоме

2.5.2. Токи в атомах. Магнетон

3. Квантовая механика. Теория представлений

- 3.1. Различные представления волновой функции
- 3.2. Дираковский формализм
- 3.3. Теория представлений для операторов физических величин
- 3.4. Теория представлений и наблюдаемые величины. Матричная механика
- 3.5. Энергетическое и импульсное представления уравнения Шредингера
- 3.6. Матричная форма оператора производной по времени величины F
- 3.7. Унитарные преобразования
- 3.8. Представления зависимости операторов и волновых функций от времени

4. Квантовая механика. Приближенные методы

Аналитическое решение стационарного уравнения Шредингера существует лишь для весьма ограниченного круга потенциалов (осцилляторный, кулоновский и некоторые другие), так что в большинстве случаев для определения волновых функций и спектра энергий требуется использование численных методов. Поэтому важным вопросом квантовой теории является развитие методов приближенного решения уравнения Шредингера с той или иной точностью в замкнутом (*аналитическом*) виде, основанного на ряде допущений (приближений), связанных с характером конкретной задачи (или целого класса таких задач). Несмотря на то, что все приближенные методы имеют ограниченную область применимости, зависящую от характера сделанных приближений, они позволяют качественно, а порой и количественно, описать конкретный квантовый процесс.

4.1. Квазиклассическое приближение

Одним из приближенных методов решения квантовомеханических задач является *квазиклассическое приближение*. Как будет показано ниже, в некоторых случаях (например, при плавном изменении потенциала внешнего поля) поведение квантовой системы определяется классическими законами, а квазиклассическое решение уравнения Шредингера с асимптотической точностью (т. е. решение тем ближе к точному, чем точнее выполняются условия применимости) определяет точное решение. Более того, несмотря на название, квазиклассическое приближение позволяет предсказать ряд эффектов, не имеющих классических аналогов (например, туннельный эффект), а также с экспоненциальной точностью рассчитать их наблюдаемые характеристики.

4.1.1. Связь квантовой механики с классической. Теорема Эренфеста

Обладая корпускулярно-волновыми свойствами, удовлетворяя соотношениям неопределенностей Гейзенберга, элементарные частицы не могут изменять свое состояние согласно уравнениям движения классической физики. Действительно, эти уравнения выражают аналитическую связь между координатами и импульсами, заданными в определенный момент времени. Вместе с тем, знание волновой функции состояния частицы позволяет рассчитать среднее значение любой физической характеристики этой частицы. Возникает вопрос: не подчиняются ли усредненные величины каким-либо уравнениям, являющимися аналогами классических уравнений движения?

Эту задачу решил голландский физик Пауль Эренфест, живший, кстати, некоторое время в России и имевший тесную связь с российскими физиками.

Составим уравнение (1.4.38) для оператора координаты x и затем для оператора проекции импульса на ту же ось, причем, будем считать, что эти операторы явно от времени не зависят (для простоты ограничимся одномерным случаем):

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H}), \quad \frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{H}). \quad (4.1.1)$$

Формулы (4.1.1) носят название *квантовых уравнений движения*. Рассмотрим первое

из этих уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{x}}{dt} &= \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H}) = \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V \right) x - x \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V \right) \right] = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hat{p}}{m}.\end{aligned}\quad (4.1.2)$$

Составим выражение для среднего значения производной от координаты:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int \Psi^* \frac{d\hat{x}}{dt} \Psi d\tau = \int \Psi^* \frac{\hat{p}}{m} \Psi d\tau = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle = \langle v_x \rangle. \quad (4.1.3)$$

Выражение $\frac{dx}{dt} = v_x$ в классической механике выполняется строго в любой момент времени. В квантовой же механике соотношение (4.1.3) выполняется лишь для средних величин. Это есть проявление корпускулярно-волнового дуализма, невозможность одновременно задать точное положение (координату x) частицы и соответствующую проекцию ее импульса, которые удовлетворяют соотношению неопределенностей Гейзенберга. Можно сделать следующий вывод: классическое уравнение $\frac{dx}{dt} = v_x$, которое в классической механике выполняется строго в любой момент времени, в квантовой механике справедливо только для усредненных величин:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle, \quad (4.1.4)$$

которое получило название *1-ого уравнения Эрнфеста*. Последний вывод указывает на одну из форм связи классической и квантовой механик. Позже мы вернемся к этой проблеме и сформулируем так называемый *принцип соответствия*, согласно которому всякая более общая физическая теория содержит в себе предшествующую теорию. С полным правом мы можем считать квантовую механику более общей теорией. Поэтому соотношение классических и квантовомеханических уравнений движения — это одно из выражений принципа соответствия.

Рассмотрим второе квантово-механическое уравнение движения:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{p}_x}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V \right) \right] = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\{ \left[V \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] - \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (V) \right] \right\} = \frac{i}{\hbar} \left\{ -i\hbar V \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar \left(\frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} = -\frac{\partial V}{\partial x}.\end{aligned}$$

Итак,

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} = \hat{F}_x, \quad (4.1.5)$$

где использована установленная в классической механике связь между $\frac{\partial V}{\partial x}$ и F_x , а затем применено правило сопоставления классической функции эрмитового оператора. Далее воспользуемся формулой для среднего значения физической величины, в качестве которой возьмем $\frac{d\langle p_x \rangle}{dt}$:

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = \int \Psi^* \frac{d\hat{p}_x}{dt} \Psi d\tau = \int \Psi^* \hat{F}_x \Psi d\tau = \langle F_x \rangle,$$

или

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = \langle F_x \rangle. \quad (4.1.6)$$

Мы получили уравнение (4.1.6), которое в квантовой механике называют *2-м уравнением Эренфеста*. В классической механике это уравнение является точным и выражает 2-ой закон Ньютона в импульсной форме. В квантовой же механике это уравнение справедливо только для усредненных величин. И все, что сказано при анализе 1-го уравнения Эренфеста о связи с принципом соответствия, остается справедливым и в отношении уравнения (4.1.6). Соотношения (4.1.4) и (4.1.6) также называют *теоремами Эренфеста*. Комбинируя их, получим выражение:

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = \langle F_x \rangle \equiv - \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle, \quad (4.1.7)$$

где $F \equiv \frac{dV(x)}{dx}$ — классическая сила, действующая на частицу со стороны поля.

Уравнение (4.1.7) есть квантовый аналог уравнения Ньютона, однако следует отметить принципиальную разницу между (4.1.7) и вторым законом Ньютона. Действительно, в законе Ньютона сила, действующая на частицу, вычисляется *локально* в точке $\langle x \rangle$, в которой находится частица, в то время как в «квантовое уравнение Ньютона» (4.1.7) входит сила, *усредненная по всему пространству*, а не $F(\langle x \rangle)$. Однако, если состояние $\Psi(x, t)$ локализовано в малой области Δ_x , включающей точку $\langle x \rangle$, то соотношение (4.1.7) можно упростить. Основной вклад в интеграл для среднего значения дает область Δ_x , поэтому, считая $V(x)$ плавной функцией внутри области локализации частицы, разложим производную dV/dx в ряд Тейлора по степеням $x - \langle x \rangle$:

$$\frac{dV}{dx} = \frac{dV(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle} + \frac{d^2 V(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle^2} (x - \langle x \rangle) + \frac{1}{2} \frac{d^3 V(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle^3} (x - \langle x \rangle)^2 + \dots, \quad (4.1.8)$$

где $\frac{d^n V(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle^n} \equiv \frac{d^n V(x)}{dx^n} \Big|_{x=\langle x \rangle}$ и подставим (4.1.8) в (4.1.7). Учитывая условия нормировки волновой функции на единицу, а также нулевой вклад линейного по $x - \langle x \rangle$ слагаемого при усреднении (4.1.8), имеем:

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = - \frac{dV(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle} - \frac{1}{2} \frac{d^3 V(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle^3} \langle (\Delta x)^2 \rangle + \dots, \quad (4.1.9)$$

Отсюда видно, что условие перехода теоремы Эренфеста (4.1.7) во второй закон Ньютона определяется неравенством:

$$\left| \frac{dV(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle} \right| \gg \left| \frac{d^3 V(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle^3} \right| \Delta_x^2. \quad (4.1.10)$$

Итак, движение «центра масс» пространственного распределения частицы тем лучше описывается уравнением Ньютона, чем слабее потенциал зависит от координаты и чем ближе это распределение к точечному. Следует отметить, что вследствие принципа неопределенности пространственная локализация волновой функции приводит к разбросу значений импульса частицы и, как следствие, к нарушению классического понимания кинетической энергии. Поэтому, помимо соотношения (4.1.10), должно выполняться равенство:

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\langle p \rangle^2}{2m} + \frac{\langle (\Delta p)^2 \rangle}{2m} \approx \frac{\langle p \rangle^2}{2m}. \quad (4.1.11)$$

Чтобы выполнялось (4.1.11), необходимо выполнение условия

$$\langle p \rangle^2 \gg \langle (\Delta p)^2 \rangle. \quad (4.1.12)$$

Таким образом, *квантовая частица ведет себя подобно классической, если движется в достаточно плавном потенциале с большим импульсом.*

В заключение приведем численную оценку границ применимости классических законов на примере движения частицы массы m по круговой орбите радиуса a вокруг силового центра, создающего потенциал γr . Подставляя явный вид $V(r) = \frac{m\gamma}{r}$ в (4.1.10), получим:

$$\gamma^2 \gg \langle (\Delta x)^2 \rangle,$$

что вместе с (4.1.12) дает следующее неравенство

$$\gamma^2 p^2 \gg \langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \sim \frac{\hbar^2}{4}.$$

Очевидно, что для макроскопических объектов (для которых $\frac{\gamma p}{\hbar} \gg 1$) данное неравенство выполняется с высокой степенью точности.

4.1.2. Квазиклассическое приближение

В 1926 году Н.Бор сформулировал новый физический принцип — **принцип соответствия**: *каждая более общая физическая теория должна включать в себя как предельный случай предшествующую теорию.* Благодаря принципу соответствия устанавливаются границы применимости предшествующей теории. Несмотря на то, что принцип был сформулирован лишь в 1926 году, но оказалось, что созданные ранее физические теории удовлетворяют ему. Например, электродинамика Максвелла для статических и стационарных процессов давала те же результаты, что и электродинамика Кулона-Ампера-Вебера, основанная на идее дальнего действия. Аналогично, специальная теория относительности (СТО) включает в себя в качестве предельного случая классическую механику. Критерием применимости классических представлений является выполнимость соотношения $\frac{v}{c} \ll 1$. Однако, нужно иметь в виду, что и при этих условиях справедлива СТО, только её поправками к классическим результатам в отдельных случаях можно пренебречь. Например, для покоящегося тела, когда, казалось бы, можно пользоваться классической механикой, СТО дает принципиально новый результат $E_0 = mc^2$, которого просто нет в классической физике.

Квантовая механика содержит в себе идею М. Планка, согласно которой происходит скачкообразное, дискретное изменение физических характеристик элементарных частиц. Практически во все квантово-механические формулы входит постоянная Планка. Если составить выражение для изменения энергии при квантовом переходе $\Delta E = \hbar(\omega_2 - \omega_1)$, то, устремляя постоянную Планка к нулю, мы тотчас-же получим непрерывность изменения энергетического состояния, т. к. изменение энергии становится бесконечно малым.

Итак, мы получаем первый способ перехода от квантово-механических выражений к выражениям классической механики: необходимо считать, что постоянная Планка равна нулю. Однако, не всегда такой предельный переход приводит к физически разумным результатам.

Действительно, такой «простой» прием перехода от формул квантовой механики к формулам классической физики невозможно осуществить применительно к основному уравнению квантовой механики — к уравнению Шредингера (1.4.1). Если следовать установленному рецепту для выполнения принципа соответствия, то исчезают два члена в этом уравнении и оставшееся равенство не имеет разумного физического смысла: $V\Psi = 0$.

В таких случаях, когда прямой предельный переход невозможен (он приводит к абсурду), необходимо предварительно провести некоторые преобразования с рассматриваемым выражением.

Выясним теперь, как выглядит волновая функция квантовой частицы с массой m в поле $V(\mathbf{r}, t)$ в пределе, когда ее квантовое описание с помощью уравнения Шредингера (1.4.9) наиболее близко к классическому, и получим более строгое условие применимости квазиклассического подхода. Воспользуемся следующим представлением волновой функции:

$$\Psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r}, t)\right), \quad (4.1.13)$$

где $S(\mathbf{r}, t)$ — некоторая новая неизвестная функция. Подстановка (4.1.13) в уравнение (1.4.9) приводит к следующему уравнению для $S(\mathbf{r}, t)$:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S + V(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (4.1.14)$$

Если пренебречь последним слагаемым, *пропорциональным $\hbar$* , уравнение (4.1.14) совпадает по форме с *классическим уравнением Гамильтона-Якоби*:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (4.1.15)$$

где функция S имеет размерность классического действия (как и постоянная Планка) и называется *функцией действия*.

Если потенциальная энергия не зависит от времени, то в уравнениях (4.1.14) и (4.1.15) пространственные и временные переменные разделяются, и $S(\mathbf{r}, t)$ можно представить в виде:

$$S(\mathbf{r}, t) = S_0(\mathbf{r}) - Et, \quad (4.1.16)$$

где $S_0(\mathbf{r})$ — так называемое *укороченное действие*. Подставляя (4.1.16) в (4.1.14), получим:

$$\frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S_0 + V(\mathbf{r}) = E, \quad (4.1.17)$$

что отличается от соответствующего классического уравнения Гамильтона-Якоби для укороченного действия

$$\frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2 + V(\mathbf{r}) = E, \quad (4.1.18)$$

отсутствием в левой части слагаемого, пропорционального $\hbar$. Исследуем более подробно переход от (4.1.17) к (4.1.18). Он возможен при выполнении неравенства

$$\hbar|\nabla^2 S_0| \ll (\nabla S_0)^2. \quad (4.1.19)$$

С учетом соотношения $\nabla S_0 = \mathbf{p}$, где $\mathbf{p}$ — классический импульс¹⁹, определяемый соотношением

$$\mathbf{p}^2 = 2m[E - V(\mathbf{r})],$$

условие (4.1.19) принимает вид:

$$\hbar |\operatorname{div} \mathbf{p}| \ll \mathbf{p}^2. \quad (4.1.20)$$

Учитывая, что $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m[E - V(\mathbf{r})]}}$ — длина волны де-Бройля, неравенство (4.1.19)

может быть переписано через длину волны де-Бройля:

$$|\operatorname{div} \lambda| \ll 2\pi, \quad (4.1.21)$$

или силу $\mathbf{F} = -\operatorname{grad} V$:

$$p^3 \gg \hbar m |\operatorname{grad} V|, \quad (4.1.22)$$

т.е. наши действия оправданы для быстрых частиц с малым градиентом поля. Если L — характерный размер области движения частицы (в случае финитного движения), то (учитывая, что в этом случае можно использовать следующую оценку: $\frac{d\lambda}{dx} \sim \frac{\lambda}{L}$) условие (4.1.21) можно сформулировать иначе:

$$\lambda \ll L, \quad (4.1.23)$$

т. е. *квазиклассическое описание квантовой системы возможно в том случае, если характерные размеры области движения намного превышают длину волны де-Бройля частицы.*

При выполнении условия (4.1.20) уравнение Шредингера переходит в уравнение Гамильтона-Якоби, т. е. движение частицы становится почти классическим (или *квазиклассическим*). В качестве малого безразмерного параметра здесь удобно рассматривать $\frac{\hbar}{S_0}$. Таким образом, переход от квантовой механики к классической осуществляется или непосредственно, или после некоторых преобразований формальным взятием предела $\hbar \rightarrow 0$ ²⁰. Физическим смыслом этого действия является пренебрежение дискретным изменением физических характеристик в классической физике. Ранее, выводя уравнения Эренфеста, мы установили, что формулы классической механики в квантовой механике выполняются только для средних величин. Причем, усреднение физических характеристик должно быть произведено по формулам квантовой механики. Эти же формулы учитывают корпускулярно-волновой дуализм элементарных частиц. Поэтому мы можем сформулировать еще один критерий перехода от квантовой механики к классической: *классическая механика справедлива тогда, когда можно пренебречь корпускулярно-волновым дуализмом элементарных частиц.*

¹⁹Классический импульс является функцией координат, и его не следует отождествлять с квантовым импульсом частицы, который совместно неизмерим с координатой.

²⁰напомним, что переход от релятивистской физики к нерелятивистской происходит при $c \rightarrow \infty$.

- 4.1.3. Метод ВКБ
- 4.1.4. Граничные условия в методе ВКБ
- 4.1.5. Формула квантования Бора-Зоммерфельда. Нормировка квазиклассических волновых функций
- 4.1.6. Прохождение частицы через потенциальный барьер в квазиклассическом приближении
- 4.2. Стационарная теория возмущений
 - 4.2.1. Теория возмущений для невырожденного уровня
 - 4.2.2. Теория возмущений при наличии двух близких уровней
 - 4.2.3. Теория возмущений при наличии вырождения
- 4.3. Вариационный метод
 - 4.3.1. Вариационный принцип
 - 4.3.2. Вариационный метод Ритца
 - 4.3.3. Вариационный вывод уравнения Шредингера для стационарных состояний

5. Квантовая механика. Нерелятивистская теория спина

5.1. Собственный механический момент электрона (спин)

5.2. Оператор спина и матрицы Паули

5.3. Спиновая зависимость волновых функций

5.4. Уравнение Паули

5.5. Эффект Зеемана

5.6. Элементы квантовой теории углового момента

5.6.1. Общие свойства углового момента

5.6.2. Сложение моментов

5.6.3. Волновые функции составной системы

5.6.4. Спин-орбитальное взаимодействие

5.6.5. Аномальный эффект Зеемана

6. Квантовая механика. Системы тождественных частиц

6.1. Оператор перестановки. Принцип тождественности

6.2. Симметричные и антисимметричные волновые функции

6.3. Системы невзаимодействующих тождественных частиц. Принцип Паули

6.4. Теория атома гелия и гелиеподобных ионов

6.4.1. Гамильтониан и волновые функции

6.4.2. Основное состояние

6.4.3. Возбужденные состояния

6.5. Сложные атомы. Метод Хартри

6.6. Периодическая система элементов Менделеева

Содержание

1. Квантовая механика. Основы	1
1.1. Предпосылки возникновения квантовой механики	1
1.1.1. Ультрафиолетовая катастрофа и гипотеза Планка	1
1.1.2. Фотоэлектрический эффект. Эффекта Комптона	3
1.1.3. Закономерности в атомных спектрах. Модель атома Томсона. Опыты Резерфорда	5
1.1.4. Постулаты Бора. Модель атома водорода по Бору	7
1.1.5. Гипотеза де Бройля и её опытное подтверждение	8
1.2. Квантовые состояния	11
1.2.1. Волновые функции	11
1.2.2. Принцип суперпозиции состояний	14
1.2.3. Нормировка волн де-Бройля и некоторые ее свойства	15
1.3. Физические величины в квантовой теории	17
1.3.1. Алгебра операторов	19
1.3.2. Эрмитово сопряжение операторов	21
1.3.3. Определенные значения физических величин	22
1.3.4. Измеримость физической величины в квантовой механике	23
1.3.5. Свойства собственных функций и собственных значений линейного эрмитового оператора. Случай дискретного спектра	25
1.3.6. Свойства собственных функций и собственных значений линейного эрмитового оператора. Случай непрерывного спектра	27
1.3.7. Одновременно измеримые величины	29
1.3.8. Соотношения неопределенностей	31
1.4. Квантовая динамика	33
1.4.1. Временное уравнение Шредингера	34
1.4.2. Плотность потока вероятности	37
1.4.3. Стационарные состояния	38
1.4.4. Закон причинности в квантовой механике	41
1.4.5. Дифференцирование операторов по времени	41
1.4.6. Интегралы состояния	43
1.4.7. Связь законов сохранения с симметрией пространства и времени	44
2. Квантовая механика. Простейшие задачи	50
2.1. Одномерное движение. Общие положения	50
2.1.1. Частица в прямоугольной потенциальной яме	50
2.1.2. Прохождение через потенциальный барьер	50
2.1.3. Линейный гармонический осциллятор	50
2.1.4. Одномерное движение в однородном поле	50
2.2. Момент количества движения (момент импульса)	50
2.3. Общие свойства движения в центральном поле	50
2.4. Задача двух тел	50
2.5. Движение в кулоновском поле притяжения. Атом водорода	50
2.5.1. Распределение заряда электрона в атоме	50

2.5.2. Токи в атомах. Магнетон	50
3. Квантовая механика. Теория представлений	51
3.1. Различные представления волновой функции	51
3.2. Дираковский формализм	51
3.3. Теория представлений для операторов физических величин	51
3.4. Теория представлений и наблюдаемые величины. Матричная механика	51
3.5. Энергетическое и импульсное представления уравнения Шредингера	51
3.6. Матричная форма оператора производной по времени величины F	51
3.7. Унитарные преобразования	51
3.8. Представления зависимости операторов и волновых функций от времени	51
4. Квантовая механика. Приближенные методы	52
4.1. Квазиклассическое приближение	52
4.1.1. Связь квантовой механики с классической. Теорема Эренфеста	52
4.1.2. Квазиклассическое приближение	55
4.1.3. Метод ВКБ	58
4.1.4. Граничные условия в методе ВКБ	58
4.1.5. Формула квантования Бора-Зоммерфельда. Нормировка квазиклассических волновых функций	58
4.1.6. Прохождение частицы через потенциальный барьер в квазиклассическом приближении	58
4.2. Стационарная теория возмущений	58
4.2.1. Теория возмущений для невырожденного уровня	58
4.2.2. Теория возмущений при наличии двух близких уровней	58
4.2.3. Теория возмущений при наличии вырождения	58
4.3. Вариационный метод	58
4.3.1. Вариационный принцип	58
4.3.2. Вариационный метод Ритца	58
4.3.3. Вариационный вывод уравнения Шредингера для стационарных состояний	58
5. Квантовая механика. Нерелятивистская теория спина	59
5.1. Собственный механический момент электрона (спин)	59
5.2. Оператор спина и матрицы Паули	59
5.3. Спиновая зависимость волновых функций	59
5.4. Уравнение Паули	59
5.5. Эффект Зеемана	59
5.6. Элементы квантовой теории углового момента	59
5.6.1. Общие свойства углового момента	59
5.6.2. Сложение моментов	59
5.6.3. Волновые функции составной системы	59
5.6.4. Спин-орбитальное взаимодействие	59
5.6.5. Аномальный эффект Зеемана	59

6. Квантовая механика. Системы тождественных частиц	60
6.1. Оператор перестановки. Принцип тождественности	60
6.2. Симметричные и антисимметричные волновые функции	60
6.3. Системы невзаимодействующих тождественных частиц. Принцип Паули . .	60
6.4. Теория атома гелия и гелиеподобных ионов	60
6.4.1. Гамильтониан и волновые функции	60
6.4.2. Основное состояние	60
6.4.3. Возбужденные состояния	60
6.5. Сложные атомы. Метод Хартри	60
6.6. Периодическая система элементов Менделеева	60