

Национальный исследовательский университет  
«Московский энергетический институт»

Институт тепловой и атомной энергетики

Кафедра инженерной теплофизики

**Семёнов Александр Моисеевич**

# **КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА**

*Электронное учебное пособие  
по дисциплине «Квантовая механика»  
для студентов профиля «Теплофизика»  
направления подготовки бакалавров  
140700 «Ядерная энергетика  
и теплофизика»*

Москва

2012

# ОГЛАВЛЕНИЕ

	стр.
ВВЕДЕНИЕ .....	7
ЛИТЕРАТУРА .....	14
1. КВАНТОВАЯ ФИЗИКА — РЕВОЛЮЦИЯ В ЕСТЕСТВОЗНАНИИ.....	16
1.1. Классическая картина мира .....	16
1.1.1. Мир материалов .....	16
1.1.2. Две формы существования материи .....	17
1.1.3. Вещество .....	17
1.1.4. Поле .....	19
1.1.5. Сосуществование вещества и поля .....	21
1.1.6. Экспериментальные факты, противоречащие классической физике .....	21
Вопросы для самопроверки .....	27
1.2. Классическая механика .....	28
1.2.1. Уравнения движения .....	28
1.2.2. Математическая модель .....	29
1.2.3. Потенциальная энергия .....	29
1.2.4. Энергия .....	30
1.2.5. Сохранение энергии .....	31
1.2.6. Импульс .....	33
1.2.7. Функция Гамильтона .....	33
1.2.8. Релятивистская механика .....	34
Вопросы для самопроверки .....	38
1.3. Классическая теория поля .....	39
1.3.1. Гравитационное поле .....	39
1.3.2. Закон всемирного тяготения .....	39
1.3.3. Потенциальная энергия силы тяготения .....	40
1.3.4. Сила тяготения .....	40
1.3.5. Общая теория гравитации .....	41
1.3.6. Электромагнитное поле .....	42
1.3.7. Уравнения электромагнитного поля .....	42
1.3.8. Электрическое поле .....	43
1.3.9. Напряжённость электрического поля .....	44
1.3.10. Другие поля .....	45
Вопросы для самопроверки .....	46
1.4. Основные принципы квантовой физики .....	46
1.4.1. Краткая история квантовой физики .....	46
1.4.2. Корпускулярно – волновой дуализм .....	59
1.4.3. Принцип неопределённостей .....	65
1.4.4. Вероятностный характер динамических событий .....	66
1.4.5. Крушение или рождение картины мира? .....	73
1.4.6. Принцип дополнительности Н. Бора .....	76
1.4.7. Почему мы не видим квантовых эффектов? .....	77
Вопросы для самопроверки .....	80
2. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА .....	82
2.1. Волновая функция .....	82
2.1.1. Волновая функция микрочастицы .....	82
2.1.2. Вероятностный смысл волновой функции .....	84
2.1.3. Статистические характеристики случайных величин .....	87

2.1.4. Статистические характеристики координат микрочастицы .....	89
Вопросы для самопроверки .....	91
2.2. Вычисление волновой функции .....	92
2.2.1. Волновое уравнение .....	92
2.2.2. Волновая функция системы нескольких частиц .....	96
2.2.3. Волновое уравнение системы нескольких частиц .....	99
2.2.4. Волновая функция и волновое уравнение частицы с одной степенью свободы .....	101
2.2.5. Уравнение Шрёдингера в операторном виде.....	102
2.2.6. Общие требования к решениям уравнения Шрёдингера.....	107
Вопросы для самопроверки .....	109
2.3. Замкнутая микросистема .....	110
2.3.1. Решение уравнения Шрёдингера методом разделения переменных.....	110
2.3.2. Стационарные состояния .....	118
2.3.3. Связанные состояния .....	121
2.3.4. Стационарные связанные состояния .....	125
2.3.5. Общие черты решений одномерных задач о связанных стационарных состояниях .....	132
2.3.6. Состояния рассеяния .....	135
2.3.7. Общие черты решений одномерных стационарных задач о рассеянии микрочастицы .....	139
Вопросы для самопроверки .....	151
3. ОПЕРАТОРЫ ИМПУЛЬСА, КООРДИНАТЫ И ЭНЕРГИИ МИКРОЧАСТИЦЫ .....	153
3.1. Как построить оператор динамической переменной .....	153
3.1.1. Зачем нужны операторы в квантовой механике.....	153
3.1.2. Собственные функции и собственные значения операторов.....	154
Вопросы для самопроверки .....	159
3.2. Оператор импульса.....	159
3.2.1. Свойства собственной функции оператора импульса в одномерном случае ....	159
3.2.2. Вычисление собственной функции оператора импульса в одномерном случае .....	164
3.2.3. Оператор импульса микрочастицы с одной степенью свободы .....	169
3.2.4. Операторы проекций импульса микрочастицы и их общие собственные функции .....	173
3.2.5. Является ли свободная микрочастица «плоской волной»? .....	181
Вопросы для самопроверки .....	186
3.3. Оператор координаты .....	187
3.3.1. Свойства собственной функции оператора координаты в одномерном случае .....	187
3.3.2. Дельта – функция Дирака .....	189
3.3.3. Собственная функция оператора координаты и свойство оператора координаты в одномерном случае.....	193
3.3.4. Операторы координат микрочастицы и их общая собственная функция.....	195
Вопросы для самопроверки .....	197
3.4. Оператор Гамильтона.....	197
3.4.1. Принцип соответствия Н. Бора .....	197
3.4.2. Оператор кинетической энергии микрочастицы .....	201
3.4.3. Оператор потенциальной энергии микрочастицы .....	202
3.4.4. Оператор Гамильтона микрочастицы.....	204
Вопросы для самопроверки .....	207
4. СТАТИСТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИНАМИЧЕСКИХ ПЕРЕМЕННЫХ.....	208
4.1. Пространство волновых функций.....	208
4.1.1. Функциональное пространство .....	208

4.1.2. Скалярное произведение функций.....	211
4.1.3. Амплитуда и вероятность перехода.....	213
Вопросы для самопроверки .....	216
4.2. Сопряжённые и самосопряжённые операторы.....	216
4.2.1. Сопряжённый оператор .....	216
4.2.2. Самосопряжённый оператор .....	221
Вопросы для самопроверки .....	225
4.3. Собственные значения и собственные функции самосопряжённых операторов .....	226
4.3.1. Собственные значения .....	226
4.3.2. Собственные функции .....	228
4.3.3. Полнота системы собственных функций самосопряжённого оператора.....	230
4.3.4. Разложение произвольной функции по полной ортонормированной системе собственных функций самосопряжённого оператора. Дискретный спектр собственных значений .....	233
4.3.5. Разложение произвольной функции по полной ортонормированной системе собственных функций самосопряжённого оператора. Непрерывный спектр собственных значений .....	235
4.3.6. Разложение волновой функции произвольного стационарного состояния микрочастицы по полной ортонормированной системе собственных функций оператора импульса.....	238
4.3.7. Тригонометрическое представление дельта – функции .....	243
Вопросы для самопроверки .....	248
4.4. Распределение вероятностей динамической переменной .....	249
4.4.1. Вероятность результата измерения динамической переменной: дискретный спектр собственных значений .....	249
4.4.2. Среднее значение динамической переменной: дискретный спектр собственных значений .....	252
4.4.3. Плотность вероятности результата измерения динамической переменной: непрерывный спектр собственных значений.....	253
4.4.4. Среднее значение динамической переменной: непрерывный спектр собственных значений .....	256
4.4.5. Коэффициент разложения как волновая функция в $F$ – представлении.....	257
Вопросы для самопроверки .....	260
4.5. Теоремы П. Эренфеста.....	261
4.5.1. Формулировки, смысл и применение теорем П. Эренфеста.....	261
4.5.2. Доказательство первой теоремы П. Эренфеста .....	265
4.5.3. Доказательство второй теоремы П. Эренфеста .....	270
Вопросы для самопроверки .....	274
5. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТЕЙ .....	275
5.1. Коммутация операторов .....	275
5.1.1. Основные правила алгебры операторов .....	275
5.1.2. Коммутатор операторов.....	282
5.1.3. Коммутаторы операторов координат и проекций импульса.....	283
Вопросы для самопроверки .....	288
5.2. Свойства произведений операторов .....	289
5.2.1. Оператор, сопряжённый произведению операторов.....	289
5.2.2. Самосопряжённые комбинации самосопряжённых операторов .....	292
5.2.3. Положительно определённые операторы.....	293
Вопросы для самопроверки .....	296
5.3. Теорема В. Гайзенберга .....	296
5.3.1. Неравенство Гайзенберга.....	296
5.3.2. Следствие неравенства Гайзенберга.....	298

5.3.3. Соотношение неопределённостей между координатой и проекцией импульса .....	300
Вопросы для самопроверки .....	302
5.4. Общие собственные функции коммутирующих самосопряжённых операторов.....	303
5.4.1. Прямая теорема об общих собственных функциях коммутирующих операторов .....	303
5.4.2. Обратная теорема об общих собственных функциях коммутирующих самосопряжённых операторов .....	305
Вопросы для самопроверки .....	307
5.5. Когда динамические переменные могут, а когда не могут одновременно иметь определённые значения?.....	308
5.5.1. Что запрещают соотношения неопределённостей .....	308
5.5.2. Что разрешают теоремы об общих собственных функциях коммутирующих самосопряжённых операторов .....	310
Вопросы для самопроверки .....	311
5.6. Динамическое уравнение Гайзенберга .....	312
5.6.1. Скорость изменения среднего значения динамической переменной.....	312
5.6.2. Уравнения Эренфеста как частные случаи уравнений Гайзенберга .....	315
Вопросы для самопроверки .....	316
6. МИКРОЧАСТИЦА В ПОЛЕ ЦЕНТРАЛЬНОЙ СИЛЫ .....	317
6.1. Момент импульса .....	317
6.1.1. Центральная сила.....	317
6.1.2. Момент импульса как классическая динамическая переменная микрочастицы .....	320
6.1.3. Сохранение момента импульса классической частицы в центральном поле.....	321
6.1.4. Сохранение энергии классической частицы в центральном поле .....	323
Вопросы для самопроверки .....	324
6.2. Оператор момента импульса .....	324
6.2.1. Коммутационные соотношения между операторами проекций момента импульса .....	324
6.2.2. Коммутационные соотношения между операторами квадрата и проекций момента импульса .....	328
6.2.3. Сохранение момента импульса микрочастицы в центральном поле .....	330
Вопросы для самопроверки .....	332
6.3. Собственные функции и собственные значения оператора момента импульса .....	333
6.3.1. Операторы квадрата и проекций момента импульса в декартовых и сферических координатах.....	333
6.3.2. Собственные значения операторов квадрата и проекции момента импульса.....	336
6.3.3. Собственные функции операторов квадрата и проекции момента импульса в сферических координатах.....	338
Вопросы для самопроверки .....	341
6.4. Стационарные состояния микрочастицы в поле центральной силы .....	342
6.4.1. Интегралы движения.....	342
6.4.2. Решение стационарного уравнения Шрёдингера методом разделения переменных .....	344
6.4.3. Радиальное уравнение.....	348
6.4.4. Характер решений радиального уравнения Шрёдингера.....	350
6.4.5. Вырождение энергетических уровней.....	353
Вопросы для самопроверки .....	355
7. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ ДВУХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ МИКРОЧАСТИЦ.....	357
7.1. Переносное и относительное движение двух частиц .....	357

7.1.1. Система многих микрочастиц .....	357
7.1.2. Координаты центра масс и относительного расположения двух частиц.....	362
7.1.3. Разделение переменных в стационарном уравнении Шрёдингера.....	366
7.1.4. Центральная сила взаимодействия микрочастиц .....	370
Вопросы для самопроверки .....	372
7.2. Двухатомная молекула.....	373
7.2.1. Эффективная потенциальная энергия межатомного взаимодействия в молекуле .....	373
7.2.2. Колебательно – вращательные энергетические уровни и радиальные волновые функции молекулы .....	376
7.2.3. Модель «гармонический осциллятор – жёсткий ротатор» для приближённого описания колебательно – вращательных состояний двухатомной молекулы.....	381
Вопросы для самопроверки .....	385
7.3. Атом водорода и водородоподобные ионы .....	386
7.3.1. Состояния относительного «движения» электрона и ядра .....	386
7.3.2. Энергетические уровни.....	392
7.3.3. Волновые функции .....	395
7.3.4. Сравнение теории с экспериментом .....	400
Вопросы для самопроверки .....	404

# ВВЕДЕНИЕ

Учебный план подготовки инженеров – исследователей предусматривает углублённое физико — математическое образование будущих специалистов. В частности, студенты – теплофизики МЭИ, помимо курса общей физики, изучают отдельные главы теоретической физики: гидродинамику (механику жидкости и газа), квантовую механику, термодинамику, статистическую физику, физическую кинетику и термодинамику необратимых процессов, физику плазмы, физику твёрдого тела.

Понятно, что как по глубине, так и по объёму полученных знаний в области теоретической физики теплофизики из МЭИ не могут конкурировать со своими коллегами — студентами Физического факультета МГУ или МФТИ. Это и естественно: выпускники МЭИ — прежде всего инженеры, и значительная доля времени, отводимого на их обучение, посвящена формированию у будущих специалистов инженерных знаний и умений. Знакомство же с теоретической физикой обеспечивает будущим творцам технического прогресса главным образом широту кругозора и научную эрудицию. Следует, впрочем, отметить, что физико – математический «трамплин», созданный обучением в МЭИ, позволил некоторым выпускникам кафедры Инженерной теплофизики МЭИ, которых увлекли занятия теоретической физикой, стать в дальнейшем хорошими физиками – профессионалами.

В данном учебном пособии излагаются основы квантовой механики. Опыт преподавания этой дисциплины студентам — теплофизикам показывает, что её изучение вызывает у большинства студентов интерес. Однако нельзя не отметить, что у части студентов этот процесс сопровождается значительными (впрочем, вполне преодолимыми) трудностями. Не в последнюю очередь это вызвано использованием довольно сложного математического аппарата, а главным образом — непривычными понятиями, далёкими от повседневного человеческого опыта.

Зачем же инженеру — исследователю изучать такую сложную и абстрактную науку, как квантовая физика?

Во-первых, многие прикладные направления инженерных исследований — свойства веществ, технология материалов, электрофизика, ядерная и термоядерная энергетика, теория излучения и т.п. — базируются на этой области физики, и, не имея о ней представления, невозможно активно и творчески работать ни в одном из подобных направлений. Во-вторых, исследователь, претендующий на то, чтобы создать нечто новое в своей узкопрофессиональной области, должен представлять себе основы современной науки и её возможности, то есть быть образованным человеком. В-третьих, наконец: квантовая физика — это очень интересно.

В этом учебном пособии будут рассмотрены самые начала квантовой физики, а именно — квантовая механика микрочастиц без учёта релятивистских эффектов. К сожалению, за пределами курса останутся теория многоэлектронных атомов, молекул и



химической связи (квантовая химия), теория рассеяния и ядерная физика. Не будет здесь излагаться и квантовая электродинамика. Все те, кому в их практической деятельности понадобятся указанные разделы квантовой физики, должны будут изучить их самостоятельно. Возможно, предлагаемое пособие сможет при этом сыграть роль стартовой площадки.

По квантовой физике вообще и квантовой механике в частности — море литературы. Зачем ещё одна книга? Ответ прост: имеются блестящие курсы квантовой механики, но по своему уровню и манере изложения материала они совершенно не годятся как учебные пособия для студентов технического университета. С другой стороны, есть немало учебных пособий, подходящих по уровню для будущих инженеров. К сожалению, подавляющее большинство из них, по мнению автора — либо плохие, либо очень плохие. Авторы некоторых из них словно бы задались целью доказать читателю, что эта наука доступна пониманию лишь избранных, и уж он — то, конечно, не в их числе.

Означает ли сказанное, что автор решил написать ещё одну очень плохую книгу? Нет, конечно! Автор, может быть, и нескромно, но всё же надеется на то, что его многолетний опыт преподавания квантовой механики студентам специальности «теплофизика» в Московском энергетическом институте поможет избежать такой мрачной перспективы, и эта книга окажется полезной и приятной студентам.

По ходу проведения занятий осенью 2004 года автор составил компьютерный конспект своих лекций и решений наиболее

сложных задач. Этими текстами студенты – теплофизики группы ТФ–10–02 смогли воспользоваться при подготовке к практическим занятиям, а затем и к экзамену. В 2005 г. предлагаемое учебное пособие было написано практически полностью, а по ходу проведения занятий в него вносились дополнения, изменения и исправления. Благодаря этому удалось избавиться от необходимости излагать на лекциях детали теории, выполнять громоздкие выкладки. Всё это студенты группы Ф–10–03 получили возможность изучать самостоятельно. На лекциях в основном обсуждались идеи и концепции изучаемой дисциплины, выстраивались логические связи между её фрагментами, обращалось внимание студентов на теоретико – познавательные, гуманитарные, философские аспекты квантовой физики. Разумеется, на лекциях рассматривались также основные моменты наиболее сложных для понимания разделов курса. В то же время было существенно увеличено количество семинарских занятий, на которых студенты делали доклады по материалам подготовленных ими рефератов, а также представляли своим коллегам результаты выполнения домашних заданий — решения задач.

В итоге, если по учебному плану изучения дисциплины «Квантовая механика» предусмотрена пропорция часов, отведенных на лекции и практические занятия, 3:1, то фактически в группе Ф–10–03 в осеннем семестре 2005/2006 учебного года было проведено 12 лекций и 17 семинаров, т.е. пропорция оказалась 3:5. Семь студентов сделали доклады по выбранным ими темам реферата «Экспериментальные факты, необъяснимые с позиций

классической физики»; ещё четверо студентов — по отдельным вопросам темы «Основные принципы квантовой физики». На каждом из оставшихся 12 семинаров, где разбирались решения 28 домашних задач, к доске вызывались в среднем по пять – шесть студентов, так что каждый из студентов, заявивших, что выполнил домашнее задание, побывал у доски в среднем по четыре – пять раз.

Активность студентов стимулировалась «игрой» в рейтинг, которую автор практикует в течение лет тридцати. Каждый студент, заявивший, что решил заданную на дом задачу, получал один балл в рейтинг. Если к тому же такой студент успешно демонстрировал у доски решение задачи или её фрагмента, в рейтинг добавлялся ещё балл. За сданный реферат, в зависимости от срока сдачи и качества, студент получал от двух до пяти баллов. Ещё по два балла получили студенты, обнаружившие в тексте учебного пособия неизбежные опечатки (поскольку текст писался «с колёс», и автор не всегда успевал проверить написанное). Если студент по любой причине пропускал практическое занятие, из его рейтинга «снимался» 1 балл.

К концу курса рейтинг четырёх студентов превысил 40, четверо набрали от 31 до 40 баллов, ещё четверо немного не «дотянули» до 30 — и это 75% списочного состава группы. Все они получили «автоматический» зачёт (с оценками 5+, 5 и 4 соответственно), а каждый из них — «надбавку» к экзаменационной оценке в размере 2, 1 и 0,5 соответственно. Зачётную оценку 3 «автоматом» получил единственный в группе, тринадцатый по счёту, студент, который набрал 18 баллов. Оставшиеся три студента, слабо работавшие в

семестре, получили зачёт и были допущены к экзамену только после того, как каждый из них решил столько задач, сколько ему не хватало до рейтинга 18, который набрал «троечник».

Всё это предусматривалось правилами «игры в рейтинг», которые были объявлены студентам на первом занятии. Хочется отметить, что указанные правила носят не «наказательный», а чисто поощрительный характер. Высокий рейтинг обеспечивает студенту «бонус» на экзамене, который обязан принять во внимание любой экзаменатор. В то же время низкий рейтинг не предполагает никакого штрафа: преподавателям, которые помогают лектору принимать экзамен, рейтинг отвечающего студента не сообщается. Впрочем, скажу по секрету, что студент, набравший высокий рейтинг, в большинстве случаев получит «пятёрку» у любого экзаменатора и безо всякой надбавки. Наличие «бонуса» играет лишь роль поддержки, которая при необходимости поможет толковому, но не умеющему держать себя в руках студенту преодолеть экзаменационный стресс и обрести недостающую уверенность в себе. Автор ещё не забыл за истекшие с той поры полвека свои студенческие сессионные мучения и хорошо понимает, как подобная поддержка порой бывает нужна.

В заключение я бы хотел поблагодарить студентов – теплофизиков группы Ф–10–03<sup>1</sup>, каждый из которых представил автору свой список обнаруженных в тексте учебного пособия опечаток. Они сделали большое дело! Во–первых, половину из этих опечаток сам автор по невнимательности наверняка так бы и не

---

<sup>1</sup> Группы Энергофизического факультета маркировались буквой Ф, а после создания Института теплоэнергетики и технической физики (в дальнейшем — тепловой и атомной энергетики) — ТФ.

заметил. А во–вторых, чтобы найти опечатку, надо внимательно и заинтересованно читать текст и уж, во всяком случае, понимать, что в нём написано. А это дорогого стоит!

Считаю своим долгом назвать героев поимённо:

*Ирина Михайловна Астафьева* (кстати, она представила реферат по очень сложной теме, которую сама же и предложила);

*Константин Борисович Минко;*

*Мария Вячеславовна Плотникова;*

*Вадим Вадимович Шишаков;*

*Михаил Владимирович Шустов.*

Спасибо, коллеги!

# ЛИТЕРАТУРА

## **А. Очень хорошие, но очень трудные книги:**

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 3. / Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — М.: Физматгиз, 1963. 702 с.

(А также любые последующие издания).

В том же Курсе теоретической физики академиков Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица — тома «Механика», «Теория поля» и др. Курс рассчитан на студентов и аспирантов, а также научных работников в области теоретической физики.

2. *Дирак П.А.М.* Принципы квантовой механики. Пер. с англ. под ред. акад. В.А. Фока. — М.: Физматгиз, 1960. 434 с.

(А также любые последующие издания).

Книга рассчитана на студентов и аспирантов, а также научных работников в области теоретической физики.

## **Б. Хорошая, но трудная книга:**

3. *Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А.* Курс теоретической физики. / Т. 2. Квантовая механика. Физика твёрдого тела. — М.: Наука, 1971. 936 с.

(Последующих изданий не было, а это и предыдущее изымались из библиотек, т.к. чл. – корр. АН СССР В.Г. Левич эмигрировал в Израиль).

Курс рассчитан на студентов физических факультетов университетов (МГУ, СПбГУ, НГУ и т.п.), МФТИ, МИФИ.

**Полезная книга для общего ориентирования в предмете:**

4. *Шпольский Э.В.* Атомная физика. / Т. 1. Введение в атомную физику. — М.: Наука, 1984. 552 с.

(Второй том посвящён экспериментальным основаниям атомной физики).

**Учебные пособия для студентов физических специальностей  
среднего качества**

5. *Тарасов Л.В.* Основы квантовой механики. — М.: Высшая школа, 1978. 287 с.

6. *Нерсесов Э.А.* Основные законы атомной и ядерной физики. — М.: Высшая школа, 1988. 288 с.

**Курс общей физики для студентов физических специальностей  
с изложением основ квантовой механики**

7. *Сивухин А.В.* Общий курс физики. / Т. 5, ч. 1. Атомная и ядерная физика. — М. Наука, 1986. 416 с.

# **1. КВАНТОВАЯ ФИЗИКА — РЕВОЛЮЦИЯ В ЕСТЕСТВОЗНАНИИ**

## ***1.1. Классическая картина мира***

К началу XX века классическая физика как область знаний об объективных закономерностях физического мира полностью сформировалась. В общих чертах классическая картина мира сводилась к следующим положениям.

### **1.1.1. Мир материален**

Смысл этого утверждения таков.

- Существование и эволюция Вселенной в целом и материи, из которой она состоит, подчиняется объективным законам природы.
- Вселенная вечна и бесконечна.
- Сознание человека, познающего природу и самого себя, является продуктом эволюции материи.
- Законы природы познаваемы.



### 1.1.2. Две формы существования материи

Имеются две разные формы существования материи: *вещество* и *поле*.

### 1.1.3. Вещество

Для элементов вещества характерны следующие атрибуты.

**Локализация в пространстве.** Это означает, что в каждый момент времени  $t$  любой малый элемент вещества — материальная точка — находится в строго определённом месте пространства с координатами  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$ , или, символически, в точке, определяемой радиус – вектором положения  $r(t)$ .

**Пространственная протяжённость.** Любой конечный объект, состоящий из вещества, занимает в пространстве некоторый объём

$$V = \int_{z_{\min}}^{z_{\max}} \int_{y_{\min}(z)}^{y_{\max}(z)} \int_{x_{\min}(y,z)}^{x_{\max}(y,z)} dx dy dz \quad (1.1.1)$$

с определёнными длиной  $x_{\min} \leq X \leq x_{\max}$ , шириной  $y_{\min} \leq Y \leq y_{\max}$  и высотой  $z_{\min} \leq Z \leq z_{\max}$ .

**Динамические переменные.** Возможность количественного описания динамического состояния (состояния движения) вещества с использованием таких величин, как масса объекта  $m$  (скаляр);

действующая на объект сила  $\mathbf{F}\{F_x, F_y, F_z\}$ , скорость движения объекта  $\mathbf{v}\{v_x, v_y, v_z\}$ , его импульс  $\mathbf{p}\{p_x, p_y, p_z\}$  (векторы); кинетическая энергия  $K = mv^2 / 2$  (скаляр) — и т.п.

**Траектория движения точечного элемента вещества (материальной точки).** Последовательные положения любого такого объекта в процессе его движения  $x(t) \equiv x_1(t)$ ,  $y(t) \equiv x_2(t)$ ,  $z(t) \equiv x_3(t)$  образуют непрерывную дифференцируемую функцию времени  $t$ , с геометрической точки зрения — гладкую пространственную кривую. Вследствие этого в каждый момент определено не только положение объекта в пространстве, но и его скорость:

$$v_\alpha(t) = \frac{dx_\alpha}{dt} \equiv \dot{x}_\alpha; \quad \alpha = x, y, z \text{ или } 1 \leq \alpha \leq 3. \quad (1.1.2)$$

Три соотношения (1.1.2) удобно записать в виде одного символического равенства, используя компактные векторные обозначения:

$$\mathbf{v}(t) = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \equiv \dot{\mathbf{r}}. \quad (1.1.3)$$

**Математическая модель динамики вещества.** Движение вещества описывается классической механикой **Ньютона – Лагранжа – Гамильтона** (см. п. 1.2). Траектория материальной

точки определяется системой *обыкновенных дифференциальных уравнений* второго порядка.

#### 1.1.4. Поле

Поле рассматривается классической физикой как материальная субстанция, обеспечивающая *взаимодействие* между *пространственно удалёнными* элементами вещества. Предметом изучения классической физики являются *гравитационное поле* (поле тяготения, поле силы тяжести) и *электромагнитное поле* — агент взаимодействия между электрически заряженными элементами вещества.

Поле как форму существования материи отличают следующие атрибуты.

***Отсутствие пространственной локализации.*** Поле есть непрерывно распределённая в пространстве и во времени структура, не имеющая чёткой пространственной локализации.

***Полевые переменные.*** Динамическими переменными, описывающими пространственно – временное поведение поля, служат полевые переменные, зависящие от времени и пространственных координат  $\varphi(t, x, y, z) \equiv \varphi(t, \mathbf{r})$ . Таковыми являются потенциал поля (скаляр), напряжённость поля (вектор) и т.п.

***Полевое описание вещества как сплошной среды.*** Необходимо отметить, что в ряде случаев классическая механика применяет полевое описание динамики вещества, приближённо рассматривая его как сплошную среду, параметры которой

непрерывно изменяются в пространстве и во времени. При этом в качестве полевых переменных используются такие характеристики, как *локальная* плотность вещества  $\rho(t, \mathbf{r})$ , *локальные* давление  $p(t, \mathbf{r})$ , температура  $T(t, \mathbf{r})$ , скорость движения  $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$ , удельная энергия  $e(t, \mathbf{r})$  и т.п.

**Волновой характер динамического поведения поля.** Для полевых переменных характерно периодическое в пространстве и во времени поведение полевых переменных  $\phi(t, \mathbf{r})$ , а динамику поля можно охарактеризовать как распространение волн.

Для электромагнитного поля, так же как и для других видов волн (например, *акустических колебаний* или *поверхностных волн* на воде) характерны такие сугубо волновые явления, как *интерференция* волн и *дифракция* волны, огибающей препятствия.

При описании волн используют такие атрибуты, как *длина волны*  $\lambda$  и *частота*  $\nu$  колебаний полевых переменных, которые связаны соотношением

$$\lambda = c/\nu, \quad (1.1.4)$$

где  $c$  — скорость распространения электромагнитного поля (скорость света).

**Уравнения поля.** Движение электромагнитного поля описывается классической электродинамикой **Максвелла – Герца – Лоренца**. Законы динамики гравитационного поля классической физике неизвестны.

Полевое описание вещества как сплошной среды сформулировано классической физикой в рамках *гидродинамики* (механики жидкости и газа) и *теории упругости*. Отдельным разделом классической физики является *акустика* — наука о распространении волн в веществе.

**Математическая модель поля.** Ею служат *дифференциальные уравнения с частными производными* второго порядка по времени и пространственным координатам относительно полевых переменных.

#### **1.1.5. Сосуществование вещества и поля**

Поле и вещество взаимодействуют друг с другом. Поле вызывает движение вещества. Движение вещества вызывает (создаёт, генерирует) поле. Вместе с тем вещество и поле ни при каких условиях не подвержены взаимным превращениям.

#### **1.1.6. Экспериментальные факты, противоречащие классической физике**

Описанная картина мира представлялась стройной, незыблемой и безусловно правильно отражающей реальную действительность. Однако на рубеже XIX и XX веков она испытала ряд потрясений, и здание классической физики начало катастрофически рушиться. Эксперименты обнаружили ряд фактов, которые вступали в явное

противоречие с описанной картиной и не находили объяснения в рамках классической физики.

1. Известная из оптических измерений зависимость *спектральной интенсивности излучения абсолютно чёрного тела*  $I_\nu(\nu, T)$  [т.е. мощности электромагнитного поля, излучаемого единицей поверхности АЧТ в единичном интервале частот, Вт/(м<sup>2</sup>с<sup>-1</sup>)] от частоты  $\nu$  излучения [или длины волны — см. (1.1)] при постоянной температуре  $T$  обращается в нуль как при малых, так и при больших частотах и имеет максимум при некоторой частоте  $\nu_m(T)$ .

Попытка вывести эту зависимость теоретически, используя классические механику и электродинамику, приводит к формуле Релея и Джинса

$$I_\nu(\nu, T) = A(T)\nu^2. \quad (1.1.5)$$

Формула (1.1.5) правильно описывает зависимость наблюдаемой спектральной интенсивности электромагнитного излучения АЧТ  $I_\nu(\nu, T)$  при малых частотах, но при больших частотах выражение (1.1.5) обращается в бесконечность. В результате интегральная интенсивность излучения АЧТ

$$I(T) = \int_0^\infty I_\nu(\nu, T) d\nu, \quad (1.1.6)$$

которая в соответствии с экспериментом должна быть конечной и равной

$$I(T) = \sigma T^4 \quad (1.1.7)$$

(закон Стефана – Больцмана), при подстановке в интеграл (1.1.6) «классического» результата (1.1.5) даёт бесконечность для любых температур, т.к. интеграл расходится при высоких частотах.

Это грубое противоречие классической физики данным опыта вошло в историю науки под именем «ультрафиолетовой катастрофы».

2. Газы, нагретые до высокой температуры (в пламени, в газовом разряде), как и твёрдые тела, испускают свет, т.е. электромагнитное излучение. В соответствии с классическими механикой и электродинамикой спектральная интенсивность излучения газа  $I_\nu(\nu, T)$  должна быть непрерывной функцией частоты  $\nu$ .

Однако наблюдения излучения газов с помощью спектроскопа или спектрографа (Бунзен и др.) показывают, что функция  $I_\nu(\nu, T)$  представляет собой индивидуальный для каждого вещества набор дискретных (т.е. образующих счётное множество) *спектральных линий* различной яркости, разделённых «тёмными» интервалами частот, в которых излучение отсутствует.

Наблюдаемый *линейчатый характер спектра излучения нагретых газов* не только не находит объяснения в классической физике, но принципиально противоречит фундаментальному

классическому представлению о том, что любые физические величины зависят от «параметров состояния» физических систем непрерывно: «природа не знает скачков».

3. В соответствии с классической статистической механикой теплоёмкость любых твёрдых кристаллических веществ должна быть постоянной и равной  $3R$  в расчёте на моль, где  $R$  — универсальная газовая постоянная (закон Дюлонга и Пти). Этот теоретический результат подтверждается экспериментальными данными для различных веществ при комнатных и повышенных температурах. Однако в опытах по исследованию *теплоёмкости твёрдых тел при низких температурах* (Нернст) было установлено, что при снижении температуры вблизи абсолютного нуля теплоёмкость любых твёрдых кристаллических веществ уменьшается и стремится к нулю. Этот экспериментальный факт находится в неразрешимом противоречии с классической физикой.

4. Классическая статистическая механика утверждает, что мольная изохорная *теплоёмкость* любых *двухатомных идеальных газов* постоянна и равна  $3,5R$ . Экспериментальные данные для разреженных водорода, азота, кислорода при комнатных температурах показывают, что в действительности эта величина равна  $2,5R$ . Куда «девалась» ещё одна  $R$ , классическая физика объяснить не в состоянии.

5. Экспериментальное исследование *фотоэффекта* (Герц, Столетов), т.е. эмиссии электронов с поверхности металлов под действием ультрафиолетового излучения, показало, что кинетическая энергия «вырывающихся» светом из металла электронов



линейно зависит от частоты  $\nu$  или обратной длины волны света  $1/\lambda$  (1.1.1). При этом для возникновения эффекта необходимо, чтобы частота превосходила некоторое пороговое значение, индивидуальное для каждого металла. Количество электронов, вылетающих с единицы поверхности металла за единицу времени, оказывается пропорциональным интенсивности света.

Наблюдаемая картина находится в разительном противоречии с теорией фотоэффекта, основанной на классической механике и электродинамике. В соответствии с ней кинетическая энергия электронов должна быть пропорциональна интенсивности освещения, а частота или длина волны света на энергию электронов вообще не влияет.

6. Точно так же с классических позиций необъясним *эффект Комптона*, обнаруженный при экспериментальном изучении рассеяния рентгеновских лучей на металлических экранах. В соответствии с экспериментом в спектре рассеянного излучения присутствуют две линии: с частотой падающего излучения  $\nu$  и с меньшей частотой  $\nu - \Delta\nu$ , причём сдвиг  $\Delta\nu$  не зависит от свойств рассеивающего вещества. Классическая же теория утверждает, что частота рассеянного излучения должна быть строго той же, что и падающего.

7. Согласно экспериментам Э. Резерфорда атом представляет собой тяжёлое положительно заряженное ядро, вокруг которого вращаются лёгкие отрицательно заряженные электроны (как планеты вокруг Солнца). Однако в соответствии с классической электродинамикой ускоренное движение заряженных частиц

сопровождается излучением электромагнитного поля и потерей кинетической энергии. Отсюда следует, что в течение ничтожного времени электроны, двигаясь с центробежным ускорением вокруг ядер, должны были бы *упасть на ядра*, а материя, состоящая из атомов и молекул — исчезнуть. Иначе говоря, с точки зрения классической физики, *материя абсолютно неустойчива*. Этот вывод, разумеется, находится в вопиющем противоречии с действительностью.

8. Уже в первой трети XX века были поставлены опыты по прохождению пучков электронов через тонкие пластины кристаллов (К. Дэвиссон, Л. Джермер, 1927). Было обнаружено, что «на выходе» получается картина пространственного распределения электронов, аналогичная тому, что наблюдается при прохождении пучка света через дифракционную решётку. Иначе говоря, оказалось, что электроны дифрагируют на кристаллической решётке. Поскольку совершенно очевидно, что электроны — это частицы вещества, «корпускулы», то наблюдаемая картина *дифракции электронов*, которая является чисто волновой, представляется с классической точки зрения совершенно абсурдной и дикой.

9. В дальнейшем такую же дифракционную картину удалось наблюдать, пропуская через кристаллическую пластинку не пучок электронов, а последовательность *одиночных электронов*, проходящих путь от решётки до детектора не вместе, а строго по очереди (Л.М. Биберман, Н.Г. Сушкин, В.А. Фабрикант, 1949). Хотя каждый из электронов, пройдя «щель» решётки, попадал в

отдельную точку детектора, как и положено «корпускуле», распределение точек попадания множества электронов на детектор при проведении опыта в течение длительного времени имело вид дифракционных полос, такой же, как и при прохождении пучка электронов.

Попытки разрешить перечисленные и другие аналогичные противоречия в конечном счёте привели к созданию *квантовой физики*. Начало этого взрывоподобного процесса относится к последнему году XIX столетия. Спустя тридцать лет формирование новой области науки практически завершилось, приведя к поистине революционным потрясениям как в знаниях о природе, так и в мировоззрении людей, в том числе весьма далёких от физики.

## **Вопросы для самопроверки**

1.1.1. Дайте сравнительную характеристику вещества и поля в классической картине мира.

1.1.2. Вспомните изучавшиеся в курсе общей физики закономерности, которые описывают сосуществование вещества и электромагнитного поля.

1.1.3. Какие результаты измерений характеристик излучения абсолютно чёрного тела и нагретых газов классическая физика не может объяснить?

1.1.4. Какие результаты измерений характеристик фотоэффекта классическая физика не может объяснить?

1.1.5. Какие результаты измерений теплоёмкости твёрдого тела и газов классическая физика не может объяснить?

1.1.6. Почему с точки зрения классической физики вещество неустойчиво?

## **1.2. Классическая механика**

### **1.2.1. Уравнения движения**

Движение вещества при скоростях, малых по сравнению со скоростью света, описывается классической механикой **Ньютона – Лагранжа – Гамильтона**.

Уравнения движения, установленные **Исааком Ньютоном**, для материальной точки имеют всем известный вид

$$\frac{d^2 x_\alpha}{dt^2} \equiv \ddot{x}_\alpha = \frac{1}{m} F_\alpha(t, x, y, z); \quad \alpha = x, y, z \quad (1.2.1)$$

или в векторном виде

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \equiv \ddot{\mathbf{r}} = \frac{1}{m} \mathbf{F}(t, \mathbf{r}). \quad (1.2.2)$$

В уравнениях (1.2.1), (1.2.2)  $\mathbf{r}$  — радиус – вектор положения материальной точки с координатами  $x, y, z$  или  $x_\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$ , а  $m$  — масса частицы.

### 1.2.2. Математическая модель

Уравнения движения материальной точки (1.2.1) или (1.2.2) представляют собой *обыкновенные дифференциальные уравнения второго порядка по времени*. Если задать начальные условия, т.е. значения координат  $\mathbf{r}(t_0)$  и проекций скорости точки  $\mathbf{v}(t_0)$  в начальный момент времени  $t_0$ , то решения трёх уравнений (1.2.1) однозначно определяют траекторию точки  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$ , или  $\mathbf{r}(t)$ .

### 1.2.3. Потенциальная энергия

Если сила, действующая на материальную точку, зависит только от её *положения в пространстве* и времени, как в (1.2.1), (1.2.2), но *не зависит от скорости*, то можно определить *потенциальную энергию* рассматриваемой точки в поле этой силы  $\Phi(t, \mathbf{r})$  — скалярную функцию, градиент которой (с обратным знаком) определяет вектор силы:

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{r}) = -\text{grad}\Phi \equiv -\nabla\Phi \equiv -\frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{r}}. \quad (1.2.3)$$

Силы, для которых можно ввести потенциальную энергию (1.2.3), называются *потенциальными*. Таковы, например, сила тяжести  $\mathbf{F} = m\mathbf{g}$ , где  $\mathbf{g}$  — ускорение свободного падения, и сила, действующая на заряженную частицу в электрическом поле

напряжённостью  $E$ :  $F = qE$ , где  $q$  — заряд частицы. Вместе с тем *сила Лоренца*, действующая со стороны магнитного поля с индукцией  $B$  на заряженную частицу, движущуюся со скоростью  $v$ ,

$$F = \frac{q}{c} v \times B \quad (1.2.4)$$

( $\times$  — символ векторного произведения), где  $c$  — скорость света (формула записана в системе CGSE), не является потенциальной, и для неё ввести скалярную потенциальную энергию (1.2.3) нельзя. В электродинамике с этой целью вводится так называемый векторный потенциал.

Из (1.2.3) очевидно, что потенциальная энергия определена *с точностью до произвольной постоянной* (точнее, произвольной величины, не зависящей от координат материальной точки), т.к. любой её выбор не меняет силу, а следовательно, уравнения движения и их решение — траекторию точки, т.е. не влияет на наблюдаемое поведение механической системы.

#### 1.2.4. Энергия

Динамическая переменная

$$E = K + \Phi; \quad K = \frac{m}{2} \dot{r}^2 = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) \quad (1.2.5)$$

( $K$  — кинетическая энергия) называется (полной) энергией материальной точки. Энергия может зависеть от времени  $t$  явно [если такая зависимость имеется у потенциальной энергии  $\Phi(t, \mathbf{r})$ ] и неявно — через изменения с течением времени координат  $x_\alpha(t)$  и проекций скорости  $\dot{x}_\alpha(t)$  движущейся частицы.

### 1.2.5. Сохранение энергии

Вычислим с учётом сказанного *полную производную* энергии (1.2.5) по времени:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \frac{\partial E}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \cdot \frac{d\dot{\mathbf{r}}}{dt}$$

(точка между векторами означает скалярное произведение). Используя (1.2.5), получим:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial K}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \cdot \ddot{\mathbf{r}}.$$

Поскольку

$$\frac{\partial K}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}},$$

имеем:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}} + m\dot{\mathbf{r}} \right). \quad (1.2.6)$$

Но вследствие уравнений движения (1.2.2) и определения (1.2.3) сумма в скобках выражения (1.2.6) равна нулю. Отсюда получим результат:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial \Phi}{\partial t}. \quad (1.2.7)$$

Из (1.2.7) следует, что если потенциальная энергия — а значит, и сила — *явно не зависит от времени*,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0; \quad \Phi = \Phi(\mathbf{r}), \quad (1.2.8)$$

то *энергия сохраняется*, или, иначе говоря, *является интегралом движения*:

$$\frac{dE}{dt} = 0; \quad E = \text{const.} \quad (1.2.9)$$

Этот результат, разумеется, является частным случаем фундаментального физического закона *сохранения энергии замкнутой системы*.



Если же правая часть соотношения (1.2.7) отлична от нуля, то она равна работе, совершаемой за единицу времени источником поля над рассматриваемой механической системой. В этом случае система *не замкнута, а открыта*, и её энергия не сохраняется, т.е. не является интегралом движения.

### 1.2.6. Импульс

Импульс материального объекта, скорость которого намного меньше скорости света, равен

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v}. \quad (1.2.10)$$

### 1.2.7. Функция Гамильтона

Энергия, выраженная через координаты и проекции импульса, называется *функцией Гамильтона*. В пределе малости скорости объекта по сравнению со скоростью света она равна

$$E \equiv H(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = K(\mathbf{p}) + \Phi(t, \mathbf{r}); \quad (1.2.11)$$

$$K(\mathbf{p}) = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2. \quad (1.2.12)$$

### 1.2.8. Релятивистская механика

Если вещество движется со скоростью, не малой по сравнению со скоростью света, то его динамика описывается *специальной теорией относительности* **Альберта Эйнштейна** (*релятивистской механикой*), которая переходит в механику Ньютона – Лагранжа – Гамильтона в предельном случае малых скоростей движения. В рамках релятивистской механики описанные выше фундаментальные для рассматриваемой формы существования материи понятия (локализация, масса, траектория движения) сохраняются: меняются лишь уравнения динамики. Оказывается, однако, что

- масса движущегося материального объекта зависит от его скорости;
- расстояния и промежутки времени зависят от скорости движения системы отсчёта;
- скорость движения в принципе не может превосходить скорость света, т.е. скорость распространения электромагнитного поля;
- вещество и поле — а следовательно, масса и энергия — подвержены взаимным превращениям.

Отметим, что сила Лоренца (1.2.4), действующая на движущуюся в магнитном поле заряженную частицу, является релятивистским эффектом.

Положения релятивистской физики, сформулированные А. Эйнштейном в 1905 – 1906 г.г. и подтверждённые

многочисленными экспериментами, наряду с идеями квантовой физики стали фундаментом революции в физике XX века, о которой шла речь в п. 1.1 пособия.

Поскольку в данном курсе эффекты, сопутствующие движению микрочастиц с околосветовыми скоростями, подробно не рассматриваются, мы лишь для справки приведём некоторые соотношения релятивистской динамики, описывающие подобные процессы.

Пусть векторы скорости и импульса материальной точки равны соответственно

$$\mathbf{v} = v\mathbf{s}; \quad \mathbf{p} = p\mathbf{s}, \quad (1.2.13)$$

где  $\mathbf{s}$  — единичный вектор в направлении движения,

$$v = |\mathbf{v}|; \quad p = |\mathbf{p}|.$$

Кинетическая энергия релятивистского объекта связана с его импульсом следующим образом:

$$K = (m^2 c^4 + p^2 c^2)^{1/2} = mc^2 \left[ 1 + \left( \frac{p}{mc} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (1.2.14)$$

В (1.2.14)  $m$  — *масса покоя* материальной точки, т.е. масса в той системе отсчёта, относительно которой точка покоится;

$$c = 299792458 \text{ м/с}$$

— скорость света в вакууме. Если частица свободна, т.е. не находится в поле сил, то с учётом (1.2.12) величина (1.2.14) с точностью до произвольной постоянной  $E_0$  совпадает с полной энергией частицы  $E$  (1.2.11):

$$E = K + E_0. \quad (1.2.15)$$

Как видно из (1.2.14), (1.2.15), энергия покоящейся ( $p = 0$ ) свободной частицы равна

$$E = mc^2 + E_0. \quad (1.2.16)$$

Формула Эйнштейна (1.2.16) (в которой произвольную постоянную «для ясности» опускают) является одним из наиболее знаменитых и популярных соотношений физики XX века.

Из формулы (1.2.13) в пределе, когда  $p \ll mc$ , с точностью до константы  $mc^2$  следует классическое выражение (1.2.12):

$$K \approx mc^2 \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{p}{mc} \right)^2 \right] = mc^2 + \frac{p^2}{2m}. \quad (1.2.17)$$

По определению, скорость материальной точки как в классической, так и в релятивистской механике связана с её импульсом и кинетической энергией соотношением

$$v = \frac{dK}{dp}. \quad (1.2.18)$$

Используя (1.2.18), из (1.2.14) получим:

$$v = \frac{p/m}{\sqrt{1 + \left(\frac{p}{mc}\right)^2}}. \quad (1.2.19)$$

В пределе малых импульсов,  $p \ll mc$ , из (1.2.19) получим классическую формулу (1.2.10):  $v = p/m$ . Если же  $p \rightarrow \infty$ , то из (1.2.19) видно, что  $v \rightarrow c$ . Таким образом, скорость материального объекта действительно не может превысить скорость света в вакууме.

Выразив из (1.2.19) импульс материальной точки через её скорость, получим ещё одну интересную формулу:

$$p = \frac{mv}{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}. \quad (1.2.20)$$

Напомним, что в (1.2.20)  $m$  — это масса покоя частицы. Если по аналогии с классической формулой (1.2.10) определить массу движущейся частицы (динамическую массу)

$$\tilde{m} \equiv p/v, \quad (1.2.21)$$

то из (1.2.20) получим также знаменитую зависимость массы движущейся частицы от её скорости:

$$\tilde{m} = \frac{m}{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}. \quad (1.2.22)$$

### Вопросы для самопроверки

1.2.1. Как, зная потенциальную энергию материальной точки во внешнем поле, подсчитать действующую на неё силу?

1.2.2. Почему нельзя определить потенциальную энергию силы Лоренца, которая действует на заряженную материальную точку, движущуюся в магнитном поле?

1.2.3. Запишите потенциальную энергию системы материальных точек в виде суммы потенциальной энергии системы во внешнем силовом поле и потенциальной энергии взаимодействия частиц между собой. В чём принципиальное различие зависимости этих двух вкладов от координат частиц?

1.2.4. Напишите уравнения движения двух взаимодействующих заряженных частиц.

1.2.5. Докажите, что энергия системы любого количества взаимодействующих материальных точек в отсутствии внешних сил является интегралом движения.

## **1.3. Классическая теория поля**

### **1.3.1. Гравитационное поле**

Наиболее давно известно *гравитационное поле* или *поле тяготения*.

### **1.3.2. Закон всемирного тяготения**

Этот закон установлен **Исааком Ньютоном**. В соответствии с ним две материальные точки, обладающие массами  $m_1$  и  $m_2$  и находящиеся в точках пространства с координатами  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ , *притягиваются* друг к другу с силой, пропорциональной произведению масс рассматриваемых элементов вещества и обратно пропорциональной квадрату расстояния между ними

$$r = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|. \quad (1.3.1)$$

### 1.3.3. Потенциальная энергия силы тяготения

Она определяется следующим выражением:

$$\Phi(r) = -G \frac{m_1 m_2}{r} + E_0, \quad (1.3.2)$$

где  $E_0$  — произвольное начало отсчёта, а  $G$  — *гравитационная постоянная*:

$$G = 6.67259(85) \cdot 10^{-11} \text{ м}^3/\text{кг} \cdot \text{с}^2.$$

### 1.3.4. Сила тяготения

Сила тяготения, действующая на материальную точку 2 со стороны материальной точки 1, в соответствии с (1.2.3) и (1.3.2) равна

$$\mathbf{F}_{21} = -\frac{\partial \Phi(r)}{\partial \mathbf{r}_2} = -\frac{d\Phi(r)}{dr} \frac{\partial r}{\partial \mathbf{r}_2} = -\frac{d\Phi(r)}{dr} \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{r}.$$

Окончательно с учётом (1.3.2)

$$\mathbf{F}_{21} = G \frac{m_1 m_2}{r^2} \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{r}. \quad (1.3.3)$$

Очевидно,



$$F_{12} = -F_{21}. \quad (1.3.4)$$

Материальная субстанция, обеспечивающая гравитационное взаимодействие массивных объектов, т.е. элементов вещества — это и есть поле тяготения или гравитационное поле.

Интересно отметить, что величины  $m_1$  и  $m_2$ , входящие в соотношения (1.3.2) и (1.3.3), численно *в точности равны* массам частиц, которые фигурируют в уравнениях движения механики (1.2.1), (1.2.2). Однако явления, описываемые этими соотношениями, совершенно различны. Массу материального объекта, фигурирующую в уравнениях динамики, называют *инертной массой*, а массу, входящую в формулу для силы тяготения — *гравитационной* или «тяжёлой» массой. Почему инертная и гравитационная массы совпадают — загадка.

### 1.3.5. Общая теория гравитации

Дальнейшее развитие теория гравитации получила лишь в 10-е годы XX века, когда **Альберт Эйнштейн** создал *общую теорию относительности*. Эта теория, как и специальная теория относительности (см. п. 1.2), легла в основу революции в физике XX века.

### 1.3.6. Электромагнитное поле

Наиболее изученной полевой формой существования материи к описываемому моменту являлось *электромагнитное поле*.

Количественными характеристиками поля являются интенсивные величины — напряжённости  $E(t, r)$ ,  $H(t, r)$  и индукции  $D(t, r) = \varepsilon E(t, r)$ ,  $B(t, r) = \mu H(t, r)$  электрического и магнитного поля, которые зависят от времени и пространственных координат ( $\varepsilon$  и  $\mu$  — диэлектрическая и магнитная проницаемости вещества, в котором распространяется электромагнитное поле).

Приведенные выше формулы записаны в системе СГСЕ. В системе СИ  $\varepsilon$  и  $\mu$  следует умножить соответственно на электрическую постоянную  $\varepsilon_0$  и магнитную постоянную  $\mu_0$ .

### 1.3.7. Уравнения электромагнитного поля

Уравнения, описывающие пространственно – временную динамику электромагнитного поля, предложил в 70–е годы XIX века **Джеймс Клерк Максвелл**. Как спустя 30 лет показал А. Эйнштейн, теория электромагнитного поля Дж. Максвелла и релятивистская динамика вещества образуют единое целое. Не случайно статья А. Эйнштейна, в которой были сформулированы основы теории относительности, называется «К электродинамике движущихся сред».

В дальнейшем оказалось, что взаимодействие электромагнитного поля и вещества сопровождается квантовыми

эффектами, приводящими, в частности, к взаимным превращениям поля и вещества. Для описания подобных эффектов в 30–е годы XX века была разработана *квантовая электродинамика*.

В данном учебном пособии эта теория не описывается. Поэтому здесь не приводятся и уравнения Максвелла. Нам потребуются лишь элементарные сведения об электростатике.

### 1.3.8. Электрическое поле

На основе обобщения опытных данных было показано, что потенциальная энергия взаимодействия двух заряженных материальных точек (точечных зарядов), находящихся на расстоянии  $r$ , равна

$$\Phi(r) = \frac{q_1 q_2}{r} + E_0, \quad (1.3.5)$$

где  $q_1$  и  $q_2$  — электрические заряды частиц. Соотношение (1.3.5) удивительно похоже на (1.3.2), хотя описываемые этими формулами закономерности описывают совершенно разные физические явления. Причина такого сходства загадочна.

Формула (1.3.5) записана в системе СГСЕ. В системе СИ в знаменатель выражения (1.3.5) следует добавить электрическую постоянную  $\varepsilon_0$ , умноженную на  $4\pi$ .

Соотношение (1.3.5) известно как **закон Кулона**.

### 1.3.9. Напряжённость электрического поля

Сила взаимодействия между точечными заряженными частицами подсчитывается аналогично (1.3.3):

$$\mathbf{F}_{21} = \frac{q_1 q_2}{r^2} \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{r}. \quad (1.3.6)$$

При этом, разумеется, как и в (1.3.4),

$$\mathbf{F}_{12} = -\mathbf{F}_{21}.$$

Отношение силы, действующей на заряженную частицу со стороны электрического поля, созданного другой заряженной частицей или системой заряженных частиц, к заряду этой частицы,

$$\mathbf{E} = \mathbf{F} / q, \quad (1.3.7)$$

называется *напряжённостью* электрического поля. Как видно из (1.3.6), (1.3.7), напряжённость электрического поля не зависит от величины заряда частицы, на которую со стороны поля действует сила, и определяется только свойствами источника поля.

Так, напряжённость поля, создаваемая первой частицей (1.3.6) в точке  $\mathbf{r}$ , где находится вторая частица, получим, разделив в соответствии с (1.3.7) выражение (1.3.6) на заряд второй частицы:

$$E = \frac{q_1}{r^2} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_1}{r}. \quad (1.3.8)$$

### 1.3.10. Другие поля

В XX веке, помимо гравитационного и электромагнитного, физикам стали известны и другие поля, связанные с силами взаимодействия разного рода микрообъектов — элементарных частиц: например, нуклонов (протонов, нейтронов), входящих в состав атомных ядер (так называемых ядерных сил). Все подобные объекты являются сугубо «квантовыми», т.е. не описываются классической физикой. Соответствующие взаимодействия изучаются методами экспериментальной физики высоких энергий и теоретически описываются *релятивистской квантовой теорией поля* — наукой, которая и в настоящее время ещё далека от завершения.

Сложности современной теории поля порождают множество измышлений и спекуляций. Так, например, приходится слышать и читать о некоем торсионном поле, которое будто бы обеспечивает мгновенную передачу информации на любые расстояния и обуславливает «эффект» телепатии. Сообщают о «пси» – поле, которое якобы позволяет людям обмениваться мыслями и воспринимать мир «шестым» чувством, и.т.п. Необходимо подчеркнуть, что все подобные «теории» не основаны на каких бы то ни было достоверных экспериментальных фактах и поэтому не воспринимаются всерьёз современной физикой.

## Вопросы для самопроверки

1.3.1. Оцените отношение сил тяготения и электростатического взаимодействия двух электронов.

1.3.2. Какие длины волн и частоты электромагнитного поля соответствуют радиоволнам в FM–диапазоне, инфракрасному излучению, свету в видимом диапазоне, ультрафиолетовому свету, гамма-излучению?

## 1.4. Основные принципы квантовой физики

### 1.4.1. Краткая история квантовой физики

*14 декабря 1900 г.:* день рождения квантовой физики.

**Макс Планк** (1858–1947)



информирует научное сообщество, что ему удалось вывести формулу, точно описывающую спектральную и температурную зависимости спектральной интенсивности излучения абсолютно чёрного тела. Для

этого, вопреки классической физике и здравому смыслу, пришлось предположить, что обмен энергией между полем излучения и веществом происходит не сколь угодно малыми, а конечными порциями энергии — *квантами*.

Величина кванта энергии  $\Delta E$ , по Планку, однозначно определяется длиной волны  $\lambda$  или линейной частотой  $\nu$  (либо периодом  $T = 1/\nu$ ) электромагнитного поля. Эти величины, как известно, связаны соотношением

$$\lambda \nu = c \quad (1.4.1)$$

где

$$c = |\mathbf{c}|$$

— абсолютная величина скорости распространения поля (скорости света)

$$\mathbf{c} = c\mathbf{s}, \quad (1.4.2)$$

а  $\mathbf{s}$  — единичный вектор в направлении распространения поля.

Формула Планка

$$\Delta E = h \nu \quad (1.4.3)$$

является одним из самых знаменитых соотношений в современной физике. Входящая в (1.4.3) величина  $h$  оказалась, как ни странно, *универсальной* постоянной, не зависящей ни от вещества, с которым электромагнитное поле обменивается энергией, ни от условий протекания этого процесса. Сам Планк приблизительно определил

численное значение этой величины, «подогнав» его под наблюдаемую зависимость спектральной интенсивности излучения АЧТ  $I_\nu(\nu, T)$  (см. п/п. 1.1.6) от частоты излучения и температуры. Интересно отметить, что эта константа является единственным «подгоночным параметром» в обсуждаемой довольно сложной формуле.

В настоящее время постоянная Планка определена с гораздо большей точностью: в 1987 году на конференции Международного комитета по численным данным для науки и техники (CODATA) установлено следующее её значение вместе с оценкой погрешности:

$$h = 6,6260755(40) \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

Следует заметить, что «старой» постоянной Планка  $h$  теперь обычно не пользуются: более удобной оказалась «новая» постоянная Планка

$$\hbar = h / 2\pi = 1,05457266(63) \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}. \quad (1.4.4)$$

1905 г. **Альберт Эйнштейн** (1879–1955)



вопреки классической физике и здравому смыслу предполагает, что электромагнитное поле состоит из частиц (точнее, квазичастиц) — *фотонов*, движущихся



со скоростью света, не имеющих массы и обладающих импульсом и кинетической энергией, пропорциональными частоте света. Это предположение позволяет построить точную теоретическую модель явления фотоэффекта.

По Эйнштейну, импульс фотона равен

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad (1.4.5)$$

где  $\mathbf{k}$  — волновой вектор поля, совпадающий с направлением распространения электромагнитной волны (1.4.2)

$$\mathbf{k} = k\mathbf{s}; \quad k = |\mathbf{k}| \quad (1.4.6)$$

и связанный с длиной волны соотношением

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (1.4.7)$$

Соотношения (1.4.5) – (1.4.7) можно объединить в одно:

$$\mathbf{p} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \mathbf{s}; \quad p = ps. \quad (1.4.8)$$

По Эйнштейну, входящая в соотношения (1.4.5), (1.4.7), (1.4.8) константа  $\hbar$  — это постоянная Планка (1.4.4).

Поскольку импульс фотона (1.4.8) конечен, а сам фотон, очевидно, движется со скоростью света, то, как видно из (1.2.20),

его масса покоя должна быть равна нулю. Тогда из (1.2.14), (1.2.15) вытекает следующая связь между импульсом и энергией фотона:

$$E = pc + E_0 \quad (1.4.9)$$

(напомним, что  $E_0$  — произвольная постоянная, с точностью до которой всегда определена энергия). Учитывая (1.4.1) и (1.4.4), из (1.4.9) получим связь между энергией фотона и частотой электромагнитного поля:

$$E = h\nu + E_0. \quad (1.4.10)$$

Формулы Эйнштейна (1.4.10) и Планка (1.4.3) очень похожи (по-видимому, формула Планка была положена Эйнштейном в основу приведенных рассуждений). Однако если Планк предположил, что *обмен* энергией между электромагнитным полем и веществом происходит порциями — квантами  $\Delta E = h\nu$ , то, по Эйнштейну, *само поле* состоит из квантов света — фотонов с энергией (1.4.10).

1906 г. Предположив, что акустическое поле колеблющегося твёрдого тела состоит из квазичастиц — *фононов*, энергия которых, как и фотонов, пропорциональна частоте колебаний (1.4.10), А. Эйнштейн объяснил температурную зависимость теплоёмкости кристаллов вблизи абсолютного нуля.

1913 г. **Нильс Бор** (1885–1962)



дополнил «планетарную» модель атома Э. Резерфорда гипотезой о *стационарных состояниях* атомов, т.е. о таких «орбитах» электронов в поле ядра, при движении по которым энергия сохраняется. Изменение энергии атома, согласно Бору, происходит только при его переходе из одного стационарного состояния в другое. Именно такие переходы и сопровождаются излучением или поглощением электромагнитного поля.

Бор предположил, что набор стационарных состояний атомов образует счётное множество, и предложил *правила квантования*, т. е. подсчёта возможных значений энергии и момента импульса электрона в атоме. При этом частота и длина волны порции или кванта электромагнитного поля, излучаемого или поглощаемого при переходе атома из стационарного состояния с энергией  $E_n$  в состояние с энергией  $E_m$ , определяются формулой Планка (1.4.3):

$$\nu = \frac{|E_m - E_n|}{h}; \quad \lambda = \frac{hc}{|E_m - E_n|}.$$

Выполнив расчёты этих величин для атома водорода на основе теории стационарных состояний и правил квантования, Бор показал, что они в точности совпадают с частотами и длинами волн *спектральных линий*, наблюдаемых в спектре излучения водорода.

Таким образом, Бор объяснил происхождение линейчатого спектра излучения газов и продемонстрировал адекватность своих гипотез о строении атома экспериментальным данным.

1923 г. **Луи де Бройль** (1892–1987),



как бы перевернув соотношение Эйнштейна (1.4.5), (1.4.8), высказал предположение, что если электромагнитная волна обладает свойствами частицы, то и всякая частица обладает волновыми свойствами, причём длина волны частицы обратно пропорциональна её импульсу, а волновой вектор (1.4.6), (1.4.7) пропорционален вектору импульса:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}; \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (1.4.11)$$

Безуспешные попытки придать смысл формуле де Бройля (1.4.11), описывающей, как принято было говорить, «волны материи», внесли полное смятение в умы современников. Если наличие импульса у поля как-то ещё можно было себе представить, то утверждение, что частица вещества (корпускула) есть в то же время волна, представлялось совершенно абсурдным!

1925 г. **Джордж Уленбек** (1900–1988) и **Сэмюэл Гаудсмит** (1902–1978)



(на фото Дж. Уленбек, Х. Крамерс и С. Гаудсмит)

обнаруживают, что у электрона, помимо трёх поступательных, есть четвёртая степень свободы — спин, необъяснимая с позиций классической физики. (Спин протона открывает в 1927 г. советский учёный Д.Н. Денисюк).

1925 г. **Вольфганг Паули** (1900–1958)



формулирует принцип запрета, означающий, что, вопреки здравому смыслу, система невзаимодействующих электронов обнаруживает коллективное поведение.

1925 г. **Вернер Гайзенберг** (1901–1976)



публикует «матричную механику» — абстрактный теоретический подход, с единых позиций адекватно объясняющий все известные аспекты поведения микрочастиц.

Есть мнение, что именно 1925 год следует считать датой рождения квантовой механики как целостной науки.

## 1926 г. Эрвин Шрёдингер (1887–1961)



публикует «волновую механику», развивающую идею де Бройля о волнах материи. В рамках волновой механики получаются те же результаты, что и на основе матричной механики, но с применением совсем иного математического аппарата. В этом же году Э. Шрёдингер показывает, что между волновой и матричной механикой имеется взаимно однозначное соответствие.

## 1926 г. Макс Борн (1882–1970)



устанавливает вероятностный смысл волновой функции, введенной Э. Шрёдингером. Открытие М. Борна сводится к немыслимому с позиций классической физики утверждению о том, что динамическое поведение микрочастиц носит не причинный, а случайный характер. Иными словами, если в данный момент известно, где находится микрообъект, какова его скорость и какая сила на него действует, невозможно предсказать ни положение микрообъекта в пространстве, ни его скорость в последующий момент времени. Можно лишь утверждать, что данный объект с той или иной вероятностью находится в том или ином месте пространства и что его скорость движения также имеет случайные величины и

направление. Иными словами, причинно – следственные отношения связывают не значения динамических переменных, а распределения вероятностей этих значений.

Развитие событий вокруг квантовой физики приобретает характер сенсации с оттенком скандала.

1927 г. Скандал усиливается, когда В. Гайзенберг объявляет, что у микрочастиц нет траекторий, и формулирует *принцип неопределённостей*.

В соответствии с этим принципом координата  $x$  и одноимённая проекция импульса микрочастицы  $p_x$  суть динамические переменные, которые одновременно (совместно) не могут иметь определённых значений. Значения этих величин находятся в пределах  $x \pm \Delta x$  и  $p_x \pm \Delta p_x$ , а произведение неопределённостей удовлетворяет порядковому неравенству

$$\Delta x \Delta p_x > \sim \hbar. \quad (1.4.12)$$

Из (1.4.12) следует, что чем сильнее локализован объект, т.е. чем более определённым является его положение в пространстве и чем, соответственно, меньше неопределённость  $\Delta x$ , тем более неопределённым оказывается его импульс, т.е. тем больше его неопределённость  $\Delta p_x$ , т.е. неопределённость величины и направления скорости движения объекта. Напротив, чем меньше  $\Delta p_x$ , тем больше  $\Delta x$ . Обе эти неопределённости никогда не могут быть одновременно равны нулю. Если же одна из них стремится к

нулю, то другая обращается в бесконечность. Частица, у которой вектор импульса задан точно, имеет абсолютно неопределённое положение в пространстве, т.е. может находиться где угодно с равной вероятностью. Частица, локализованная в строго определённой точке пространства, обладает совершенно неопределённой скоростью как по величине, так и по направлению движения.

Ясно, что в подобных условиях о траектории частицы, т.е. о непрерывной дифференцируемой пространственной кривой, которая образована последовательными во времени положениями движущейся точки, не может быть и речи.

1926 г. **Поль Андриен Морис Дирак** (1902–1984)



обнаруживает связь между спином микрочастиц и характером их коллективного поведения (статистикой), разрабатывает квантовую статистическую механику, квантовую теорию излучения, квантовую теорию электромагнитного поля и формулирует релятивистское (т.е. удовлетворяющее требованиям теории относительности) волновое уравнение (1927 г.), которое позволило автору дать теоретическое объяснение спина микрочастиц и открыть античастицы.

В дальнейшем на базе этих открытий были разработаны квантовая физика атомов и молекул, теория химической связи, квантовая теория твёрдого тела, квантовая статистическая физика, ядерная физика, квантовая электродинамика (теория



взаимодействия электромагнитного поля и вещества), квантовая теория поля, теория элементарных частиц — то есть, собственно говоря, вся современная физика. Последние из перечисленных разделов характерны тесным переплетением квантовой физики и теории относительности А. Эйнштейна.

Выдающийся советский физик академик **Лев Давыдович Ландау** (1908–1968) разработал полушуточную шкалу классов учёных – физиков: «сила» каждого последующего класса была вдвое ниже предыдущего. Так вот, в приведенном выше списке представлены в основном имена первоклассных учёных по шкале Ландау. Впрочем, для двух из них Л.Д. Ландау придумал специальный класс  $\frac{1}{2}$ . Туда он поместил А. Эйнштейна и Н. Бора.

Альберт Эйнштейн, несомненно, является универсальным гением физики XX века. В течение нескольких лет, начиная с 1905 г., он выполнил ряд эпохальных теоретических работ, любой из которых хватило бы, чтобы её автор вошёл в историю науки как звезда первой величины:

- создал специальную теорию относительности;
- открыл фотоны — ультрарелятивистские квазичастицы, из которых состоит электромагнитное поле, и предложил теорию фотоэффекта;
- вывел формулу Планка для спектральной интенсивности излучения абсолютно чёрного тела, предсказав эффект вынужденного излучения электромагнитного поля, который лежит в основе работы квантовых генераторов (лазеров);

- предложил модель колеблющейся кристаллической решётки твёрдого тела как совокупности квазичастиц — фононов, и вывел на этой основе соотношение, в целом правильно описывающее температурную зависимость теплоёмкости простых кристаллов во всём диапазоне температур (в дальнейшем эта модель была уточнена П. Дебаем и стала точно соответствовать результатам измерений при низких температурах);
- создал теорию броуновского движения и вывел универсальное соотношение между коэффициентами подвижности и диффузии;
- создал основы квантовой статистической физики — точнее, того её раздела, который описывает коллективное поведение микрочастиц с «целым» спином (бозонов);
- создал общую теорию относительности, которая является основой теоретической астрофизики и космологии.

Множество фундаментальных соотношений современной физики носят имя А. Эйнштейна: формула Эйнштейна, коэффициенты Эйнштейна, статистика Бозе – Эйнштейна.

Нильс Бор, второй обитатель «полуцелого» класса выдающихся учёных, также выполнил ряд блестящих работ по атомной физике. Однако наиболее важную роль в истории науки сыграла созданная Бором Копенгагенская школа теоретической физики, из которой вышло большинство выдающихся участников революции в физике XX века — В. Гайзенберг, Э. Шрёдингер, В. Паули, М. Борн, Х Крамерс (1894–1952) и др. Коллективный разум Копенгагенской

школы, ядром которой был Н. Бор, придал огранку тем драгоценным идеям, которые рождались в обсуждениях этих идей на её семинарах, а также помог сформулировать целостные и стройные основы мировоззрения новой науки.

Себя Л.Д. Ландау скромно относил сперва ко второму, а позднее — к полуторному классу.

Фотографии героев революции в физике XX века скопированы из Википедии. Автор отобрал не общеизвестные портреты этих людей, лауреатов Нобелевской премии, членов множества академий, уже достигших солидного возраста, а, по возможности, те фото (возможно, не самого лучшего качества), на которых герои изображены молодыми. Когда они совершали свои открытия, многим из них было от 20 до 30 лет. Есть над чем задуматься, не правда ли?

#### **1.4.2. Корпускулярно – волновой дуализм**

Итак, многие наблюдаемые факты, необъяснимые с позиций классической физики (см. п. 1.1) — фотоэффект, эффект Комптона, дифракция электронов при их прохождении через тонкие пластины твёрдых веществ (т.е. на кристаллических решётках), удаётся объяснить вполне естественным образом. Надо только сделать два утверждения — с точки зрения классической физики совершенно абсурдные.

А. Поле (в частности, электромагнитное), с классической точки зрения представляющее собой распределённый в пространстве и во

времени волновой процесс, который характеризуется длиной волны  $\lambda$ , линейной частотой  $\nu$  (или периодом  $T = 1/\nu$ ) и скоростью распространения  $\mathbf{c} = c\mathbf{s} = s\lambda\nu$ , где  $\mathbf{s}$  — единичный вектор в направлении распространения волны, а

$$c = |\mathbf{c}| = \lambda\nu \quad (1.4.13)$$

— абсолютная величина скорости (для электромагнитного поля — скорость света), состоит из движущихся со скоростью света частиц, которые обладают энергией

$$E = h\nu + E_0 \quad (1.4.14)$$

и импульсом

$$\mathbf{p} = p\mathbf{s}; \quad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \quad (1.4.15)$$

в соответствии с формулами Эйнштейна (1.4.8) и (1.4.10).

Б. Частица вещества (корпускула), обладающая импульсом  $\mathbf{p} = p\mathbf{s}$ , вместе с тем ведёт себя как волна, которая обладает длиной волны де Бройля (1.4.11)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad (1.4.16)$$

частотой  $cp/h$  (в данном случае  $c$  — скорость корпускулы, а не света!) и распространяется в пространстве с волновым вектором

$$\mathbf{k} = \frac{p}{\hbar} \mathbf{s}. \quad (1.4.17)$$

Из сказанного следует, что понятия «частица вещества (корпускула)» и «волна», полярно противоположные, как «вещество» и «поле», суть лишь атрибуты классической картины мира. В действительности природа едина, и реальный материальный объект, который в одних условиях воспринимается нами как «корпускула», в других условиях, т.е. как бы повернувшись к нам другой своей стороной, демонстрирует нам свои волновые свойства.

Условия эти можно сформулировать таким же образом, как в оптике.

Если длина волны  $\lambda$  мала по сравнению с характерным геометрическим масштабом  $L$  системы, в которой находится микрообъект или распространяется свет,

$$\lambda \ll L, \quad (1.4.18)$$

то распространение света описывается законами *геометрической оптики*, а микрообъект ведёт себя как *корпускула*.

Напротив, если имеет место условие, обратное (1.4.18),

$$\lambda \gg L, \quad (1.4.19)$$

то распространение света описывается законами *волновой оптики*, а микрообъект ведёт себя как *волна*.

Возникает, однако, соблазн попытаться объяснить наличие волновых свойств частиц–корпускул и корпускулярных свойств волн, не выходя за рамки классической физики. Разве, скажет скептик, классическая гидродинамика (а также акустика, оптика) не даёт нам подобные примеры?

Хорошо известно явление распространения в сплошных средах так называемых *уединённых волн* или *солитонов*. Наполните барабан с небольшим отверстием в боковой поверхности дымом и ударьте по мембране. Из отверстия «выскочит» дымовой солитон (т.е. тот же воздух, только содержащий окрашивающие его примеси твёрдых частиц) и начнёт двигаться в окружающем воздухе по прямолинейной траектории, как свободная корпускула. (Некоторые курильщики умеют подобным же образом выпускать изо рта колечки дыма). Если на пути солитона попадётся лёгкий предмет, произойдёт столкновение: солитон сойдёт предмет и будет двигаться дальше, несколько изменив направление. Но если на пути солитона встретится препятствие, солитон обогнёт его, как волна, т.е. произойдёт дифракция. Вот вам и корпускулярно – волновой дуализм!

Так вот: будем считать, что корпускул вообще не существует, а все частицы — это уединённые волны. Ну, а поле — это распределённые волны. И получим вполне адекватную картину

мира. Материя состоит из волн, и не надо никакой квантовой физики.

(Это рассуждение автор слышал от замечательного физика — экспериментатора, блестяще образованного и увлечённого наукой человека, профессора Д.Л. Тимрота).

К сожалению, всё гораздо сложнее: в действительности микрообъект — это и не корпускула, и не волна, а некая сущность, которая вообще не может быть описана на «человеческом» языке классической физики.

Чтобы это пояснить, вернёмся к опыту по изучению дифракции микрочастиц (неважно, электронов или фотонов) — см. пункты 8 и 9 п/п. 1.1.6.

Уже одно то, что одиночные микрообъекты, проходя через щель (отверстие) в экране, «знают», в какие места детектора попадать предпочтительно, а в какие — нежелательно, вызывает недоумение. Если микрообъект — волна, то каждый из прошедших через щель микрообъектов должен был бы создавать на детекторе пусть слабую, но дифракционную картину. Но микрообъект оставляет точечный след на детекторе, что, несомненно, свидетельствует о том, что он — частица (корпускула). А если это так, то откуда корпускула, проходящая через щель, «знает», какова её ширина, в соответствии с которой должен сформироваться вид дифракционной картины на детекторе?

Ещё более парадоксальные результаты увидим, усложнив схему опыта. Поставим на пути микрообъектов к детектору,

регистрирующему попадания частиц, не одну, а две одинаковые щели.

Какую картину зафиксирует детектор? В простейшем случае — *наложение* одинаковых, но смещённых друг относительно друга картин, возникших в результате *дифракции* одних частиц на одной щели, других — на другой.

Однако если расстояние между щелями сделать по порядку величины таким же, что и ширина каждой из щелей, то возникнет не сложение отдельных картин, а новая картина, соответствующая *интерференции* «волн», прошедших через щели. Эта картина не изменится, если её формирует не пучок частиц, а отдельные частицы, последовательно, по одиночке проходящие в течение достаточно длительного времени экран с двумя щелями и попадающие на экран (см. пункт 9 п/п. 1.1.6).

Но для того, чтобы «знать», в какие места детектора надо попадать, а в какие — не надо, чтобы в итоге на детекторе получилось требуемое чередование светлых и тёмных интерференционных полос, микрообъект

- либо должен пройти через обе щели сразу, для чего перед экраном «разделиться» на две части, а затем сразу же опять «слиться», чтобы попасть на детектор как единое целое;
- либо, проходя через одну из щелей, «увидеть», что имеется другая щель, в соответствии с положением которой ему надо двигаться к экрану, и скорректировать направление своего движения.

Оба предположения совершенно нелепы.



Отсюда видно, что микрообъект не является ни корпускулой, ни волной. Но третьего классической физикой не дано! Следовательно, объяснить результаты рассматриваемого эксперимента в классических терминах невозможно. Однако именно так себя ведёт природа!

### 1.4.3. Принцип неопределённостей

Этот принцип, сформулированный В. Гайзенбергом, уже подробно комментировался нами в п/п. 1.4.1. В соответствии с ним неопределённости в значениях «сопряжённых» координаты и импульса связаны неравенством Гайзенберга (1.4.12)

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim \hbar. \quad (1.4.20)$$

Входящие в соотношение (1.4.20) величины  $\Delta x$  и  $\Delta p_x$  вовсе не являются погрешностями измерения  $x$  и  $p_x$ . Классическая физика учит нас, что измерение любой физической величины сопровождается погрешностями, но, совершенствуя методику измерения и измерительные приборы, погрешность можно уменьшить, и это уменьшение ничем не ограничено. Квантовая физика устами принципа неопределённости говорит нам, что, независимо от того, есть ли наблюдатель, выполняющий измерения, или наблюдателя не существует, природа устроена так, что динамические переменные  $x$  и  $p_x$  никогда не имеют и в

принципе не могут иметь одновременно (т.е. совместно) определённых значений. Если вы желаете экспериментальным путём как можно точнее установить положение микрообъекта в пространстве — не пытайтесь одновременно измерять его скорость или импульс: идя на поводу у своей неумелой любознательности, вы только испортите дело. Точно так же, пытаясь заставить микрообъект двигаться со строго определённой скоростью, не силтесь установить, где он находится: вам это всё равно не удастся, зато ваши частицы начнут разбегаться во все стороны с любыми скоростями!

Как уже указывалось в п/п. 1.4.1, это, в частности, означает, что у микрообъекта нет и не может быть траектории движения.

#### **1.4.4. Вероятностный характер динамических событий**

Как следует из сказанного в п/п. 1.4.1, если  $\xi$  — некоторая физическая величина — динамическая переменная какого-то микрообъекта, то вопрос «чему равна величина  $\xi$  в некоторый момент времени  $t$ ?» является, вообще говоря, неправильным, т.к. в большинстве случаев ответа на него не существует. Правильной является такая постановка вопроса: *с какой вероятностью рассматриваемая величина в момент времени  $t$  имеет значение  $\xi$ ?* Тем самым величина  $\xi$  должна рассматриваться как *случайная*.

С точки зрения теории вероятности, впрочем, вопрос задан не вполне корректно. Известно, что случайные величины бывают двух

типов. Одни из них имеют *дискретный* набор (или *спектр*) значений, которые можно пронумеровать с помощью натуральных чисел:

$$\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n, \dots, \xi_{n_{\max}}. \quad (1.4.21)$$

Другие образуют *непрерывный* набор (или спектр) значений:

$$\xi_{\min} \leq \xi \leq \xi_{\max}. \quad (1.4.22)$$

Понятно, что перенумеровать эти значения невозможно.

Если мы имеем дело с *дискретной случайной величиной*, то тогда каждому её значению  $\xi_n$  из набора (1.4.21) соответствует вероятность  $w_n$  этого значения. Напомним, что имеется в виду. Пусть случайная величина  $\xi$  наблюдалась в одних и тех же условиях  $N$  раз (т.е. было выполнено  $N$  случайных испытаний), и в  $N_n$  случаях «выпало» значение  $\xi_n$ . Если  $N \gg 1$ , то отношение  $N_n/N$  будет *устойчивой оценкой* доли случаев, в которых получился данный результат испытания, или частоты появления результата  $\xi_n$ . Эта устойчивая оценка и называется вероятностью рассматриваемого исхода случайного испытания, т.е. вероятностью *случайного события*, состоящего в том, что величина  $\xi$  окажется равной  $\xi_n$ . Например, вероятность того, что при выбрасывании игральной кости (если её центр тяжести не смещён, а игрок не жульничает) выпадет грань 2,  $w_2 = 1/6$ . Вероятность того, что карта,

наугад вытащенная из хорошо стасованной колоды, которая состоит из 52 карт, окажется тузом любой масти, равна  $4/52 = 1/13$ . Но это вовсе не значит, что, подбросив игральную кость 6 раз, вы увидите один раз 1, один раз 2 и.т.д.!  $N_2/N$  окажется более–менее близким к  $1/6$ , если  $N = 10000$  или более того.

Очевидно, что сумма вероятностей всех исходов случайных событий по определению всегда равна единице:

$$\sum_{n=1}^{n_{\max}} w_n = 1. \quad (1.4.23)$$

Соотношение (1.4.23) называется *условием нормировки* распределения вероятностей.

Если любой исход случайного испытания появляется одинаково часто, то такие случайные события (и соответствующие им значения случайной величины) называются *равновероятными*. Из (1.4.23) очевидно, что в этом случае

$$w_n = 1/n_{\max}; \quad 1 \leq n \leq n_{\max}. \quad (1.4.24)$$

Например, равновероятны выпадение любой грани «хорошей» игральной кости ( $w_n = 1/6$  для любого  $1 \leq n \leq 6$ ) или вытаскивание любой наперёд заданной карты из хорошо стасованной колоды ( $w_n = 1/52$  для любого  $1 \leq n \leq 52$ ). Но, конечно, не из рукава сдающего!

Описанный способ описания распределения вероятностей пригоден, очевидно, только для дискретных случайных событий и величин, которые можно перенумеровать. Если же случайная величина — непрерывная, то для описания распределения вероятностей следует использовать не дискретный набор вероятностей, а непрерывную функцию  $P(\xi)$ , которая называется *плотностью вероятности*.

Эта функция позволяет подсчитать вероятность того, что в текущем испытании значение случайной величины  $\xi$  оказывается в интервале  $\xi_1 \leq \xi \leq \xi_2$ :

$$w(\xi_1 \leq \xi \leq \xi_2) = \int_{\xi_1}^{\xi_2} P(\xi) d\xi. \quad (1.4.25)$$

В частности, если интервал бесконечно мал, то вместо (1.4.25) можно записать

$$dw = P(\xi) d\xi. \quad (1.4.26)$$

Определение (1.4.25) показывает, что вопрос «чему равна вероятность, что случайная величина имеет *точно* значение  $\xi$ ?», правильно поставленный применительно к дискретной случайной величине, для непрерывно распределённой случайной величины не имеет никакого смысла: эта вероятность тождественно равна нулю!

Из (1.4.25) следует *условие нормировки* плотности вероятности [сравните с 1.4.23)!]:

$$\int_{\xi_{\min}}^{\xi_{\max}} P(\xi) d\xi \equiv \int_{-\infty}^{\infty} P(\xi) d\xi = 1. \quad (1.4.27)$$

Первое равенство (1.4.27) означает, что в любом случайном испытании значение случайной величины  $\xi$  наверняка (т.е. с вероятностью, равной 1) окажется в интервале  $\xi_{\min} \leq \xi \leq \xi_{\max}$  (1.4.22), т.е.

$$w(\xi_{\min} \leq \xi \leq \xi_{\max}) = 1.$$

Второе равенство (1.4.26) тождественно первому, поскольку, как ясно из (1.4.25), вне интервала  $\xi_{\min} \leq \xi \leq \xi_{\max}$  (1.4.22) плотность вероятности  $P(\xi)$  тождественно равна нулю.

Важным частным случаем является непрерывная случайная величина, *равномерно распределённая* в интервале  $\xi_{\min} \leq \xi \leq \xi_{\max}$ . Хотелось бы сказать, что любое значение такой случайной величины равновероятно, но по названной выше причине такое высказывание некорректно. Правильным является следующее определение: вероятность того, что значение равномерно распределённой случайной величины окажется в любом интервале  $\xi_1 \leq \xi \leq \xi_2$ , равно

$$w(\xi_1 \leq \xi \leq \xi_2) = C(\xi_2 - \xi_1), \quad (1.4.28)$$

где  $C$  — константа, не зависящая от  $\xi$ .

Из сравнения (1.4.28) с (1.4.25), (1.4.26) ясно, что при  $\xi_{\min} \leq \xi \leq \xi_{\max}$  рассматриваемая константа есть не что иное, как плотность вероятности равномерно распределённой случайной величины:

$$P(\xi) = C, \quad (1.4.29)$$

а из условия нормировки (1.4.27) следует, что эта константа равна

$$C = \frac{1}{\xi_{\max} - \xi_{\min}}. \quad (1.4.30)$$

Если дискретные случайные события и величины чаще встречаются в мире азартных игр — в кости, «орла и решку», карты, рулетку и т.п., то непрерывно распределённые случайные величины больше распространены в обыденной жизни. Таковыми, к примеру, являются значения роста, массы или коэффициента умственного развития (IQ) наугад выбранного человека, интервала времени, в течение которого придётся ожидать автобус на остановке, и.т.д.

В окружающем нас «классическом» мире мы очень часто рассматриваем те или иные события и величины как случайные потому, что не располагаем достаточной информацией, чтобы

достоверно их предвидеть и предсказывать. Например, если бы мы точно знали, с какой линейной и угловой скоростью подброшена монета и каково было её положение в пространстве в момент броска, то, решив уравнения классической механики для этих начальных условий, могли бы точно указать, какой стороной — «орлом» или «решкой» — она упадёт. Поскольку же мы ничего этого не знаем и не умеем, а начальные условия для каждого броска монеты различны, и игрок, бросающий монету, не может их контролировать, то мы предполагаем, что исход броска случаен, а два возможных исхода броска — равновероятны. И надо сказать, что опыт полностью подтверждает это предположение. Однако на самом-то деле всё происходит не случайно, а вполне закономерно и полностью детерминировано, т.е. причинно обусловлено. Поэтому использование нами вероятностных характеристик для предсказания подобных явлений является лишь следствием нашей неинформированности.

С точки зрения современной физики, динамические процессы в микромире носят *принципиально* случайный характер, а теория вероятностей и математическая статистика являются единственным возможным языком их количественного описания. Так устроена природа. Вопросы «где находится микрочастица в данный момент времени?» или «каковы величина и направление её скорости?» лишены смысла. Координаты, определяющие положение микрообъекта в пространстве, и проекции вектора его скорости, являются непрерывными случайными величинами. Поэтому возможны лишь ответы на вопросы «какова вероятность



обнаружить микрообъект в данной области пространства?» и «какова вероятность того, что значение скорости объекта находится в заданном интервале?»

Естественно, что в подобных условиях теряет смысл понятие траектории микрообъекта. Вместо неё приходится говорить лишь о распределённом с той или иной плотностью  $P(t, x, y, z) \equiv P(t, \mathbf{r})$  в пространстве «облаке вероятности», в тех или иных областях которого с той или иной вероятностью в момент  $t$  возможно обнаружить данный объект. Другое «облако вероятности»  $P(t, p_x, p_y, p_z) \equiv P(t, \mathbf{p})$ , расположенное уже не в «обычном» пространстве координат  $\{x, y, z\}$ , а в «пространстве импульсов»  $\{p_x, p_y, p_z\}$ , определяет распределение вероятности различных значений импульса (скорости) объекта.

То же можно сказать и о других динамических переменных микросистем: одни из них являются непрерывными, а другие — дискретными случайными величинами.

#### **1.4.5. Крушение или рождение картины мира?**

Квантовая физика, равно как и теория относительности, впервые в истории человечества вторглась в ту область физических явлений, по поводу которых у человека не было и не могло быть никакого чувственного опыта. Поэтому такие открываемые физиками атрибуты действительности, как корпускулярное строение света, наличие волновых свойств у частиц, отсутствие у

них траекторий, квантование энергии, случайный характер событий микромира и т.п., вначале воспринимались публикой как измышления извращённого ума. Лишь по прошествии известного времени люди свыклись с мыслью о том, что природа вовсе не обязана разговаривать с ними на человеческом языке, то есть в системе понятий, адекватных повседневной практике людей, и что надо учиться разговаривать с природой на её языке. Академик Л.Д. Ландау говорил: самое большое достижение современной физики состоит в том, что люди научились воображать то, что невозможно себе представить.

Следует заметить, что сами пионеры революции в физике XX века отнюдь не были единодушны в интерпретации новых теорий. Известно, что М. Планк, будучи «классическим» физиком до мозга костей, вовсе не считал себя провозвестником новой физики и старался дистанцироваться от её «безумных» идей. Ещё более известна многолетняя дискуссия между Копенгагенской школой во главе с Н. Бором, пропагандировавшей «безумную» идею о случайном характере динамических процессов в микромире, исход которых можно предсказать только в терминах теории вероятностей, и А. Эйнштейном, который яростно отстаивал принцип детерминизма (причинности), выдумывал всевозможные мысленные эксперименты, демонстрирующие абсурдность измышлений копенгагенцев, и повторявший: «Я не могу поверить, что Господь Бог играет в кости!». В течение многих лет Эйнштейн пытался найти «скрытые параметры», дополнительные динамические характеристики микрообъектов, знание которых

превратило бы микропроцессы из случайных во вполне закономерные (см. обсуждение в п/п. 1.4.4).

Последующие события убедительно показали, что в этом споре Бор был прав, а Эйнштейн, увы, нет. Скрытых параметров обнаружить никому не удалось. Однако отсюда вовсе не следует, что в микромире, который описывает квантовая физика, не действует принцип причинности. Зависимости от времени распределений вероятности значений динамических переменных микросистем, а также их статистических характеристик — средних значений (математических ожиданий), дисперсий и т.д. — вполне закономерны и причинно обусловлены. Но — только распределения вероятностей, а вовсе не сами значения динамических переменных — наблюдаемые величины.

Таким образом, в первой трети XX века оказалось, что стройная, красивая и завершённая классическая картина мира ограничена рамками только тех явлений, которые доступны чувственному восприятию человека. Рядом бурными темпами начала расти трудно обозримая, причудливая и вычурная в стиле «модерн» структура новых знаний об устройстве мира. Этот процесс роста не окончен и сегодня. Однако старые знания вовсе не оказались отвергнутыми и опровергнутыми: они были включены в новую структуру знаний о мире как некий предельный случай, когда масштабы явлений природы соразмерны с геометрическими и временными масштабами познающего их субъекта — человека.

#### 1.4.6. Принцип дополнительности Н. Бора

Для того чтобы надлежащим образом интерпретировать открывшуюся человечеству незнакомую картину мира и научиться разговаривать с природой на её языке, потребовались не только новые физические теории, но и новые мировоззренческие, т.е. философские подходы.

Заслуга в формулировании одного из таких подходов к обсуждаемой проблеме принадлежит Н. Бору, который предложил *принцип дополнительности*. Он обратил внимание на то, что свойство «демонстрировать» наблюдателю в зависимости от способа наблюдения свои как бы взаимоисключающие атрибуты — а на самом деле атрибуты, образующие неразрывное единство, обнаруживают не только микрообъекты (в одних условиях корпускулы, в других — волны), но и самые разнообразные явления природы и общества. При этом природа устроена так, что эти взаимоисключающие атрибуты никогда не могут наблюдаться одновременно.

Очевидно, принцип дополнительности Бора является дальнейшим развитием хорошо известного в диалектике закона единства противоположностей. Деньги — это средство накопления или обращения? Человек добр или зол? Технологическая цивилизация — путь человечества к счастью или к гибели? Диалектика говорит, что любая сущность внутренне противоречива и что «борьба противоположностей» есть двигатель развития, эволюции. Принцип дополнительности добавляет: чтобы это

увидеть, необходимо не довольствоваться той картиной, которую демонстрирует предмет или явление, а изучать его с противоположных сторон, в различных условиях, различными инструментами — и тогда нам откроется целостная картина.

Очевидно, как взаимно дополнительные по Бору следует рассматривать

- корпускулярную и волновую природу любого микрообъекта;
- измерения взаимно сопряжённых динамических переменных микрообъектов, таких, как координата и одноимённая проекция импульса;
- случайные и причинно – обусловленные аспекты динамического поведения микрообъектов.

#### **1.4.7. Почему мы не видим квантовых эффектов?**

Итак, вещество — это поле, поле — это вещество. У движущихся объектов нет траекторий. Где они находятся и с какой скоростью движутся — не определено. А всё на свете случайно. Прелестно! И нас хотят убедить, что так устроен мир? А может быть, такой картина мира представляется только из окна чеховской палаты № 6, обитатели которой — жертвы так называемой революции в физике?

В самом деле, будем рассуждать здраво. Ведь все мы отлично видим, как перемещаются в пространстве материальные объекты, и благополучно наблюдаем их траектории! Что же это, обман зрения?! Если футболист бьёт пенальти и с расстояния 11 метров не

попадает в ворота — это что, результат случайного характера динамических процессов? Или, может быть, тут имеет место дифракция мяча на вратаре команды противника?

Давайте выполним кое—какие численные оценки. Пусть объект массой 1 кг движется со скоростью 1 м/с. Какова длина волны де Бройля (1.4.16) этого объекта?

Оценим порядок величины. Поскольку  $h \sim 10^{-34}$  Дж·с, а импульс объекта равен 1 кг·м/с, то  $\lambda \sim 10^{-34}$  м.

Каким способом можно измерить такую длину волны? Длины волн света в видимом, ультрафиолетовом и инфракрасном диапазоне, которые измеряют оптическими спектрографами, находятся в интервале  $10^{-6} - 10^{-8}$  м. Это больше, чем надо, на 26 порядков. Длины волн рентгеновского излучения, для измерения которых тоже имеются соответствующие спектрографы, короче всего лишь на 2–3 порядка. Где набрать ещё 24 порядка? Самые мелкие частицы вещества, из которых можно надеяться изготовить дифракционную решётку (мы даже не обсуждаем, как её сделать) — это атомные ядра: тогда шаг решётки и, соответственно, минимальная длина волны, которую можно было бы измерить (впрочем, опять — как?) хотя бы с точностью до порядка величины — это размер ядра:  $10^{-20}$  м. Но всё ещё не хватает 14 порядков! Как видим, у природы просто нет материалов для создания подходящего прибора. И никогда не будет.

Так стоит ли удивляться, что мы, с нашими физическими возможностями, не замечаем волновых свойств окружающих нас предметов? Условие (1.4.18) малости квантовых эффектов

выполняется в рассматриваемом случае с грандиозным запасом по отношению к любым мыслимым пространственным масштабам (метр, миллиметр, микрометр), и это означает, что никаких квантовых эффектов нет и в помине: классическая механика абсолютно точна.

Теперь обсудим масштабы неопределённостей положений и скоростей макроскопических объектов. Попытаемся локализовать (т.е. зафиксировать в пространстве) тело массой 1 кг с погрешностью  $\Delta x \sim 1$  мкм, или  $10^{-6}$  м. Тогда в соответствии с соотношением неопределённостей (1.4.20) неопределённость в импульсе  $\Delta p_x$  окажется порядка  $h / \Delta x = 10^{-28}$  кг·м/с. Это на 28 порядков меньше импульса 1 кг·м/с! Вы можете взять импульс в миллион или миллиард раз больше или меньше — и всё равно неопределённость импульса окажется невообразимо меньше, чем сам импульс. Таковую неопределённость не удастся обнаружить никаким прибором — не говоря уже о пяти органах чувств человека.

Но когда же, в таком случае, квантовые эффекты оказываются важными?

Рассмотрим электрон. Его масса, в соответствии с CODATA-87, равна

$$m_e = 9,1093897(54) \cdot 10^{-31} \text{ кг}, \quad (1.4.31)$$

т.е. примерно  $10^{-30}$  кг. Конечно, такая малютка довольно подвижна: порядок величины скорости «теплого» электрона — что — нибудь

$10^6$  м/с, а импульса — соответственно  $10^{-24}$  кг·м/с. Тогда длина волны де Бройля электрона окажется порядка  $10^{-34} / 10^{-24} = 10^{-10}$  м.

Но именно таков порядок размера электронной оболочки атома! Вот при таком пространственном масштабе микросистемы и выполняется условие (1.4.19), т.е. поведение электрона является сугубо квантовым. Именно поэтому любые попытки описать поведение атома методами классической физики приводят не просто к неточным, а к грубо ошибочным результатам, не имеющим ничего общего с реальной действительностью!

### **Вопросы для самопроверки**

1.4.1. Кого из выдающихся физиков XX века, внесших крупный вклад в создание квантовой физики, вы бы добавили к тому списку, который помещён в п/п. 1.4.1 учебного пособия?

1.4.2. Кто, по вашему мнению, должен лидировать в этом списке?

1.4.3. Связаны ли, на ваш взгляд, длина де Бройля микрообъекта и неопределённость его положения в пространстве?

1.4.4. Что можно утверждать о вероятности локализации микрообъекта в пространственной области, размер которой порядка или меньше его длины волны Де Бройля?

1.4.5. Не опровергает ли основные принципы квантовой физики реальная возможность наблюдать объекты размером в несколько нанометров (т.е. содержащие порядка десятков атомов) и манипулировать ими с помощью сканирующего туннельного микроскопа?



1.4.6. Какое наиболее важное изменение в картине мира произошло в результате создания квантовой физики?

1.4.7. Прокомментируйте эксперимент по измерению положения и скорости микрообъекта в одном опыте с позиций принципа дополнительности.

## 2. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

### 2.1. Волновая функция

#### 2.1.1. Волновая функция микрочастицы

Возможны несколько подходов к построению квантовой механики. Первый из них, как указывалось в п/п. 1.4.1, предложил В. Гайзенберг, второй — Э. Шрёдингер. Используя различный математический аппарат, оба эти подхода дают в конечном счёте одинаковые результаты. Позднее изящный способ построения квантовой механики, синтезирующий подходы Гайзенберга и Шрёдингера, сформулировал П.А.М. Дирак. Ещё один оригинальный подход был в дальнейшем предложен выдающимся американским физиком Р. Фейнманом.

Подход Гайзенберга (матричная механика) использует слишком абстрактные математические понятия и труден для начинающих. Подход Дирака нам нравится больше других, но его изложение требует от читателя знания аналитической механики и тоже довольно абстрактен. Формулировка Р. Фейнмана базируется на наиболее «наглядной» физической модели, которая, однако, реализуется на основе экзотического и крайне непрозрачного математического понятия «интеграл по траекториям (континуальный интеграл)», незнакомого читателю.

Для изложения основ квантовой механики нами выбран подход Шрёдингера, который основан на решении «волнового уравнения», названного именем его создателя. Неизвестной при этом является так называемая *волновая функция*.

Волновая функция  $\psi(t,x,y,z) \equiv \psi(t,\mathbf{r})$ , введенная Э. Шрёдингером в 1926 г., обеспечивает настолько полное описание динамического состояния микрочастицы, насколько это позволяют сформулированные в п. 1.4 основные принципы квантовой механики. Аргументами волновой функции являются время и три декартовы координаты. Эти переменные являются независимыми и ни в каком смысле не могут рассматриваться как координаты микрочастицы в данный момент времени.

Волновая функция комплексна:

$$\psi(t,\mathbf{r}) = a(t,\mathbf{r}) + ib(t,\mathbf{r}) = A(t,\mathbf{r})\exp[i\delta(t,\mathbf{r})], \quad (2.1.1)$$

где  $i$  — мнимая единица;  $a(t,\mathbf{r})$  и  $b(t,\mathbf{r})$  — действительная и мнимая части волновой функции;  $A(t,\mathbf{r})$  и  $\delta(t,\mathbf{r})$  — амплитуда и фаза волновой функции, причём

$$A^2 = a^2 + b^2; \quad \delta = \operatorname{arctg}(b/a). \quad (2.1.2)$$

Все величины, входящие в эти соотношения, действительны.

Напомним, что в соответствии с формулой Эйлера «комплексная экспонента» следующим образом выражается через тригонометрические функции:

$$\exp(i\delta) = \cos(\delta) + i\sin(\delta). \quad (2.1.3)$$

### 2.1.2. Вероятностный смысл волновой функции

М. Борн показал, что волновая функция  $\psi(t, x, y, z)$  позволяет найти распределение вероятностей значений координат микрочастицы  $x, y, z$ . А именно: квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности (см. п/п. 1.4.4) того, что частица в момент времени  $t$  обладает координатами  $x, y, z$ , т.е. находится в точке пространства  $\mathbf{r}(x, y, z)$ :

$$|\psi(t, \mathbf{r})|^2 \equiv \psi^*(t, \mathbf{r})\psi(t, \mathbf{r}) = P(t, \mathbf{r}). \quad (2.1.4)$$

В (2.1.4)  $\psi^*$  — величина, комплексно – сопряжённая  $\psi$  (2.1.1):

$$\psi^*(t, \mathbf{r}) = a(t, \mathbf{r}) - ib(t, \mathbf{r}) = A(t, \mathbf{r})\exp[-i\delta(t, \mathbf{r})], \quad (2.1.5)$$

а квадрат модуля волновой функции равен квадрату её амплитуды (2.1.2):

$$|\psi(t, \mathbf{r})|^2 = A^2(t, \mathbf{r}). \quad (2.1.6)$$

Напомним, что квадрат модуля комплексной экспоненты равен единице:

$$(e^{i\delta})^* = e^{-i\delta}; \quad |e^{i\delta}|^2 = e^{i\delta} e^{-i\delta} = 1. \quad (2.1.7)$$

Из (2.1.4) и (1.4.25) следует, что вероятность в момент  $t$  «обнаружить» частицу в некотором объёме  $\Omega$  равна

$$w(\Omega) = \int_{\Omega} |\psi(t, \mathbf{r})|^2 d^3 r. \quad (2.1.8)$$

В правой части (2.1.8) фигурирует тройной интеграл по области  $\Omega$ ; использовано краткое обозначение

$$d^3 r \equiv dx dy dz.$$

Из (2.1.8) следует условие нормировки плотности вероятности (2.1.4) [ср. с (1.4.27)]:

$$\int_{(\infty)} |\psi(t, \mathbf{r})|^2 d^3 r = 1. \quad (2.1.9)$$

Область интегрирования в (2.1.9) — всё бесконечное пространство.

Соотношение (2.1.9) обычно называют *условием нормировки волновой функции*.

Для того чтобы несобственный интеграл (2.1.9) существовал, т.е. сходился, волновая функция должна либо быстро исчезать при неограниченном возрастании по модулю любой координаты,

$$\lim_{|x_\alpha| \rightarrow \infty} \psi(t, \mathbf{r}) = 0; \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (2.1.10)$$

либо быть тождественно равной нулю всюду за пределами некоторого объёма, границы которого являются для частицы непроницаемыми.

В (2.1.10) для удобства использованы нумерованные обозначения координат — проекций радиус – вектора  $\mathbf{r}$ :

$$x_1 \equiv x; \quad x_2 \equiv y; \quad x_3 \equiv z. \quad (2.1.11)$$

Хотелось бы предостеречь читателей от соблазна интерпретировать волновую функцию как математическое описание некой волны, распространяющейся в пространстве «вместе» с частицей, подобно солитону (уединённой волне) в гидродинамике, акустике или оптике. Нет никакой такой волны! (См. обсуждение результатов опыта по дифракции частиц в п/п. 1.4.2.) Волновая функция не является наблюдаемой физической величиной (комплексные величины вообще суть математическое измышление, используемое для удобства вычислений, и наблюдаться не могут) и сама по себе не имеет физического смысла.

Однако, согласно М. Борну, имеет смысл квадрат модуля волновой функции, определяющий плотность вероятности местоположения микрочастицы (2.1.4). Конечно, плотность вероятности непосредственно измерить нельзя, но эту функцию случайной величины можно построить по результатам случайных испытаний, многократно измеряя значение соответствующей случайной величины. Например, расстояние электрона от ядра в атоме водорода, конечно, является случайной величиной. Если измерять эту величину, то результаты измерения каждый раз будут разными. Но, подсчитав количества результатов таких измерений, «попавших» в тот или иной интервал расстояний, можно построить и функцию  $P(r)$ , которая описывает плотность вероятности случайного события «расстояние электрона от ядра равно  $r$ ».

### **2.1.3. Статистические характеристики случайных величин**

Из теории вероятностей известно, что, зная распределение случайной величины  $\xi$ , можно подсчитать её статистические характеристики: среднее значение (математическое ожидание)  $\bar{\xi}$ , среднеквадратичное значение, т.е. среднее значение квадрата случайной величины  $\overline{\xi^2}$ , дисперсию

$$D(\xi) \equiv \overline{(\xi - \bar{\xi})^2} = \overline{\xi^2} - (\bar{\xi})^2, \quad (2.1.12)$$

(первое из двух равенств (2.1.12) — определение, второе требует доказательства), среднеквадратичное отклонение (root–mean–square deviation)

$$\Delta\xi_{rms} = \sqrt{D(\xi)} \quad (2.1.13)$$

и вообще среднее значение  $\overline{f(\xi)}$  любой функции этой случайной величины  $f(\xi)$ .

Для дискретной случайной величины (1.4.21) подсчёт выполняется по распределению вероятностей (1.4.23):

$$\bar{\xi} = \sum_{n=1}^{n_{\max}} w_n \xi_n; \quad \overline{f(\xi)} = \sum_{n=1}^{n_{\max}} w_n f(\xi_n); \quad (2.1.14)$$

для непрерывной случайной величины — по распределению (1.4.26):

$$\bar{\xi} = \int_{\xi_{\min}}^{\xi_{\max}} \xi P(\xi) d\xi \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \xi P(\xi) d\xi; \quad \overline{f(\xi)} = \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) P(\xi) d\xi. \quad (2.1.15)$$

**Задача 2.1.** Докажите второе равенство (2.1.12) для вычисления дисперсии.

*Примечание:* это равенство справедливо для обоих типов случайных величин. Попробуйте доказать его в общем виде.



**Задача 2.2.** Выведите формулы для расчёта среднего значения и среднеквадратичного отклонения равномерно распределённой случайной величины:

- а) дискретной (1.4.24);
- б) непрерывной (1.4.29), (1.4.30).

#### **2.1.4. Статистические характеристики координат микрочастицы**

Координаты микрочастицы  $x, y, z$ , определяющие её положение в пространстве, являются непрерывными случайными величинами, совместное распределение которых описывается плотностью вероятности (2.1.4). Таким образом, зная волновую функцию микрочастицы, можно по формулам (2.1.15) подсчитать математическое ожидание (среднее значение) координат частицы в данный момент времени — например,

$$\bar{x}(t) = \int_{(\infty)} x |\psi(t, \mathbf{r})|^2 d^3 r, \quad (2.1.16)$$

или в общем случае, используя обозначения (2.1.11),

$$\bar{x}_\alpha(t) = \int_{(\infty)} x_\alpha |\psi(t, \mathbf{r})|^2 d^3 r; \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (2.1.17)$$

Зная волновую функцию, можно также, например, вычислить среднеквадратичное отклонение положения микрочастицы от его среднего значения (математического ожидания). Для этого, используя (2.1.15), вначале надо вычислить среднее значение квадрата координаты

$$\overline{x_{\alpha}^2}(t) = \int_{(\infty)} x_{\alpha}^2 |\psi(t, \mathbf{r})|^2 d^3 r; \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (2.1.18)$$

а затем подставить (2.1.18) в соотношения (2.1.12), (2.1.13):

$$\Delta x_{\alpha rms}(t) = \sqrt{x_{\alpha}^2(t) - \bar{x}_{\alpha}^2(t)}; \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (2.1.19)$$

Среднеквадратичное отклонение координаты (2.1.19) обычно используют как значение *неопределённости* координаты микрочастицы — см. п/п. 1.4.3.

Зависимости средних значений координат частицы от времени (2.1.17) в определённых случаях образуют некоторую непрерывную пространственную кривую, «похожую» на траекторию классической частицы. Можно ожидать, что если неопределённости координат (2.1.19) достаточно малы по сравнению с характерным геометрическим масштабом задачи — см. п/п. 1.1.4, (1.4.18), то кривая (2.1.17) с приемлемой точностью совпадёт с классической траекторией рассматриваемого микрообъекта.

Однако оговорки вроде «похожая» и «можно ожидать» в тексте предыдущего абзаца не случайны. В частности, как мы увидим

далее, производная по времени от среднего значения координаты (2.1.17) вовсе не равна средней скорости частицы. Кроме того, скоро мы убедимся, что если микросистема находится в каком-либо из *стационарных состояний*, существование которых предсказал Бор (см. п/п. 1.1.4), то средние значения координат и других динамических переменных вообще не зависят от времени. Поэтому величины типа (2.1.17) никогда, даже в классическом пределе (1.4.18), не опишут орбитальное движение электрона вокруг ядра атома.

### **Вопросы для самопроверки**

2.1.1. Можно ли нарисовать волновую функцию микрочастицы?

2.1.2. Можно ли рассматривать геометрическое место точек максимума квадрата модуля волновой функции траекторией микрочастицы?

2.1.3. Решите *Задачу 2.1*.

2.1.4. Решите *Задачу 2.2*.

2.1.5. Как, зная волновую функцию микрочастицы, вычислить неопределённость её положения в пространстве?

## 2.2. Вычисление волновой функции

### 2.2.1. Волновое уравнение

Волновое уравнение, предложенное Шрёдингером для вычисления волновой функции микрочастицы  $\psi(t, x, y, z) \equiv \psi(t, \mathbf{r})$ , представляет собой линейное однородное дифференциальное уравнение с частными производными первого порядка по времени и второго — по координатам, т.е. параболического типа:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \Phi(t, \mathbf{r}) \psi. \quad (2.2.1)$$

В (2.2.1)  $i$  — мнимая единица;  $\hbar$  — «новая» постоянная Планка (1.4.4);

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.2.2)$$

— стандартное обозначение оператора Лапласа;  $m$  — масса микрочастицы;  $\Phi(t, \mathbf{r})$  — её потенциальная энергия в поле внешней силы (см. п/п. 1.2.3).

Возникает естественный вопрос: откуда взялось волновое уравнение (2.2.1)? Мог ли, например, Шрёдингер его вывести из каких-то более фундаментальных физических соотношений?

Разумеется, не мог! В тот момент, когда Шрёдингер сочинял обсуждаемое уравнение, в качестве наиболее фундаментальных принципов физике были известны лишь соотношения классической механики и электродинамики. Но ведь, как мы знаем, они не способны описывать микроявления — а уравнение (2.2.1) именно для этого и предназначено.

Несмотря на это очевидное обстоятельство, во многих учебниках квантовой механики воспроизводятся рассуждения, которые как бы «обосновывают» форму уравнения Шрёдингера (2.2.1). С этой целью в соответствие левой части уравнения Шрёдингера ставится энергия движущейся материальной точки, а двум слагаемым правой части — кинетическая и потенциальная энергия этого объекта. Таким образом, вид квантового уравнения пытаются интерпретировать, основываясь на соотношении (1.2.5), заимствованном из классической механики (см. п. 1.2). У неискущённого читателя может сложиться впечатление, что ему предлагают вывод уравнения Шрёдингера из классической механики. На самом деле это не вывод, а лишь наводящие соображения, которыми Шрёдингер, возможно, пользовался, придумывая вид совершенно нового уравнения.

Новые научные результаты получают двумя разными способами. Один способ — это логические рассуждения, в основе которых лежат известные научные положения. Второй способ, благодаря которому открывают новые научные положения, т.е. совершают научные открытия, известен под названием «озарение» или «инсайт».

Озарение — это мгновенный творческий (или, как сейчас любят говорить, «креативный») акт, которым всегда завершается процесс длительных мучительных раздумий учёного в поисках решения ответа на вопрос, который человечеству неизвестен. Все знают легенду о том, как И. Ньютон открыл закон всемирного тяготения (см. п/пп. 1.3.2 – 1.3.4): это случилось в тот момент, когда ему, сидевшему в саду и погруженному в размышления, на голову упало яблоко. Известно также, что Д.И. Менделеев увидел свою периодическую систему элементов во сне, а Архимед открыл свой закон и воскликнул «Эврика!», когда из заполненной до краёв ванны, куда он погрузился, на пол вылилась вода. Всё это были настоящие открытия, а вовсе не выводы, к которым упомянутые учёные пришли в результате логических рассуждений. (Заметим, кстати, что великие произведения искусства также являются плодами творческих озарений: не случайно многие поэты, музыканты и художники говорят, что их рукой водил Бог!)

Конечно, Шрёдингер записал своё уравнение в момент озарения, после множества попыток «уложить» все известные факты «из жизни» микрочастиц в одну математическую модель. Уравнение Шрёдингера (2.2.1), без всяких сомнений — результат научного открытия, и притом крупнейшего в науке XX века, а вовсе не плод логического вывода из известных постулатов.

Уравнение (2.2.1) не учитывает релятивистских эффектов, т.е. пригодно только для описания состояний микрочастиц, скорость которых мала по сравнению со скоростью света. Поэтому использование в рассматриваемом уравнении потенциальной

энергии частицы, находящейся в поле внешней силы (1.2.3), не является ограничением: непотенциальная сила Лоренца (1.2.4), возникающая при движении заряженной микрочастицы в магнитном поле, является релятивистским эффектом, учёт которого не входит в «область компетенции» нерелятивистского уравнения Шрёдингера (2.2.1).

Трудно сказать, почему уравнение (2.2.1) называют волновым: на самом деле распространение волн (электромагнитных, звуковых и т.д.) описывают дифференциальные уравнения с частными производными второго порядка по времени и координатам, т.е. гиперболического типа. В простейшем случае такое уравнение относительно какой-нибудь полевой переменной  $\varphi(t, \mathbf{r})$  имеет вид

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = c^2 \Delta \varphi, \quad (2.2.3)$$

где  $c$  — скорость распространения волны. Уравнение же (2.2.1) скорее является «родственником» параболических уравнений диффузии или теплопроводности — с той разницей, что последние действительны, а в уравнение (2.2.1) входит мнимая единица  $i$ , следовательно, его решения обязательно комплексны.

Обсуждение вопроса об «условиях однозначности» решения уравнения Шрёдингера (2.2.1), т.е. о начальных и граничных условиях, которые следует наложить на функцию  $\psi(t, \mathbf{r})$  — частное решение этого уравнения — мы отложим до решения конкретных задач.

### 2.2.2. Волновая функция системы нескольких частиц

Если микросистема состоит из  $N$  микрочастиц, то её состояния описывается волновой функцией  $\psi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ , зависящей от времени и  $3N$  пространственных координат  $\mathbf{r}_i(x_i, y_i, z_i)$ ;  $1 \leq i \leq N$ . Квадрат модуля этой волновой функции, аналогично случаю одной частицы (2.1.4), равен плотности вероятности того, что координаты рассматриваемых  $N$  частиц равны соответственно  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ :

$$P(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = |\psi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2. \quad (2.2.4)$$

Если микрочастицы, входящие в микросистему, *различны*, то их можно перенумеровать, т.е. присвоить каждой из них свой номер (или, если угодно, индивидуальное имя). Однако было бы ошибкой полагать, что нумерованными аргументами волновой функции или плотности вероятностей системы частиц (2.2.4) являются координаты частиц. К сожалению, такое утверждение (которое, надо полагать, является следствием не ошибки, а небрежности авторов) можно часто встретить в литературе по квантовой механике.

На самом деле координаты микрочастицы являются случайными величинами, и их значения никогда не фигурируют сами по себе в соотношениях квантовой механики. Для одной микрочастицы на это уже обращалось внимание в п. 2.1.1 — см.



замечание перед формулой (2.1.1). В этом случае аргументами волновой функции являются пространственные координаты, как у любой другой полевой функции — например, проекции вектора напряжённости электрического поля  $E_x(t, x, y, z) \equiv E_x(t, \mathbf{r})$  или температуры в термически неоднородной системе  $T(t, x, y, z)$ . Никому же не придёт в голову, что аргументом функции, описывающей температурное поле, является координата температуры! А пространственных аргументов такой функции три, потому что пространство, в котором она задана, трёхмерно.

Волновая функция и плотность вероятности системы  $N$  частиц (2.2.4) заданы не в трёхмерном, а в  $3N$ –мерном пространстве. Поэтому аргументами рассматриваемых функций являются  $3N$  координат этого пространства  $\mathbf{r}_i(x_i, y_i, z_i)$ ;  $1 \leq i \leq N$ , а вовсе не частиц.

$3N$ –мерная функция  $P(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ , в частности, есть плотность вероятности того, что данная система частиц в момент  $t$  находится в точке  $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}$   $3N$ –мерного пространства — или, что то же самое, что координаты рассматриваемых  $N$  частиц равны соответственно  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ . Это и написано в тексте перед формулой (2.2.4).

Теперь рассмотрим случай, когда частицы, к которым относится формула (2.2.4), *одинаковы*. Заметим, что *классические* объекты, даже если они одинаковы, всегда *различимы* и могут быть перенумерованы. Известный всем пример — бильiardные шары.

Одинаковые квантовые объекты, по крайней мере в пределах одной микросистемы, напротив, принципиально *неразличимы* (*тождественны*), т.е. не имеют никаких индивидуальных признаков, и их невозможно перенумеровать. Например, электроны, входящие в состав многоэлектронного атома, могут, говоря классическим языком, находиться на разных «орбитах» (или, выражаясь более современно, принадлежать разным электронным оболочкам, занимать разные электронные состояния). Однако описание такой системы не может содержать информацию о том, какой именно из электронов находится в том или ином состоянии. Такая информация принципиально недоступна, и попытка игнорировать это обстоятельство приведёт к неадекватному описанию поведения системы тождественных частиц.

Поэтому тем более нельзя относить пространственные аргументы функций (2.2.4) к тождественным частицам, из которых состоит микросистема.

Читатели, интересующиеся квантовой механикой, могли «слышать», что волновая функция системы тождественных частиц должна обладать определённой симметрией по отношению к «перестановкам» этих частиц. Но это утверждение не имеет никакого отношения к поведению волновой функции (2.2.4) по отношению к перестановкам её аргументов. Функции  $\psi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  и  $\psi(t, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  являются просто *разными*, как, например,  $z^{(1)}(x, y) = x^y$  и  $z^{(2)}(x, y) = y^x$ .

Квантовая теория систем тождественных частиц, разработанная В. Паули, Э. Ферми, П.А.М. Дираком и др., обязательно использует понятие *спина*, т.е. четвёртой степени свободы микрочастиц, не имеющей никакого аналога в классической физике. То, что было сказано выше о перестановочной симметрии волновой функции системы тождественных частиц, относится к так называемой «полной» волновой функции, зависящей, помимо пространственных координат, ещё и от спиновых переменных. Такая волновая функция симметрична (статистика Бозе – Эйнштейна) или антисимметрична (статистика Ферми – Дирака) относительно перестановки аргументов, каждый из которых включает три пространственные координаты и одну спиновую. Более подробно этот вопрос в данном курсе не изучается.

### 2.2.3. Волновое уравнение системы нескольких частиц

Уравнение Шрёдингера для системы  $N$  частиц имеет вид, который является очевидным обобщением формулы (2.2.1):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \Delta_i \psi + \Phi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \psi. \quad (2.2.5)$$

В уравнении (2.2.5), аналогично (2.2.2),

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \quad (2.2.6)$$

Потенциальная энергия системы частиц, фигурирующая в (2.2.5), в общем случае складывается из потенциальной энергии отдельных частиц в поле *внешних сил*, которая зависит от их положений в пространстве по отношению к источнику поля,

$$\Phi^{(e)}(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N \Phi_i^{(e)}(t, \mathbf{r}_i) \quad (2.2.7)$$

( $e$  — external, внешний), и потенциальной энергии *сил взаимодействия частиц* друг с другом, которая определяется их взаимным расположением:

$$\Phi^{(i)}(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \Phi^{(i)}(t, r_{12}, r_{13}, \dots, r_{N-1,N}) \quad (2.2.8)$$

( $i$  — internal, внутренний), где

$$r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| \equiv |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i| \quad (2.2.9)$$

— расстояние между  $i$  – й и  $j$  – й частицами.

Таким образом,

$$\Phi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \Phi^{(e)} + \Phi^{(i)}. \quad (2.2.10)$$

## 2.2.4. Волновая функция и волновое уравнение частицы с одной степенью свободы

Иногда при решении квантовомеханических задач возникают «подзадачи», в которых приходится описывать микрочастицу обладающую одной степенью свободы. Ей может соответствовать одна из декартовых координат — например,  $x$ , или какая-либо *обобщённая координата* — например, расстояние микрочастицы до точечного источника силового поля (центрального поля)  $r$ .

Кроме того, модельные одномерные задачи обычно рассматривают в процессе обучения квантовой механике: их решения сравнительно легко анализировать, многие одномерные задачи решаются аналитически. Вместе с тем многие особенности таких решений сохраняются и в «сходных» многомерных задачах, решить которые аналитически невозможно.

Не «привязываясь» к какому-то конкретному случаю, обозначим пространственную координату  $\xi$ . От неё и будет зависеть волновая функция  $\psi(t, \xi)$ .

Квадрат модуля этой волновой функции равен плотности вероятности того, что координата частицы равна  $\xi$ :

$$P(t, \xi) = |\psi(t, \xi)|^2. \quad (2.2.11)$$

Соответствующее уравнение Шрёдингера аналогично (2.2.1), но имеет намного более простой вид:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + \Phi(t, \xi) \psi. \quad (2.2.12)$$

### 2.2.5. Уравнение Шрёдингера в операторном виде

Попытаемся записать уравнение Шрёдингера для всех возможных случаев в некотором общем виде.

Обозначим  $q_1, q_2, \dots, q_f$  пространственные переменные, задание которых однозначно определяет *конфигурацию* механической системы, т.е. её положение в пространстве и взаимное расположение частей системы. Величина  $f$  называется *числом степеней свободы* системы. Совокупность указанных переменных для краткости формально будем обозначать  $q^f$ .

Для одной частицы такими пространственными переменными служат, например, три декартовых координаты. Если по какой-то причине удобно описывать положение частицы не в декартовой, а в сферической системе координат, то такими переменными будут радиальная и две угловые координаты  $r, \vartheta, \varphi$ . В цилиндрической, эллиптической и прочих системах координат рассматриваемых переменных также три, потому что у материальной точки в классической механике три степени свободы,  $f=3$ .

Для системы, состоящей из  $N$  частиц,  $f=3N$ . Для системы, описанной в п/п. 2.2.4, очевидно,  $f=1$ .

В общем случае волновую функцию, описывающую состояние микросистемы с  $f$  степенями свободы, будем обозначать

$$\psi(t, q_1, q_2, \dots, q_f) \equiv \psi(t, q^f).$$

Заметим теперь, что во всех трёх рассмотренных выше частных случаях (2.2.1), (2.2.5), (2.2.12) левая часть уравнения Шрёдингера выглядит совершенно одинаково: это — частная производная по времени от волновой функции, умноженная на универсальную константу.

Нетрудно также обнаружить сходство и в правых частях обсуждаемых соотношений. Каждая из них представляет собой сумму двух членов. Первый есть сумма вторых производных волновой функции по каждой из пространственных координат, помноженных на константы. Второй — произведение волновой функции и некоторой заданной функции времени и координат — потенциальной энергии микросистемы. Иначе говоря, правая часть уравнения Шрёдингера представляет собой результат определённого преобразования волновой функции  $\psi(t, q^f)$  с помощью операций дифференцирования и алгебраических операций. В результате получается новая функция тех же аргументов  $\varphi(t, q^f)$ .

Кратко символически запишем рассмотренную операцию так:

$$\hat{H} \psi(t, q^f) = \varphi(t, q^f). \quad (2.2.13)$$

Символом  $\hat{H}$  в (2.2.13) обозначена не величина, а описанная выше *операция* преобразования математического объекта, обозначение которого расположено непосредственно справа от символа операции.

В математике принято описывать равенство (2.2.13) в следующих терминах: *оператор  $\hat{H}$  воздействует* на функцию  $\psi$ , и в результате этого воздействия получается другая функция  $\varphi$ .

*Оператор — это правило или способ преобразования математического объекта определённого класса в другой объект, вообще говоря, того же класса.* Условимся, например, говорить, что вычисление производной от функции по некоторой переменной выполняет *оператор дифференцирования*:

$$\hat{D}_x y(x) \equiv \frac{d}{dx} y(x) \equiv \frac{dy}{dx} \equiv y'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x}. \quad (2.2.14)$$

В левой части (2.2.14) приведены различные используемые в математике обозначения оператора дифференцирования, а в правой части описана сама операция. В результате этой операции получается новая функция  $z(x)$  — производная от исходной функции  $y(x)$ :

$$\hat{D}_x y(x) = z(x). \quad (2.2.15)$$



Можно придумать множество других операторов, осуществляющих те или иные преобразования с функциями: возведения в квадрат, логарифмирования, извлечения корня. Существуют интегральные операторы, в результате которых от функции вычисляется некоторый определённый интеграл, зависящий от параметра, и в результате опять-таки получается новая функция — и т.д.

Дадим определение ещё одного важного, хотя и тривиального оператора. *Единичным* называется оператор, результатом воздействия которого на любую функцию является та же самая функция:

$$\hat{1} \psi = \psi. \quad (2.2.16)$$

С учётом сказанного, используя формулу (2.2.13), мы можем записать любое уравнение Шрёдингера в операторном виде:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi. \quad (2.2.17)$$

Вид оператора  $\hat{H}$  в (2.2.17) определяется свойствами конкретной микросистемы: с учётом (2.2.16) для одной микрочастицы в трёхмерном пространстве (2.2.1) запишем

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \Phi(t, \mathbf{r}) \hat{1}; \quad (2.2.18)$$

для  $N$  частиц (2.2.5)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \Delta_i + \Phi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \hat{1}; \quad (2.2.19)$$

для частицы в одномерном пространстве (2.2.12)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \Phi(t, \xi) \hat{1}. \quad (2.2.20)$$

В квантовой механике оператор  $\hat{H}$  играет очень важную роль. Его принято называть «*оператор Гамильтона*», хотя, возможно, более подходящим было бы название «оператор энергии».

Обратим внимание на то, что оператор Гамильтона (2.2.18) – (2.2.20) — *линейный*. Поясним, что означает это свойство операторов.

Пусть функция  $\psi$ , на которую воздействует некоторый оператор  $\hat{F}$ , является линейной комбинацией некоторых других функций, на которые он тоже может воздействовать: например,

$$\psi = C_1 \psi_1 + C_2 \psi_2,$$

где  $C_1$  и  $C_2$  — константы. Тогда, если оператор — линейный, справедливо следующее равенство:

$$\hat{F} \psi = \hat{F} (C_1 \psi_1 + C_2 \psi_2) = C_1 \hat{F} \psi_1 + C_2 \hat{F} \psi_2. \quad (2.2.21)$$

Оператор дифференцирования (2.2.14), очевидно, линейный. А вот операторы возведения в квадрат или логарифмирования — нелинейные.

Единичный оператор (2.2.16) также, разумеется, линеен.

Для дальнейшего удобства запишем оператор Гамильтона в виде двух слагаемых:

$$\hat{H} = \hat{K} + \Phi(t, q^f) \hat{1}. \quad (2.2.22)$$

Оператор  $\hat{K}$ , очевидно, соответствует первым, дифференциальным членам в правых частях операторных равенств (2.2.18) – (2.2.20), и является линейным.

Как видно из (2.2.18) – (2.2.22), оператор Гамильтона — действительно линейный. Поэтому и само уравнение Шрёдингера (2.2.17) является линейным дифференциальным уравнением.

## 2.2.6. Общие требования к решениям уравнения Шрёдингера

Квадрат модуля волновой функции  $\psi(t, q_1, q_2, \dots, q_f) \equiv \psi(t, q^f)$ , являющейся решением уравнения Шрёдингера, является плотностью вероятности конфигурации микросистемы,

$$P(t, q^f) = |\psi(t, q^f)|^2, \quad (2.2.23)$$

Плотность вероятности (2.2.24) в соответствии со своим вероятностным смыслом (см. п/пп. 1.1.4 и 2.1.2) должна быть *конечной, непрерывной и однозначной* функцией координат микросистемы  $q_1, q_2, \dots, q_f$ .

В самом деле: плотность вероятности  $P(\mathbf{r})$  может быть *бесконечной* в точке  $\mathbf{r}_0$  пространства только при условии, что микрочастица *навверняка* находится в этой точке пространства. В данном случае координаты микрочастицы не являются случайными величинами, а плотность вероятности того, что частица находится в любой другой точке пространства, равна нулю:  $P(\mathbf{r} \neq \mathbf{r}_0) = 0$ . (Подробнее этот случай будет рассмотрен дальше). Если же координата — случайная величина, то, очевидно,  $P(\mathbf{r}) < \infty$ .

Бессмысленной с точки зрения теории вероятностей является ситуация, когда для некоторого значения случайной величины — например, координат микрочастицы  $\mathbf{r}_0$  — плотность вероятности  $P(\mathbf{r}_0)$  может принимать два или более разных значений. Поэтому плотность вероятности  $P(\mathbf{r})$  должна быть однозначной функцией координат.

По аналогичной причине функция  $P(\mathbf{r})$  ни в какой точке пространства  $\mathbf{r}_0$  не может претерпевать разрыва, т.к. в противном случае вероятность обнаружить микрочастицу в окрестности точки

$r_0$  зависела бы от того, по какому пути (справа, слева, сверху, снизу и т.п.) мы приблизимся к этой точке.

То же самое относится и к зависимости плотности вероятности сколь угодно сложной микросистемы от координат  $q_1, q_2, \dots, q_f$ , определяющих её конфигурацию (2.2.23).

Но из (2.2.23) очевидно, что тем же требованиям удовлетворяет и сама волновая функция  $\psi(t, q^f)$ : она должна быть *конечной, непрерывной и однозначной* функцией координат микросистемы  $q_1, q_2, \dots, q_f$ .

Поэтому любые решения уравнения Шрёдингера, не удовлетворяющие сформулированным условиям, должны быть отброшены как бессмысленные, т.е. не соответствующие никаким реальным физическим состояниям микросистем.

В большинстве случаев волновая функция  $\psi(t, q^f)$  является также *непрерывно дифференцируемой* функцией координат  $q_1, q_2, \dots, q_f$ , т.е. производные  $\partial\psi/\partial q_i$  существуют и являются непрерывными функциями координат. Исключением служат лишь такие точки или поверхности, на которых потенциальная энергия системы  $\Phi(q^f)$  претерпевает *бесконечный скачок*.

## **Вопросы для самопроверки**

2.2.1. Чем отличается уравнение Шрёдингера для одной микрочастицы от волнового уравнения?

2.2.2. Что описывает волновая функция системы, состоящей из нескольких микрочастиц?

2.2.3. Почему в общем случае нельзя решить уравнение Шрёдингера системы, состоящей из нескольких микрочастиц, методом разделения переменных — координат разных микрочастиц? А в каком частном случае это можно сделать?

2.2.4. Запишите оператор Гамильтона для атома водорода, состоящего из положительно заряженного ядра и отрицательно заряженного электрона, которые взаимодействуют по закону Кулона.

2.2.5. Объясните, почему решение уравнения Шрёдингера, которое не является конечной, непрерывной и однозначной функцией пространственных координат, не может являться волновой функцией.

## **2.3. Замкнутая микросистема**

### **2.3.1. Решение уравнения Шрёдингера методом разделения переменных**

Нашей ближайшей задачей является решение волнового уравнения Шрёдингера (2.2.18) для некоторых простейших микросистем, вычисление волновой функции, анализ на этой основе поведения рассматриваемых микросистем и его сравнение с тем, что наблюдается в действительности.

Заметим, что поскольку уравнение Шрёдингера *однородно*, то одно решение этого уравнения известно заранее: это

$$\psi(t, q^f) \equiv 0. \quad (2.3.1)$$

Решение (2.3.1) называется *тривиальным*. При этом плотность вероятности реализации любой конфигурации микросистемы тоже тождественно равна нулю:

$$P(t, q^f) \equiv 0. \quad (2.3.2)$$

А (2.3.2) значит, что состояние микросистемы, соответствующее тривиальному решению уравнения Шрёдингера, *невозможно* или, по крайней мере, *невероятно*, т.е. не реализуется. Поэтому нас всегда интересуют *только нетривиальные решения* уравнения Шрёдингера.

Следует, однако, заметить, что даже в простейшем случае микрочастицы с одной степенью свободы (2.2.21) решить «в лоб» дифференциальное уравнение с частными производными (2.2.13), содержащее две независимые переменные, не удастся. Тем более это проблематично в более сложных случаях (2.2.1), (2.2.19) и (2.2.6), (2.2.20), когда независимых переменных ещё больше.

Возникает вопрос: нельзя ли упростить эту сложную задачу, сведя её к решению пусть нескольких дифференциальных уравнений — но обыкновенных, чтобы каждое из них содержало только одну переменную? Ведь способы исследования и решения

обыкновенных дифференциальных уравнений разработаны гораздо лучше, чем уравнений с частными производными!

Для реализации этой идеи в математической физике используют *метод разделения переменных*. Заранее, однако, следует сказать, что если бы названный метод всегда достигал поставленной цели, значительная часть науки под названием «Методы математической физики» оказалась бы просто бесполезной игрой ума.

Итак, попробуем для начала разделить в уравнении (2.2.18) время и координаты. С этой целью будем искать решение этого уравнения — волновую функцию — в виде произведения двух функций, одна из которых зависит только от времени, а другая — только от пространственных координат [см. п/п. 2.2.5]:

$$\psi(t, q^f) = \Theta(t)u(q^f). \quad (2.3.3)$$

Теперь попытаемся найти уравнения относительно функций  $\Theta(t)$  и  $u(q^f)$ . Для этого подставим правую часть (2.3.3) вместо волновой функции  $\psi$  в уравнение (2.2.18):

$$i\hbar \frac{\partial(\Theta u)}{\partial t} = \hat{H}(\Theta u), \quad (2.3.4)$$

или, с учётом (2.2.23) и (2.2.17),



$$i\hbar \frac{\partial(\Theta u)}{\partial t} = \hat{K}(\Theta u) + \Phi(t, q^f) \Theta u. \quad (2.3.5)$$

Множитель  $u(q^f)$ , зависящий от координат и не зависящий от времени, вынесем за знак оператора дифференцирования по времени в левой части (2.3.5). Точно так же множитель  $\Theta(t)$ , зависящий от времени и не зависящий от координат, вынесем за знак оператора  $\hat{K}$ , который выполняет дифференцирование по координатам. В результате из (2.3.5) получим:

$$u i\hbar \frac{d\Theta}{dt} = \Theta \hat{K} u + \Phi(t, q^f) \Theta u. \quad (2.3.6)$$

Наконец, разделим обе части равенства (2.3.6) на произведение  $\Theta u$ . Чтобы в дальнейшем из-за этого шага не возникли несообразности в результатах, указанное произведение, а следовательно, и каждый из его сомножителей, не должны обращаться в нуль. Поскольку мы отыскиваем нетривиальное решение, ни один из них, во всяком случае, не должен быть равен нулю тождественно. Итак, из (2.3.6) получим:

$$i\hbar \frac{1}{\Theta} \frac{d\Theta}{dt} = \frac{1}{u} \hat{K} u + \Phi(t, q^f). \quad (2.3.7)$$

Проведенные преобразования решаемого дифференциального уравнения с частными производными стандартны для метода разделения переменных. Однако пока переменные не разделяются!

А теперь рассмотрим случай, когда потенциальная энергия микросистемы  $\Phi(t, q^f)$  явно не зависит от времени, т.е.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0. \quad (2.3.8)$$

Иначе говоря, потенциальная энергия зависит только от пространственных координат:

$$\Phi = \Phi(q^f). \quad (2.3.9)$$

С учётом (2.3.8), (2.3.9) в уравнении (2.3.7) произойдёт небольшое, но очень важное изменение:

$$i\hbar \frac{1}{\Theta} \frac{d\Theta}{dt} = \frac{1}{u} \hat{K} u + \Phi(q^f). \quad (2.3.10)$$

Теперь в уравнении (2.3.10) левая часть зависит только от времени, а правая — только от пространственных координат. Поскольку время и координаты — *независимые переменные*, от которых зависит волновая функция (см. п/п. 2.1.1), а равенство (2.3.10) должно выполняться *при любых значениях* этих переменных, то обе части рассматриваемого равенства порознь

равны одной и той же константе, не зависящей ни от времени, ни от координат:

$$i\hbar \frac{1}{\Theta} \frac{d\Theta}{dt} = C; \quad \frac{1}{u} \hat{K} u + \Phi(q^f) = C. \quad (2.3.11)$$

В самом деле: допустим, равенство (2.3.10) выполняется при некоторых значениях времени и координат. Изменим любую из этих переменных. Если соотношения (2.3.11) не выполняются, т.е. левая часть (2.3.10) меняется при изменении времени, а правая — при изменении любой координаты, то равенство (2.3.10) будет нарушено. Следовательно, соотношения (2.3.11) действительно должны выполняться.

Но каждое из равенств (2.3.11) представляет собой новое дифференциальное уравнение. Первое — это обыкновенное дифференциальное уравнение относительно функции  $\Theta(t)$ :

$$\frac{d\Theta}{dt} = \frac{C}{i\hbar} \Theta. \quad (2.3.12)$$

Второе — дифференциальное уравнение относительно функции  $u(q^f)$ :

$$\hat{K} u + \Phi(q^f) u = C u \quad (2.3.13)$$

или, с учётом (2.2.23),

$$\hat{H} u = C u. \quad (2.3.14)$$

Характер дифференциального уравнения (2.3.13), (2.3.14) зависит от количества пространственных переменных, т.е. от числа степеней свободы микросистемы. Если  $f = 1$ , то (2.3.14) — обыкновенное дифференциальное уравнение; если же  $f > 1$ , то (2.3.14) — дифференциальное уравнение с частными производными.

Остаётся выяснить смысл и величину константы разделения  $C$ .

Заметим теперь, что в классической механике условие (2.3.8), (2.3.9) [см. такое же равенство (1.2.8) в п/п. 1.2.5] свидетельствует о том, что механическая система *замкнута* или *изолирована*, и влечёт за собой *сохранение энергии*  $E$  механической системы (1.2.9), которая, как принято говорить, является *интегралом движения*:

$$E = \text{const} \quad (2.3.15)$$

Но из объяснения, данного в п/п. 1.2.5 после равенства (1.2.9), очевидно, что при выполнении условия (2.3.8), (2.3.9) замкнутой окажется любая физическая система — в том числе и микросистема, описываемая не классической, а квантовой механикой. А следовательно, у такой системы должна сохраняться энергия (2.3.15).

Константа  $C$  не зависит ни от времени, ни от координат системы и также, очевидно, представляет собой «интеграл

движения», причём это является прямым следствием условия замкнутости рассматриваемой микросистемы (2.3.8), (2.3.9). К тому же эта константа, как видно из равенств (2.3.11), имеет размерность энергии. Отсюда следует естественный вывод, что константа  $C$  и есть энергия замкнутой микросистемы (2.3.15):

$$C = E. \quad (2.3.16)$$

С учётом (2.3.16) уравнение относительно «временной» части волновой функции  $\Theta(t)$  рассматриваемой микросистемы (2.3.12) примет вид

$$\frac{d\Theta}{dt} = \frac{E}{i\hbar} \Theta. \quad (2.3.17)$$

Его общее решение:

$$\Theta(t) = A \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right), \quad (2.3.18)$$

где  $A$  — произвольная постоянная.

Уравнение относительно «пространственной» части волновой функции  $u(q^f)$  рассматриваемой микросистемы (2.3.14) с учётом (2.3.16) будет выглядеть следующим образом:

$$\hat{H} u = Eu. \quad (2.3.19)$$

Используя вместо (2.3.14) равенство (2.3.13), получим эквивалентное (2.3.19) уравнение

$$\hat{K}u + \Phi(q^f)u = Eu. \quad (2.3.20)$$

Линейное однородное дифференциальное уравнение (2.3.19), (2.3.20), разумеется, нельзя решить «в общем виде»: вид этого уравнения и характер его решений при прочих равных условиях целиком зависят от того, какова входящая в него функция  $\Phi(q^f)$ . Единственным очевидным решением однородного уравнения (2.3.19), (2.3.20) является *тривиальное решение*,  $u \equiv 0$ , но по уже обсуждавшимся выше причинам [см. п/п. 2.3.1, (2.3.1) и (2.3.2)] оно нас не устраивает.

Заметим в заключение, что если бы условие (2.3.8) не было выполнено, то и методом разделения переменных для решения уравнения Шрёдингера воспользоваться бы не удалось: см. замечание после соотношения (2.3.7).

### 2.3.2. Стационарные состояния

Итак, мы доказали, что волновая функция замкнутой микросистемы имеет вид (2.3.3)

$$\psi(t, q^f) = \Theta(t)u(q^f),$$

причём временной множитель определяется формулой (2.3.18), а пространственная часть — решением дифференциального уравнения (2.3.19), (2.3.20).

Дифференциальное уравнение (2.3.19), (2.3.20), определяющее пространственную часть волновой функции  $u(q^f)$  микросистемы, находящейся в стационарном состоянии, часто называют *стационарным уравнением Шрёдингера*.

Заметим, что, в отличие от «полного» уравнения Шрёдингера, стационарное уравнение Шрёдингера (2.3.19), (2.3.20) не содержит мнимой единицы. Поэтому его решения в зависимости от удобства можно представлять как в комплексной, так и в действительной форме.

Поскольку это уравнение однородно, то, если функция  $u(q^f)$  — его решение, то и функция  $Au(q^f)$ , где  $A$  — произвольная постоянная, тоже является его решением (если, разумеется, не заданы граничные условия, определяющие решение рассматриваемого однородного уравнения однозначно). В самом деле: если

$$\hat{H} u = Eu,$$

то

$$\hat{H} (Au) = A \hat{H} u = AEu = E(Au).$$

Поэтому переместим произвольный постоянный множитель  $A$  из (2.3.18) в функцию  $u(q^f)$  и запишем решение уравнения Шрёдингера для замкнутой системы (2.3.3), полученное методом разделения временной и пространственных переменных:

$$\psi(t, q^f) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)u(q^f). \quad (2.3.21)$$

Чтобы подсчитать плотность вероятности  $P(t, q^f)$  конфигурации системы  $q^f$ , вычислим квадрат модуля выражения (2.3.21). Поскольку, однако, квадрат модуля комплексной экспоненты (2.1.3) равен единице (2.1.7), то из (2.3.21) получим:

$$|\psi(t, q^f)|^2 = |u(q^f)|^2. \quad (2.3.22)$$

Из (2.3.22) следует, что распределение вероятностей конфигураций замкнутой системы не меняется с течением времени:

$$P(q^f) = |u(q^f)|^2; \quad \frac{\partial P}{\partial t} = 0. \quad (2.3.23)$$

Но (2.3.23) означает, что в рассматриваемой системе «наблюдаемые» величины, т.е. средние значения координат  $\bar{q}_i$  и



любых функций координат  $\overline{f(q_1, \dots, q_f)}$ , с течением времени также не изменяются, т.е. остаются постоянными. Следовательно, какие-либо «видимые» изменения параметров системы не происходят. Не изменяется, конечно, и энергия системы — ведь система замкнута!

Принято говорить, что микросистема, ведущая себя описанным образом, находится в *стационарном состоянии*. Впервые гипотезу о стационарных состояниях микросистем (атомов) предложил Н. Бор (см. п/п. 1.4.1), чтобы объяснить, почему электрон, движущийся с угловым ускорением вокруг атомного ядра, вопреки классической физике не излучает электромагнитное поле и не «теряет» энергию (см. п/п. 1.1.6, №7). Квантовомеханическое объяснение, вытекающее из независимости от времени энергии и распределения вероятностей конфигураций замкнутой микросистемы (2.3.23), состоит в том, что в такой системе, собственно говоря, и нет никакого движения. Это, конечно, непостижимо с точки зрения классической физики, но полностью соответствует наблюдаемым фактам.

### **2.3.3. Связанные состояния**

Рассмотрим классическую материальную точку, движущуюся во внешнем силовом поле, центр (источник) которого неподвижен. Пусть сила *притягивает* материальную точку к источнику поля. Тогда при подходящих начальных условиях такая «возвращающая» сила не позволит частице удалиться на слишком большое расстояние. В результате частица будет двигаться вокруг источника

поля по траектории — не обязательно замкнутой, но не выходящей за границы некоторой конечной области пространства. Такое движение в классической механике называется *финитным*, т.е. конечным [*finita* (лат.) — конец], или, точнее, ограниченным. Если траектория финитного движения к тому же замкнута, её называют *орбитой* частицы.

Пусть, далее, механическая система состоит из нескольких подсистем (например, материальных точек), и силы взаимодействия между ними стремятся не позволить подсистемам удалиться на слишком большое расстояние друг от друга (для этого подсистемы должны притягиваться либо друг к другу, либо к одной из подсистем, играющей роль центра сил). Тогда при подходящих начальных условиях *относительное движение* подсистем тоже окажется финитным. При этом система, оставаясь единым целым и обладая конечными размерами, может сама как целое двигаться в пространстве, также, возможно, совершая финитное движение.

Примеры финитного движения хорошо известны. Прежде всего в голову приходят примеры из области астрономии и космологии. Планеты в пределах планетной системы, притягиваясь по закону всемирного тяготения, совершают финитное движение вокруг центральной звезды, причём движутся по замкнутым (в системе координат, где центр покоится) орбитам. Планетная система как целое совершает финитное (тоже орбитальное) относительное движение вокруг центра своей галактики — и т.д.

Заметим, однако, что есть и менее экзотические примеры. Любой предмет, сохраняющий собственную форму, представляет

собой систему, подсистемы которого (атомы, молекулы, отдельные макроскопические части, скреплённые друг с другом) совершают финитное относительное движение. Это и земной шар, и катящийся по нему автомобиль, и мы сами, наблюдающие всё это и обсуждающие друг с другом свои мысли и впечатления.

Когда речь идёт о микросистемах (отдельных микрочастицах, атомах и т.п.), то пользоваться классическим термином «финитное движение» некорректно. В самом деле: например, никакого наблюдаемого относительного движения электронов и ядра в атоме нет — а то, что не наблюдается, не может служить предметом научного обсуждения.

Мы знаем, тем не менее, что микрочастицы, из которых состоит атом, находятся где-то в пределах занимаемого атомом объёма и никуда не «разбегаются». Мы понимаем также, что их удерживают от «разбегания» силы электростатического притяжения отрицательно заряженных электронов к положительно заряженному ядру (несмотря на то, что электроны отталкиваются друг от друга как одноимённо заряженные частицы).

Такое состояние микросистемы, когда составляющие её подсистемы (микрочастицы в атоме, атомы в молекуле, атомы и молекулы в кристалле) благодаря силам взаимодействия образуют единое целое, занимающее конечную по размерам область пространства, называется в квантовой механике *связанным*.

Очевидно, плотность вероятности конфигурации микросистемы, находящейся в связанном состоянии, должна либо быть равной нулю за границами этой области пространства, либо

быстро исчезать по мере того, как координаты подсистем (микрочастиц) выходят за её пределы. Так же, разумеется, должна вести себя и волновая функция, описывающая связанное состояние микросистемы.

Рассмотрим, например, для простоты микрочастицу, находящуюся в связанном состоянии с неподвижным источником поля силы. Зададим волновую функцию этой микрочастицы в декартовой системе координат, началом которого является источник поля. Тогда, очевидно,

$$\lim_{|x_\alpha| \rightarrow \infty} \psi(t, \mathbf{r}) = 0; \quad 1 \leq \alpha \leq 3, \quad (2.3.24)$$

[см. (2.1.10)], откуда с учётом (2.1.4)

$$\lim_{|x_\alpha| \rightarrow \infty} P(t, \mathbf{r}) = 0; \quad 1 \leq \alpha \leq 3. \quad (2.3.25)$$

Соотношения (2.3.24), (2.3.25), как указывалось в п/п. 2.1.2, являются необходимым условием существования нормировочного интеграла волновой функции микрочастицы (2.1.9). Достаточность при этом обеспечивается высокой скоростью достижения рассматриваемого предела. Поэтому нормировочный интеграл (2.1.9) существует только для связанных состояний микрочастицы. Если же состояние несвязанное, то условия (2.3.24), (2.3.25) не выполняются, нормировочный интеграл расходится, и волновую

функцию, описывающую такое состояние, нельзя нормировать на единицу. Поэтому квадрат модуля волновой функции (2.1.4), описывающей несвязанное состояние, не является нормированной плотностью вероятности.

То же самое относится и к микросистемам с числом степеней свободы, отличным от трёх.

#### 2.3.4. Стационарные связанные состояния

В качестве простейшего примера рассмотрим стационарные связанные состояния микрочастицы с одной степенью свободы, соответствующей декартовой координате  $x$  — см. п/п. 2.2.4. В этом случае «пространственную» часть волновой функции  $u(x)$  определяет стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H} u = Eu, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \Phi(x)\hat{1}, \quad (2.3.26)$$

или

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + \Phi(x)u = Eu. \quad (2.3.27)$$

Чтобы частица могла находиться в связанном состоянии с источником силового поля, возвращающая сила

$$F(x) = -\frac{d\Phi}{dx} \quad (2.3.28)$$

должна менять знак в точке равновесия (equilibrium) частицы  $x = x_e$ , а потенциальная энергия частицы  $\Phi(x)$  — обладать в этой точке минимумом:

$$\left. \frac{d\Phi}{dx} \right|_{x=x_e} = 0; \quad \left. \frac{d^2\Phi}{dx^2} \right|_{x=x_e} = k_e > 0; \quad \Phi(x_e) = \Phi_e. \quad (2.3.29)$$

Потенциальную энергию описанного вида часто называют «потенциальной ямой».

Простейшим примером «потенциальной ямы» может служить потенциал линейной (упругой) возвращающей силы, пропорциональной смещению частицы из положения равновесия:

$$F(x) = -k_e(x - x_e); \quad \Phi(x) = \Phi_e + \frac{1}{2}k_e(x - x_e)^2. \quad (2.3.30)$$

Величина  $k_e$  называется упругой постоянной. Значение константы  $\Phi_e$ , разумеется, можно выбрать произвольно.

В этом и других аналогичных случаях, когда в поле силы  $\Phi(x)$  образуются связанные состояния микрочастицы, пространственная часть её волновой функции  $u(x)$  при  $x \rightarrow \pm\infty$  должна вести себя аналогично (2.3.24):

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x) = 0. \quad (2.3.31)$$

Но два предельных значения функции  $u(x)$  (2.3.31)

$$u(-\infty) = 0; \quad u(+\infty) = 0 \quad (2.3.32)$$

можно рассматривать как *краевые условия* решения дифференциального уравнения (2.3.27) [если решать его не как задачу Коши (с начальными условиями в одной точке), а как задачу Дирихле (с условиями в двух граничных точках)]. Важно, что «нулевые» краевые условия (2.3.32) допускают *тривиальное* решение однородного уравнения (2.3.27)  $u(x) \equiv 0$ .

Решение линейного однородного обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с «нулевыми» краевыми условиями вида (2.3.26) известно в математической физике под названием задачи Штурма – Лиувилля.

Характерной особенностью этой задачи является наличие в уравнении параметра, значение которого можно задать произвольно: в данном случае (2.3.26) таким параметром служит энергия микрочастицы  $E$ . При этом *нетривиальное решение* задачи существует только при некоторых отдельных значениях параметра, которые называются *собственными значениями* дифференциального оператора  $\hat{H}$  (2.3.26). Собственные значения

образуют *счётное множество* или *дискретный спектр*, т.е. могут быть перенумерованы целым числом:

$$E = E_n; \quad 1 \leq n \leq n_{\max}. \quad (2.3.33)$$

Это множество в зависимости от вида оператора  $\hat{H}$  может содержать конечное, бесконечное число элементов или быть пустым, т.е. не содержать ни одного элемента.

Каждому собственному значению  $E_n$ , таким образом, «принадлежит» *собственная функция*  $u_n(x)$ , которая является одним из нетривиальных решений уравнения (2.3.26). Собственные функции удовлетворяют «нулевым» краевым условиям (2.3.31), (2.3.32) и также образуют счётное множество.

Любую собственную функцию вследствие (2.3.31) [см. также обсуждение соотношения (2.3.25)] можно нормировать на единицу, подобрав соответствующий нормировочный множитель  $A$  — см. обсуждение в п/п. 2.3.2, — так что будет выполняться нормировочное соотношение

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u_n(x)|^2 dx = 1. \quad (2.3.34)$$

Поэтому функция

$$P_n(x) = |u_n(x)|^2 \quad (2.3.35)$$



может рассматриваться как «полноценная», т.е. надлежащим образом нормированная, плотность вероятности того, что микрочастица находится в точке с координатой  $x$ .

Если значение параметра  $E$  не принадлежит к числу собственных значений (2.3.33), то ему соответствует тривиальное решение уравнения  $u(x) \equiv 0$ .

Аналогично ведут себя решения задач о стационарных связанных состояниях микросистем с любым числом степеней свободы.

Таким образом, квантовая механика подтверждает гипотезу Н. Бора (см. п/п. 1.4.1) о существовании стационарных состояний микросистемы (в частности, атома) и о том, что эти состояния образуют счётное множество, а значения энергии, соответствующей различным стационарным состояниям, образуют дискретный спектр (2.3.33). Иначе говоря, показано, что энергия таких систем «квантуется», т.е. изменяется скачками или порциями — квантами.

Поскольку стационарные состояния имеют место, когда микросистема замкнута (изолирована), то переход микросистемы из стационарного состояния под номером  $n$ , которое описывается волновой функцией (2.3.21)

$$\psi_n(t, q^f) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) u_n(q^f), \quad (2.3.36)$$

в другое стационарное состояние под номером  $m$ , которое описывается волновой функцией

$$\psi_m(t, q^f) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_m t\right) u_m(q^f),$$

может происходить только под действием внешнего поля — например, электромагнитного. В последнем случае:

- Если энергия микросистемы в результате этого перехода уменьшилась,  $\Delta E = E_m - E_n < 0$ , то высвободившаяся в результате такого перехода порция энергии микросистемы излучается в виде фотона, частота или длина волны которого определяется формулой Бора – Эйнштейна – Планка (см. п/п. 1.4.1)

$$\nu = \frac{|E_m - E_n|}{2\pi\hbar}; \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar c}{|E_m - E_n|}. \quad (2.3.37)$$

- Если, напротив, рассматриваемый переход был вызван тем, что микросистема поглотила из электромагнитного поля фотон с частотой или длиной волны (2.3.37), то энергия микросистемы в результате этого перехода возрастёт на величину  $\Delta E = E_m - E_n > 0$ .

В результате переходов, сопровождающихся излучением фотонов, между различными стационарными состояниями множества «возбуждённых» атомов или молекул, из которых

состоит нагретый газ, *спектр излучения* такого вещества оказывается *линейчатым*, т.е. состоящим из отдельных спектральных линий с длинами волн или частотами (2.3.37). Именно такая картина и наблюдается в спектроскопических экспериментах. Квантовая механика объясняет этот факт, необъяснимый с позиций классической физики (см. п/п. 1.1.6, №2), и позволяет правильно вычислить длины волн наблюдаемых спектральных линий.

Заметим, что если через холодный (самостоятельно не излучающий) газ, состоящий из атомов или молекул с энергетическим спектром (2.3.33), пропускать поток излучения внешнего источника с непрерывным спектром, который содержит электромагнитные волны с частотами (длинами волн) (2.3.37), то будет наблюдаться *спектр поглощения* газа. Он выглядит как набор тёмных спектральных линий на ярком непрерывном фоне: фотоны с длинами волн (2.3.37) поглощаются частицами газа (т.е. для электромагнитных волн этих частот газ оказывается непрозрачным), а фотоны с другими длинами волн свободно сквозь него проходят, как через прозрачную среду.

Детали взаимодействия электромагнитного поля с веществом, механизмы излучения и поглощения изучаются *квантовой электродинамикой*.

В этом пособии читатели познакомятся с решением нескольких простейших задач о связанных состояниях микрочастицы:

- частица в одномерной симметричной «прямоугольной потенциальной яме» со «стенками» бесконечной высоты (*задача 2.3.1*);
- частица в одномерной асимметричной «прямоугольной потенциальной яме» со «стенками», одна из которых — бесконечной, а другая — конечной высоты (*задача 2.3.2*);
- «одномерная» частица в поле линейной возвращающей силы (2.3.30) («гармонический осциллятор») (*задача 2.3.3*);
- частица в трёхмерной «параллелепипедальной потенциальной яме» со «стенками» бесконечной высоты (*задача 2.3.4*).

### **2.3.5. Общие черты решений одномерных задач о связанных стационарных состояниях**

Как видно из решений задач 2.3.1 – 2.3.4, при всей их внешней несхожести у этих решений имеются общие черты, которые следует считать существенными.

Три из них подробно описаны в п/п 2.3.4. Это:

1. Дискретный энергетический спектр, состоящий из отдельных «энергетических уровней» (2.3.33) — «квантование» энергии.
2. «Нулевые» краевые условия, которым удовлетворяет волновая функция (2.3.31), (2.3.32).
3. Нормируемость волновой функции (2.3.34).

Кроме того, есть ещё ряд интересных и важных особенностей.

4. Наинизший («основной») энергетический уровень микрочастицы  $E_1$

$$E_1 = \min(E_n)$$

всегда располагается *строго выше* минимума потенциальной энергии  $\Phi(x_e) = \Phi_e$  (2.3.29), т.е. «дна» потенциальной «ямы»:

$$E_1 > \Phi_e. \quad (2.3.38)$$

Этот эффект с классической точки зрения означает, что кинетическая энергия микрочастицы, находящейся в «яме», всегда неотрицательна, т.е. частица не может находиться в состоянии покоя, «лежа на дне ямы» с нулевой скоростью. Даже находясь в состоянии с наименьшей возможной энергией (2.3.38), частица вынуждена «двигаться», совершая «нулевые колебания».

5. Плотность вероятности положения микрочастицы в потенциальной «яме»  $P_n(x) = |u_n(x)|^2$  (2.3.35) имеет  $n$  максимумов, чередующихся с  $n - 1$  минимумами – нулями в зависимости от номера состояния  $n$ , возрастающего по мере «возбуждения» микрочастицы. С классической точки зрения получается, что микрочастице «нравится» бывать в одних местах «ямы» и «не нравится» в других, и это совершенно не соответствует величине и направлению силы, действующей на частицу. В частности, описываемая картина имеет место и в случаях, когда частица находится внутри «прямоугольных» ям, где потенциальная энергия

постоянна и сила, которая бы действовала на частицу, вообще отсутствует.

6. Волновая функция микрочастицы оказывается отличной от нуля в тех областях потенциальной «ямы», где потенциальная энергия  $\Phi(x)$  больше энергии  $E$ , а кинетическая энергия должна быть *отрицательной*:

$$K(x) = E - \Phi(x) < 0. \quad (2.3.39)$$

Пространственные области, в которых выполняется неравенство (2.3.39), являются *классически недостижимыми*, поскольку скорость частицы, у которой кинетическая энергия отрицательна, должна быть мнимой. Мнимая скорость, разумеется, бессмысленна с любой точки зрения — как классической, так и квантовой. Однако, если в некоторой области пространства волновая функция микрочастицы отлична от нуля, то имеется конечная вероятность её обнаружить в этой области. Следовательно, микрочастица *может находиться в классически недостижимых областях* пространства.

Исключением, разумеется, является случай, когда в классически недостижимой области потенциальная энергия частицы равна бесконечности. Поскольку для того, чтобы туда проникнуть, частица должна была бы совершить бесконечную работу, она не может находиться в такой области пространства, т.е. вероятность её пребывания там тождественно равна нулю. Равна

нулю и волновая функция частицы в таких пространственных областях.

Перечисленные выше под номерами 1, 4, 5, 6 аспекты поведения микрочастицы, находящейся в связанных состояниях, являются сугубо *квантовыми эффектами* и совершенно необъяснимы с позиций классической физики. Вместе с тем они вполне согласуются с основными принципами квантовой физики. Например, эффект «нулевых колебаний» нетрудно «объяснить», используя принцип неопределённостей (попробуйте!). Однако подобные «объяснения» в действительности ничего не объясняют и, в общем-то, ничего не стоят. Само собой разумеется, что выводы из квантовой теории соответствуют её основам: чему тут восхищаться? Но объяснить и эти выводы, и сами основы понятным «человеческим языком» невозможно. Вообразить — можно, понять — нельзя (см. п/п. 1.4.5).

Но самое важное, что все обсуждаемые удивительные явления наблюдаются в экспериментах, а некоторые из них весьма успешно используются в технике.

### **2.3.6. Состояния рассеяния**

Если источник силового поля отталкивает классическую материальную точку, или если её кинетическая энергия достаточно велика, чтобы преодолеть связывающее действие силы притяжения источника поля, то материальная точка, в какой-то момент сблизившись с источником поля на некое минимальное расстояние,

зависящее от начальных условий движения, затем начнёт неограниченно удаляться. Иными словами, частица приходит из бесконечности и уходит в бесконечность, лишь изменив в результате взаимодействия с источником поля величину и направление скорости движения.

В классической механике такое движение называется *инфинитным* (infinity — бесконечность, безграничность).

Астрономическим примером тела, осуществляющего инфинитное движение, является космический объект, откуда-то из глубин Космоса залетевший в солнечную систему и спустя некоторый промежуток времени её покинувший. Если небесные тела, принадлежащие солнечной системе, движутся вокруг Солнца по замкнутым эллиптическим траекториям, то траектория космического «гостя» является незамкнутой кривой типа гиперболы с прямолинейными асимптотами, соответствующими свободному движению объекта как до, так и после «посещения».

Строго говоря, инфинитное движение является абстракцией и никогда практически не реализуется. Считая движение объекта инфинитным, мы, скорее всего, судим об этом лишь по ограниченному участку его траектории, который доступен нашему наблюдению из «малой» системы, в которой мы обитаем. На самом же деле, вероятно, данный объект связан с какой-то «большой» системой, в пределах которой он осуществляет финитное движение — но никакой реальной информацией об этом мы не располагаем. Однако влияние этой «большой» системы на процесс, который мы



изучаем, может быть пренебрежимо малым, и тогда мы имеем право игнорировать её наличие.

Ещё одна ситуация, в которой имеет место инфинитное движение — это *столкновение*, или *рассеяние*, двух объектов (например, атомов или молекул). Обе частицы, сближаясь «из бесконечности» по прямолинейным траекториям, взаимодействуют («сталкиваются») и затем удаляются «в бесконечность» снова по прямолинейным траекториям — но уже со скоростями, которые изменились по сравнению с первоначальными — и, чаще всего, весьма существенно — как по величине, так и по направлению.

Рассматриваемая система двух сталкивающихся частиц предполагается замкнутой, т.е. наличие других тел во вселенной, которые могли бы воздействовать на движение сталкивающихся частиц (в частности, других молекул, находящихся в том же сосуде, а также и стенок сосуда) игнорируется. И такая модель в ряде случаев является вполне адекватной — например, в случае разреженного газа, где молекулы сталкиваются друг с другом редко, если уж сталкиваются — то попарно, а столкновения сразу трёх или четырёх молекул происходят крайне редко.

Простейший случай системы, осуществляющей инфинитное движение — свободная материальная точка, движущаяся по инерции прямолинейно и равномерно.

При квантовомеханическом описании, разумеется, речь не может идти об инфинитном движении микрообъектов. Однако ситуации, подобные рассмотренным выше, описываются в квантовой механике *состояниями рассеяния* микросистем, которые

являются альтернативой связанным состояниям и иногда называются просто «несвязанными состояниями».

Если микросистема замкнута (2.3.8), (2.3.15), то её состояния рассеяния стационарны (2.3.21), (2.3.23). Например, стационарным является состояние микрочастицы, находящейся в поле  $\Phi(\mathbf{r})$ , которое её не связывает, т.е. «позволяет» частице находиться сколь угодно далеко от центра силы. А это означает, что пространственная часть волновой функции частицы теперь уже не удовлетворяет условию (2.3.24): напротив, она не обращается в нуль, а остаётся конечной при неограниченном удалении частицы от источника поля:

$$\lim_{|x_\alpha| \rightarrow \infty} u(\mathbf{r}) \neq 0; \quad 1 \leq \alpha \leq 3. \quad (2.3.38)$$

Следовательно, нормировочный интеграл волновой функции микрочастицы (2.1.9) не существует (бесконечен), и плотность вероятности положения частицы в пространстве  $P(\mathbf{r}) = |u(\mathbf{r})|^2$  невозможно нормировать на единицу.

Поскольку пространственная часть волновой функции состояния рассеяния вследствие (2.3.38) не удовлетворяет «нулевым» граничным условиям (2.3.32), её вычисление путём решения стационарного уравнения Шрёдингера (2.3.27) не приводит к решению задачи Штурма – Лиувилля (см. п/п. 2.3.4). Следовательно, отсутствует причина «квантования» энергии

микрочастицы (2.3.33): нетривиальные решения возможны не при «отдельных», а *при любых* значениях энергии. Иными словами, энергетический спектр состояний рассеяния — не дискретный, а непрерывный (сплошной).

Теория рассеяния является отдельным сложным разделом квантовой механики. В дальнейшем предполагается познакомить читателей с общим подходом к решению задач о рассеянии микрочастицы на одномерных «потенциальных барьерах» и возникающих при этом квантовых эффектах.

### **2.3.7. Общие черты решений одномерных стационарных задач о рассеянии микрочастицы**

Материал, рассматриваемый в данном подпункте, требует знания теории оператора импульса микрочастицы с одной степенью свободы  $\hat{p}_x$  (п/п. 3.2.1). В формальном курсе квантовой механики эту теорию следовало бы изложить до описания приложений, но автор из методических соображений принял решение расположить материал так, как он представлен в данном пособии. Задача 3.2.5, посвящённая решению одномерного стационарного уравнения Шрёдингера для состояний рассеяния микрочастицы, разумеется, предлагается студентам после изучения п/п. 3.2.1.

Если потенциальную энергию частицы  $\Phi(x)$  в поле «возвращающей» силы, которая обеспечивает связанные состояния частицы с источником поля, принято называть «потенциальной

ямой» (2.3.30), то потенциал  $\Phi(x)$ , на котором происходит рассеяние частицы, называют «потенциальным барьером».

«Потенциальный барьер», который мы рассмотрим в качестве примера, выглядит следующим образом:

- при  $x \rightarrow -\infty$   $\Phi(x) = \Phi_0$ ;
- при  $x \rightarrow +\infty$   $\Phi(x) = \Phi_1 > \Phi_0$ ;
- при  $x = 0$  потенциал  $\Phi(x)$  имеет максимум  $\Phi(0) = \Phi_2 > \Phi_1$ .

Таким образом, функция  $\Phi(x)$  представляет собой «горб», опирающийся слева на горизонталь  $\Phi(x) = \Phi_0$ , а справа — на горизонталь  $\Phi(x) = \Phi_1$ .

А. В соответствии с классической механикой движение микрочастицы в поле описанной силы происходит следующим образом.

А1. Пусть частица обладает энергией  $\Phi_0 < E < \Phi_2$  и движется из области  $x \rightarrow -\infty$  вдоль оси  $x$  слева направо. Пока частица находится достаточно далеко от источника поля, её потенциальная энергия постоянна, действующая на неё сила равна нулю, так что импульс частицы

$$p'_x = \sqrt{2m(E - \Phi_0)} > 0 \quad (2.3.39)$$

остаётся постоянным.

По мере приближения к точке  $x = 0$  потенциальная энергия  $\Phi(x)$  начинает возрастать, а кинетическая энергия частицы — уменьшаться. В точке  $x = x'(E)$ , где  $\Phi(x') = E$ , кинетическая энергия

частицы и её скорость (импульс) обращаются в нуль. Частица меняет направление движения на противоположное, ускоряется, затем выходит из поля действия силы и равномерно со скоростью, соответствующей значению импульса  $-p'_x$ , возвращается обратно в область  $x \rightarrow -\infty$ .

Справа от «барьера» частица оказаться в принципе не может, т.к. при этом ей пришлось бы пройти сквозь область «под барьером», расположенную правее классической точки поворота  $x > x'(E)$ , в которой частица должна была бы обладать отрицательной кинетической энергией  $K = E - \Phi(x)$  и, соответственно, мнимыми скоростью и импульсом.

Таким образом, при  $\Phi_0 < E < \Phi_2$  имеет место «отражение» классической частицы от потенциального «барьера».

A2. Пусть теперь  $E > \Phi_2$ . Перемещаясь в сторону «барьера» слева направо, частица сначала будет двигаться равномерно с импульсом (2.3.39). Затем её скорость начнёт уменьшаться и достигнет минимального, но по-прежнему положительного значения в точке  $x = 0$ . После этого скорость частицы снова начнёт возрастать, и когда она выйдет за пределы действия силы, её импульс станет постоянным и равным

$$p''_x = \sqrt{2m(E - \Phi_1)} > 0 \quad (2.3.40)$$

В результате частица пройдёт «над барьером» и уйдёт в область  $x \rightarrow +\infty$ .

Б. Теперь опишем поведение микрочастицы в рассматриваемом поле силы с позиций квантовой механики.

Б1. Стационарное одномерное уравнение Шрёдингера имеет вид (2.3.27). Разумеется, решить его «в общем виде», т.е. найти вид пространственной части  $u(x)$  волновой функции стационарного состояния микрочастицы для произвольного «потенциального барьера»  $\Phi(x)$ , форма которого описана в номере А данного подпункта, невозможно. Однако можно проанализировать *асимптотику* решений

$$u(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} u^{(-\infty)}(x); \quad u(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} u^{(+\infty)}(x). \quad (2.3.41)$$

Б2. При  $x \rightarrow -\infty$  общее решение стационарного уравнения Шрёдингера, идентичного (3.2.9),

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u^{(-\infty)}}{dx^2} + \Phi_0 u^{(-\infty)} = E u^{(-\infty)} \quad (2.3.42)$$

имеет вид, одинаковый при всех соотношениях энергии микрочастицы с параметрами потенциального барьера:  $\Phi_0 < E < \Phi_1$ ,  $\Phi_1 < E < \Phi_2$ ,  $E > \Phi_2$ .

Обозначим

$$k'^2 \equiv \frac{2m(E - \Phi_0)}{\hbar^2} > 0 \quad (2.3.43)$$

и для определённости выберем  $k' > 0$ . Тогда уравнение (2.3.42) приобретёт вид

$$\frac{d^2 u^{(-\infty)}}{dx^2} = -k'^2 u^{(-\infty)}. \quad (2.3.44)$$

Общее решение уравнения (2.3.44) представим в комплексном виде:

$$u^{(-\infty)}(x) = A_1 e^{ik'x} + A_2 e^{-ik'x}. \quad (2.3.45)$$

Волновая функция (2.3.45) представляет собой линейную комбинацию (3.2.21) двух собственных функций оператора импульса (3.2.19)

$$u^{(-\infty)}(x) = a_1 u_{+\hbar k'}(x) + a_2 u_{-\hbar k'}(x). \quad (2.3.46)$$

Первая из них соответствует направлению импульса частицы вдоль оси  $x$ ,  $p_x = +\hbar k'$ , а вторая — противоположному направлению,  $p_x = -\hbar k'$ .

Таким образом, волновая функция (2.3.46) описывает *смесь* или *суперпозицию* двух состояний микрочастицы при  $x \rightarrow -\infty$ . Первое из них соответствует «движению» частицы вдоль оси  $x$ , т.е. из области  $x \rightarrow -\infty$ , к «барьеру», а второе — напротив, от «барьера» в область  $x \rightarrow -\infty$ .

Конкретизируем *начальное условие* задачи о рассеянии частицы на потенциальном барьере. Пусть таким условием является *падение частицы на барьер* из области  $x \rightarrow -\infty$ , т.е. слева направо. Тогда первое слагаемое волновой функции (2.3.45), (2.3.46) описывает состояние падающей на «барьер» частицы, а второе — состояние частицы, «отражённой» от барьера.

БЗ. Теперь рассмотрим асимптотику волновой функции справа от барьера, т.е. при  $x \rightarrow \infty$ .

Если энергия частицы находится в интервале  $\Phi_0 < E < \Phi_1$ , то стационарное уравнение Шрёдингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u^{(+\infty)}}{dx^2} + \Phi_1 u^{(+\infty)} = E u^{(+\infty)}. \quad (2.3.47)$$

Обозначим

$$\kappa^2 \equiv \frac{2m(\Phi_1 - E)}{\hbar^2} > 0. \quad (2.3.48)$$

С учётом (2.3.48) уравнение (2.3.47) примет вид

$$\frac{d^2 u^{(+\infty)}}{dx^2} = \kappa^2 u^{(+\infty)}. \quad (2.3.49)$$

Общее решение уравнения (2.3.49) имеет вид



$$u^{(+\infty)}(x) = B_1 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x}. \quad (2.3.50)$$

Первое слагаемое в (2.3.50) при  $x \rightarrow \infty$  неограниченно возрастает. Исходя из требования ограниченности волновой функции следует положить  $B_1 = 0$ . В результате получим, что волновая функция частицы справа от «барьера» экспоненциально быстро обращается в нуль:

$$u^{(+\infty)}(x) = B_2 e^{-\kappa x}. \quad (2.3.51)$$

Соотношение (2.3.51) свидетельствует о том, что имеется конечная вероятность обнаружить частицу в классически недостижимой области «под барьером», расположенную правее классической точки поворота, поскольку при  $x > x'(E)$  волновая функция  $u^{(+\infty)}$  отлична от нуля. Однако функция (2.3.51) экспоненциально быстро уменьшается по мере удаления от «барьера», и это означает, что вероятность встретить частицу при  $x \rightarrow \infty$  исчезающе мала, т.е. фактически равна нулю.

Таким образом, при  $\Phi_0 < E < \Phi_1$  частица не может пройти сквозь барьер, т.е. уйти в область  $x \rightarrow \infty$ .

Б4. Если энергия частицы  $E > \Phi_1$ , то независимо от того, как  $E$  соотносится с  $\Phi_2$ , при  $x \rightarrow \infty$  стационарное уравнение Шрёдингера имеет вид (2.3.47). Обозначим

$$k''^2 \equiv \frac{2m(E - \Phi_1)}{\hbar^2} > 0 \quad (2.3.52)$$

и для определённости выберем  $k'' > 0$ . Тогда уравнение (2.3.47) приобретёт вид, аналогичный (2.3.44):

$$\frac{d^2 u^{(+\infty)}}{dx^2} = -k''^2 u^{(+\infty)}. \quad (2.3.53)$$

Общее решение уравнения (2.3.53), как и (2.3.45), представим в комплексном виде:

$$u^{(+\infty)}(x) = C_1 e^{ik''x} + C_2 e^{-ik''x}. \quad (2.3.54)$$

Волновая функция (2.3.54), как и (2.3.45), представляет собой линейную комбинацию (3.2.21) двух собственных функций оператора импульса (3.2.19).

Первое слагаемое в (2.3.54) соответствует направлению импульса частицы вдоль оси  $x$ ,  $p_x = +\hbar k''$ . Оно описывает «движение» частицы, *прошедшей сквозь «барьер»* ( $E < \Phi_2$ ) или *над «барьером»* ( $E > \Phi_2$ ), вдоль оси  $x$ , т.е. в область  $x \rightarrow \infty$ .

Второе слагаемое, наоборот, соответствует «движению» микрочастицы в противоположном направлении, т.е. из  $x \rightarrow \infty$  назад к «барьеру» с импульсом  $p_x = -\hbar k''$ .

Однако если в соответствии со сформулированным начальным условием процесса рассеяния микрочастица падает на «барьер» из

области  $x \rightarrow -\infty$  слева направо, то она может либо отразиться от «барьера», либо, пройдя «барьер», продолжить движение в том же направлении. «Движение» частицы за «барьером» справа налево, описываемое вторым слагаемым (2.3.54), с физической точки зрения невозможно. Чтобы «уничтожить» это слагаемое, следует положить  $C_2 = 0$ . Тогда

$$u^{(+\infty)}(x) = C_1 e^{ik''x}. \quad (2.3.55)$$

Б5. Полученные результаты свидетельствуют о наличии двух *сугубо квантовых* эффектов, характерных для процессов рассеяния микрочастиц.

Первый из них называется *прохождением микрочастицы сквозь потенциальный «барьер»* или *туннельным эффектом*. Он состоит в следующем. Поскольку в формуле (2.3.55) коэффициент  $C_1 \neq 0$ , частица с энергией в интервале  $\Phi_1 < E < \Phi_2$ , падающая на «барьер», с конечной вероятностью может пройти сквозь классически недостижимую область «под барьером», где её кинетическая энергия с классической точки зрения должна была быть отрицательной, а скорость — мнимой, и продолжить движение с противоположной стороны «барьера».

Второй эффект — это «*надбарьерное отражение*». Поскольку в формуле (2.3.45) коэффициент  $A_2 \neq 0$ , имеется конечная вероятность, что частица, падающая на «барьер» с энергией  $E > \Phi_2$ ,

вместо того, чтобы пройти над «барьером», отразится (от чего?!) и вернётся в область, из которой она начала падение.

Оба указанных эффекта не имеют никакого разумного (с классической точки зрения) объяснения.

Б6. Вероятность прохождения частицы через потенциальный «барьер» называется *коэффициентом прохождения*, а вероятность отразиться от него носит название *коэффициента отражения*. Выведем формулы для подсчёта этих коэффициентов.

Обе интересующие нас вероятности являются *условными*.

Пусть имеются случайные события  $a$  и  $b$ . Вероятность того, что произойдёт событие  $a$ , равна  $w(a)$ . Вероятность того, что произойдёт событие  $b$ , равна  $w(b)$ . Совместная вероятность того, что произойдут события  $a$  и  $b$ , равна  $w(a,b)$ . Тогда по определению

$$w(a,b) = w(a)w(b|a) = w(b)w(a|b).$$

Величина  $w(b|a)$  является вероятностью того, что произойдёт событие  $b$ , если (при условии, что) произошло событие  $a$ . Наоборот, вероятность того, что произойдёт событие  $a$ , если (при условии, что) произошло событие  $b$ , равно  $w(a|b)$ . Как видно,

$$w(b|a) = w(a,b) / w(a); \quad w(a|b) = w(a,b) / w(b).$$

Коэффициент отражения (reflection)  $R$  есть условная вероятность того, что частица отразилась от барьера, если она на него упала.

Для подсчёта этой величины поставим следующий «мысленный эксперимент». В области координат  $(x'_1, x'_2)$  протяжённостью  $\Delta x = x'_1 - x'_2$  при  $x \rightarrow -\infty$  поместим детектор, позволяющий зафиксировать факт прохождения частицы через интервал координат  $\Delta x$  и направление её движения, т.е. знак импульса. Выполняя множество экспериментов, в которых частица проходит через детектор слева направо, подсчитаем долю случаев, в которых частица возвращается, снова пройдя детектор, но уже справа налево. Эта величина и будет служить «экспериментальной» оценкой коэффициента отражения  $R$ .

Теперь вычислим эту величину теоретически, учитывая смысл слагаемых асимптотики волновой функции слева от «барьера» (2.3.45). В соответствии со сделанными определениями и вероятностным смыслом волновой функции вероятность того, что частица прошла через детектор слева направо, равна (точнее, пропорциональна, т.к. плотность вероятности свободной частицы нельзя нормировать на единицу) величине

$$w^{(\rightarrow)} = \int_{x'_1}^{x'_2} |A_1 e^{ik'x}|^2 dx = |A_1|^2 \Delta x. \quad (2.3.56)$$

Точно так же вероятность прохождения частицы через детектор справа налево пропорциональна величине

$$w^{(\leftarrow)} = \int_{x_1'}^{x_2'} |A_2 e^{-ik'x}|^2 dx = |A_2|^2 \Delta x. \quad (2.3.57)$$

Деля (2.3.57) на (2.3.56), получим искомую условную вероятность:

$$R = \frac{w^{(\leftarrow)}}{w^{(\rightarrow)}} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2. \quad (2.3.58)$$

Коэффициент прохождения или прозрачности (transparency)  $T$  есть условная вероятность того, что частица прошла сквозь барьер (над барьером), если она на него упала.

«Установим» для «измерения» этой величины ещё один детектор справа от барьера и рассчитаем соответствующие вероятности теоретически, имея в виду смысл первого слагаемого асимптотики волновой функции (2.3.45) и асимптотики волновой функции справа от «барьера» (2.3.55). Получим:

$$T = \frac{|C_1|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{C_1}{A_1} \right|^2. \quad (2.3.59)$$

Можно показать, что

$$R + T = 1. \quad (2.3.60)$$

Естественно, вычислить значения коэффициентов асимптотических зависимостей волновой функции микрочастицы (2.3.45) и (2.3.55), определяющих значения коэффициентов отражения (2.3.58) и прохождения (2.3.59), можно, лишь решив стационарное уравнение Шрёдингера для рассеяния микрочастицы на данном потенциальном «барьере» (2.3.27) и найдя асимптотики решения (2.3.41).

Туннельный эффект и надбарьерное отражение, как уже указывалось, являются сугубо квантовыми эффектами, которые абсолютно необъяснимы как с позиций классической физики, так и средствами «человеческого языка» (см. аналогичное обсуждение в п/п. 3.2.5). Однако эти эффекты не только уверенно обнаруживаются в экспериментах, но и успешно используются для создания технических устройств.

В качестве простейшей иллюстрации расчёта коэффициентов отражения и прохождения предлагается решить задачу о рассеянии микрочастицы на одномерном «прямоугольном потенциальном барьере» (*задача 2.3.5*).

### **Вопросы для самопроверки**

2.3.1. При каком условии в уравнении Шрёдингера удаётся разделить временную переменную и пространственные координаты?

2.3.2. Что мешает разделить в уравнении Шрёдингера пространственные координаты друг с другом для его решения?

2.3.3. Почему состояния микросистемы, допускающие разделение временной переменной и пространственных координат в уравнении Шрёдингера, называются стационарными?

2.3.4. Что является необходимым условием существования связанных состояний? Почему оно, вообще говоря, не достаточно?

2.3.5. Каковы граничные условия решения уравнении Шрёдингера, которое описывает связанное состояние? Как они обеспечивают существование нормировочного интеграла волновой функции?

2.3.6. Какие граничные условия решения уравнении Шрёдингера описывают состояния рассеяния? Почему волновую функцию, описывающую состояние рассеяния, нельзя нормировать?

2.3.7. Какие эффекты, необъяснимые с позиций классической физики, предсказываются при решении задач о стационарных связанных состояниях микрочастицы?

2.3.8. Какие эффекты, необъяснимые с позиций классической физики, предсказываются при решении задач о стационарных состояниях рассеяния микрочастицы?



### 3. ОПЕРАТОРЫ ИМПУЛЬСА, КООРДИНАТЫ И ЭНЕРГИИ МИКРОЧАСТИЦЫ

#### 3.1. Как построить оператор динамической переменной

##### 3.1.1. Зачем нужны операторы в квантовой механике

Решив уравнение Шрёдингера и найдя волновую функцию микросистемы, мы получаем возможность подсчитать распределение вероятностей всевозможных *конфигураций* микросистемы, т.е. её положения в пространстве и, в общем случае, взаимного расположения её составных частей. Это, в свою очередь, позволяет вычислить интересующие нас статистические характеристики *координат*, определяющих конфигурацию системы: средних значений, среднеквадратичных отклонений и т.п., и любых функций координат.

Однако развитая в гл. 2 теория не предлагает рецептов, как найти такие же статистические характеристики других динамических переменных — например, скорости или импульса, кинетической энергии, момента импульса микрочастицы, — которые, как и координаты, представляют собой случайные величины.

Для решения этой задачи в квантовой механике используется специфический математический аппарат — теория *операторов*.

В п.п. 2.2 и 2.3 мы уже использовали понятие операторов, действующих на волновые функции микрообъекта. В частности, в п/п. 2.2.5 мы ввели понятие *оператора Гамильтона*. Это было сделано для того, чтобы формально записывать уравнение Шрёдингера в общем виде, не зависящем от вида микросистемы. Здесь же были даны некоторые общие сведения об операторах как математических объектах.

В этой главе мы построим операторы, «представляющие» в квантовой механике такие динамические переменные, как импульс, координата, энергия микрочастицы, а в дальнейшем покажем, как, зная волновую функцию, найти статистические характеристики этих и других динамических переменных микросистем.

### **3.1.2. Собственные функции и собственные значения операторов**

Рассмотрим микросистему, обладающую  $f$  степенями свободы. Множество волновых функций  $\psi(t, q^f)$ , каждая из которых описывает одно из возможных квантовых состояний данной микросистемы, образует «пространство состояний» этой микросистемы, а функцию  $\psi(t, q^f)$  в определённом смысле можно рассматривать как «вектор» в этом «пространстве». В математике подобные множества называются «функциональными пространствами».

Рассмотрим, далее, линейный оператор  $\hat{F}$ , «действующий» на волновые функции, принадлежащие пространству состояний данной микросистемы. Как уже говорилось в п/п. 2.2.5, результатом «воздействия» оператора на волновую функцию  $\psi(t, q^f)$  является, вообще говоря, другая функция  $\phi(t, q^f)$ , принадлежащая тому же пространству. Сказанное описывается символическим соотношением

$$\hat{F} \psi(t, q^f) = \phi(t, q^f). \quad (3.1.1)$$

Смысл символического соотношения (3.1.1) состоит в том, что оператор  $\hat{F}$  по определённом правилу осуществляет преобразование функций, принадлежащих данному функциональному пространству, причём объектом преобразования является функция  $\psi(t, q^f)$ , а результатом преобразования — функция  $\phi(t, q^f)$ .

Используя упомянутую выше аналогию между функциональными и векторными пространствами, напомним, что преобразования вида (3.1.1), объектами которых являются векторы, выполняют в линейной алгебре *матрицы* — или, точнее, *тензоры*, компоненты которых представляются элементами матриц. Тензоры и являются операторами, «действующими» на элементы векторного пространства. Как мы увидим в дальнейшем, эта аналогия не сводится к чисто внешнему сходству, а имеет глубокий внутренний смысл: вспомним, что альтернативой излагаемому нами

«волновому» подходу Э. Шрёдингера служит «матричная» формулировка квантовой механики, принадлежащая В. Гайзенбергу (п/п. 1.4.1).

Рассмотрим частный случай соотношения (3.1.1), когда результатом воздействия оператора  $\hat{F}$  на некоторую волновую функцию  $\psi(t, q^f)$  является та же функция, умноженная на константу:

$$\hat{F} \psi(t, q^f) = C \psi(t, q^f). \quad (3.1.2)$$

Такая функция называется *собственной функцией* оператора  $\hat{F}$ , а константа  $C$  — *собственным значением* оператора.

Чтобы отличать собственные функции оператора  $\hat{F}$  от «не собственных», вместо (3.1.2) будем использовать следующие обозначения:

$$\hat{F} \psi_F(t, q^f) = F \psi_F(t, q^f). \quad (3.1.3)$$

Собственное значение оператора  $\hat{F}$  обозначим той же буквой  $F$ , но без «шляпки», а собственную функцию, «принадлежащую» этому собственному значению, снабдим индексом  $F$ .

Соотношение (3.1.3) можно рассматривать как уравнение, определяющее все возможные собственные значения оператора и принадлежащие им собственные функции.

А теперь сформулируем правило, в соответствии с которым в квантовой механике строятся операторы, «представляющие» те или иные динамические переменные микросистемы. Рассмотрим динамическую переменную *классической* системы  $F(q^f, p^f)$ , зависящую в общем случае от координат и импульсов, соответствующих всем степеням свободы системы. В соответствии с квантовой механикой рассматриваемая динамическая переменная микросистемы, находящейся в состоянии  $\psi(t, q^f)$ , вообще говоря, представляет собой случайную величину.

Пусть, однако, каждым решением  $\psi_F(t, q^f)$  уравнения (3.1.3), т.е. собственной функцией оператора  $\hat{F}$ , является волновая функция, описывающая такое состояние микросистемы, в котором *физическая величина  $F$  имеет определённое (т.е. не случайное) значение, равное собственному значению  $F$  этого оператора.* Положим также, что множество решений уравнения (3.1.3) включает *все* такие волновые функции микросистемы. Оператор, который обладает указанной системой собственных функций и собственных значений, и является в квантовой механике «представителем» рассматриваемой динамической переменной.

С важным примером подобной ситуации мы уже познакомились в п. 2.3. Стационарное уравнение Шрёдингера (2.3.19) есть не что иное, как уравнение на собственные функции и собственные значения (3.1.3) оператора Гамильтона  $\hat{H}$  (2.2.19) – (2.2.21):

$$\hat{H} u_E(q^f) = E u_E(q^f). \quad (3.1.4)$$

Собственными значениями этого оператора являются, как мы предположили в п. 2.3, значения сохраняющейся энергии  $E$  замкнутой (изолированной) микросистемы, а собственными функциями — пространственные «части» соответствующих волновых функций (2.3.21):

$$\psi_E(t, q^f) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right) u_E(q^f). \quad (3.1.5)$$

Поскольку оператор Гамильтона «действует» только на пространственные переменные волновой функции, уравнение (3.1.4) с учётом (3.1.5) можно записать в виде (3.1.3):

$$\hat{H} \psi_E(t, q^f) = E \psi_E(t, q^f). \quad (3.1.6)$$

Решениями уравнения (3.1.6) являются *все* волновые функции (3.1.5), описывающие стационарные состояния микросистемы, в которых её энергия является определённой (не случайной) величиной.

Наверное, с учётом принятых в (3.1.3), (3.1.6) обозначений было бы правильно назвать  $\hat{H}$  оператором энергии и обозначить  $\hat{E}$ , но исторически сложились и стали общепринятыми другие, приведенные выше обозначения и термины.

Ниже мы убедимся, что оператор Гамильтона  $\hat{H}$  (2.2.19) – (2.2.21) действительно с полным основанием следует считать оператором энергии, а его собственные значения  $E$  — возможными значениями энергии замкнутой микросистемы.

### **Вопросы для самопроверки**

3.1.1. Что такое собственная функция и собственное значение оператора? Что означает выражение «собственная функция, принадлежащая собственному значению»?

3.1.2. Каков физический смысл собственных функций и собственных значений оператора, представляющего в квантовой механике некоторую динамическую переменную микросистемы?

## **3.2. Оператор импульса**

### **3.2.1. Свойства собственной функции оператора импульса в одномерном случае**

Нам пока неизвестны ни вид собственной функции  $\psi_{p_x}(t, x)$  оператора импульса  $\hat{p}_x$  микрочастицы с одной степенью свободы, ни его собственные значения, ни конструкция самого оператора импульса. Известно лишь, что все эти объекты присутствуют в уравнении на собственные функции и собственные значения рассматриваемого оператора (3.1.3):

$$\hat{p}_x \psi_{p_x}(t, x) = p_x \psi_{p_x}(t, x). \quad (3.2.1)$$

Тем не менее, поскольку волновая функция  $\psi_{p_x}(t, x)$  должна описывать такое состояние микрочастицы, в котором её импульс имеет *определённое значение*, равное  $p_x$  (см. п/п. 3.1.1), из общих соображений можно сформулировать требования, которым должна удовлетворять эта волновая функция.

1. Собственная функция оператора импульса  $\psi_{p_x}(t, x)$  описывает состояние *свободной* микрочастицы.

Иными словами, если микрочастица обладает определённым импульсом  $p_x$ , то она свободна, т.е. никакая сила на неё не действует:

$$F_x = -\frac{d\Phi}{dx} = 0 \text{ при } -\infty < x < \infty; \quad \Phi(x) = \Phi_0 = \text{const.} \quad (3.2.2)$$

2. Вследствие (3.2.2) не существует областей пространства, где бы частица «предпочитала» или, напротив, «избегала» находиться: любые её положения в пространстве *равновероятны*.

Это означает, что плотность вероятности обнаружить микрочастицу с определённым импульсом в любой точке пространства одинакова:

$$|\psi_{p_x}(t, x)|^2 = \text{const.} \quad (3.2.3)$$



3. Согласно концепции корпускулярно – волнового дуализма (п/п. 1.4.2) микрочастица, обладающая определённым импульсом  $p_x$ , должна вместе с тем вести себя как волна с *длиной волны де Бройля* (1.4.16)

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{|p_x|}. \quad (3.2.4)$$

Отсюда следует, что собственная функция оператора импульса должна быть *пространственно – периодической* с периодом (3.2.4):

$$\psi_{p_x}(t, x \pm \lambda n) = \psi_{p_x}(t, x); \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.2.5)$$

Сделаем некоторые пояснения.

*К № 1.* В классической механике (см. п. 1.2) импульс материальной точки, на которую не действует сила, сохраняется, т.е. является интегралом движения: значение её импульса  $p_x$  остаётся постоянным, не меняясь с течением времени.

В общем случае интегралом движения является суммарный импульс любой механической системы, на которую не действует никакая внешняя сила. Внутренние силы, т.е. силы взаимодействия между частями системы — могут быть при этом любыми.

Точно так же можно утверждать, что если на квантовую микросистему (в частности, микрочастицу) не действует внешняя

сила (3.2.2), то её суммарный импульс имеет определённое значение.

Докажем это утверждение, рассуждая «от противного». Внешняя сила, действующая на частицу, ускоряет её. Это означает, что в той области пространства, куда сила «втягивает» частицу, её импульс будет больше, а в той области, откуда сила её «выталкивает», импульс, наоборот, будет меньше. Поскольку рассматриваемое состояние описывается волновой функцией  $\psi(t,x)$ , которая определена во всём пространстве, т.е. при  $-\infty < x < \infty$ , то импульс микрочастицы в этом состоянии не имеет определённого значения. Следовательно, в самом деле, чтобы импульс имел определённое значение, микрочастица должна быть свободной.

Таким образом, собственная функция оператора импульса  $\psi_{p_x}(t,x)$  действительно описывает состояние *свободной* микрочастицы.

*К № 2.* В соответствии с принципом неопределённостей (п/п. 1.4.3) наличие у частицы определённого импульса означает, что неопределённость её положения в пространстве бесконечна. Этому требованию в соответствии с (3.2.3) удовлетворяет волновая функция свободной частицы.

*К № 3.* В общей формулировке принципа корпускулярно – волнового дуализма не очень ясно, что конкретно подразумевается под наличием у корпускулы волновых свойств. Однако коль скоро состояние микрочастицы описывается волновой функцией, то очевидно, что носителем волновых свойств микрочастицы служит

именно эта функция. Указанное обстоятельство и оправдывает название этой функции.

Очевидно, что состояние микрочастицы с определённым импульсом вследствие (2.3.8), (3.2.2) является стационарным (см. п/п. 2.3.1), и в соответствии с (2.3.21)

$$\psi_{p_x}(t, x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)u_{p_x}(x). \quad (3.2.6)$$

Ввиду (3.2.3), (3.2.5) и (2.3.22) «координатная» часть собственной функции оператора импульса  $u_{p_x}(x)$  (3.2.6) должна удовлетворять соотношениям

$$|u_{p_x}(x)|^2 = \text{const}; \quad (3.2.7)$$

$$u_{p_x}(x \pm \lambda n) = u_{p_x}(x); \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.2.8)$$

Вследствие (3.2.3), (3.2.7) собственную функцию оператора импульса — волновую функцию свободной частицы — невозможно нормировать «на единицу» (2.1.9) (см. обсуждение этого вопроса в п/пп. 2.3.3 и 2.3.5), так что выражения (3.2.3) и (3.2.7) не могут служить «полноценной» плотностью вероятности положений в пространстве микрочастицы с определённым импульсом.

### 3.2.2. Вычисление собственной функции оператора импульса в одномерном случае

Естественно, «координатная» часть собственной функции оператора импульса  $u_{p_x}(x)$  (3.2.6) удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера (2.3.19). С учётом (3.2.2) оно имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{p_x}}{dx^2} + \Phi_0 u_{p_x} = E u_{p_x}. \quad (3.2.9)$$

Нетрудно показать (см. решение задачи 2.3.1), что при  $E < \Phi_0$  уравнение (3.2.9) имеет только тривиальное решение  $u_{p_x} \equiv 0$ .

Нетривиальные решения существуют при  $E \geq \Phi_0$ . Обозначим

$$k^2 \equiv \frac{2m(E - \Phi_0)}{\hbar^2} \geq 0 \quad (3.2.10)$$

(параметр  $k$  действителен) и для определённости выберем  $k \geq 0$ . Тогда (3.2.9) приобретёт вид

$$\frac{d^2 u_{p_x}}{dx^2} = -k^2 u_{p_x}. \quad (3.2.11)$$

Общее решение уравнения (3.2.11) можно выбрать в действительном виде

$$u_{p_x}(x) = C_1 \sin(kx) + C_2 \cos(kx) \quad (3.2.12)$$

либо в комплексном:

$$u_{p_x}(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}. \quad (3.2.13)$$

Обе функции (3.2.12), (3.2.13) являются пространственно – периодическими, т.е. удовлетворяют условию (3.2.8), если

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}. \quad (3.2.14)$$

Из (3.2.14) следует, что  $k$  — волновое число [см. (1.4.7) в п/п. 1.4.1].

С учётом (3.2.4) из (3.2.14) получим следующую связь между волновым числом и импульсом частицы:

$$k = \frac{|p_x|}{\hbar}. \quad (3.2.15)$$

[ср. с формулой (1.4.5) из п/п. 1.4.1].

Таким образом, оба общих решения (3.2.12), (3.2.13) удовлетворяют *третьему требованию* из п/п. 3.2.1.

Далее, подставляя (3.2.15) в (3.2.10), получим соотношение, связывающее импульс с параметром  $E$  в стационарном уравнении Шрёдингера для свободной микрочастицы (3.2.9):

$$E = \Phi_0 + \frac{1}{2m} p_x^2. \quad (3.2.16)$$

Соотношение (3.2.16) представляет собой, очевидно, не что иное, как функцию Гамильтона (см. п/п. 1.2.7) свободной частицы с одной степенью свободы, которая есть полная *энергия* частицы, выраженная через её импульс (от координат эта функция в данном случае не зависит). Таким образом, гипотеза о том, что параметр  $E$  в стационарном уравнении Шрёдингера, который является собственным значением оператора Гамильтона, есть сохраняющаяся энергия микросистемы, в рассматриваемом случае полностью подтверждается.

Но поскольку, следовательно, левая часть соотношения (3.2.16) является константой, т.е. не случайной, а вполне определённой величиной, то и импульс свободной микрочастицы

$$p_x = \sqrt{2m(E - \Phi_0)}$$

тоже имеет определённое значение.

Итак, оба общих решения (3.2.12), (3.2.13) удовлетворяют и *первому требованию* из п/п. 3.2.1.

Между тем ни одно из *общих решений* (3.2.12), (3.2.13) уравнения Шрёдингера, как легко проверить, не удовлетворяет *второму требованию* (3.2.7). Поэтому левая часть ни одного из соотношений (3.2.12), (3.2.13) в действительности не является собственной функцией оператора импульса  $u_{p_x}(x)$ .

Попытаемся, однако, подбирая произвольные постоянные в общих решениях (3.2.12), (3.2.13) уравнения Шрёдингера, найти такое нетривиальное *частное решение*, которое бы удовлетворяло второму требованию (3.2.7). Нетрудно убедиться, что с решением в форме (3.2.12) этого не удастся достигнуть никаким подбором произвольных постоянных. Вместе с тем нужный результат получим, положив равной нулю любую из двух произвольных постоянных в общем решении (3.2.13) — например, если  $A_2 = 0$ , то

$$u_{p_x}(x) = A_1 e^{ikx}. \quad (3.2.17)$$

При этом

$$\left| u_{p_x}(x) \right|^2 = A_1^2 = \text{const}. \quad (3.2.18)$$

Соотношение (3.2.18) полностью соответствует равенству (3.2.7), которое выражает второе требование.

Теперь заметим, что обоим слагаемым в общем решении (3.2.13) нетрудно придать идентичный вид, если для их записи использовать соотношение (3.2.15):

$$u_{p_x}(x) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right). \quad (3.2.19)$$

Соотношение (3.2.19) полностью удовлетворяет всем трём требованиям, предъявляемым к собственным функциям оператора импульса, и к тому же явно зависит от значения импульса микрочастицы. Именно это выражение мы и будем в дальнейшем считать пространственной частью искомой собственной функции. Сама же собственная функция оператора импульса (3.2.6) с учётом (3.2.19) имеет вид

$$\psi_{p_x}(t, x) = A \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (p_x x - Et) \right]. \quad (3.2.20)$$

Что же касается общего решения стационарного уравнения Шрёдингера для свободной частицы (3.2.13), то оно представляет собой линейную комбинацию двух собственных функций оператора импульса (3.2.19), одна из которых, как видно из (3.2.15), соответствует направлению импульса вдоль оси  $x$ ,  $p_x = +\hbar k$ , а вторая — противоположному направлению,  $p_x = -\hbar k$ :

$$A_1 e^{ikx} \equiv \alpha_1 u_{+\hbar k}(x); \quad A_2 e^{-ikx} \equiv \alpha_2 u_{-\hbar k}(x),$$

так что

$$u(x) = \alpha_1 u_{+\hbar k}(x) + \alpha_2 u_{-\hbar k}(x). \quad (3.2.21)$$

Волновая функция (3.2.21) описывает стационарное состояние микрочастицы, представляющее собой *суперпозицию* (смесь) двух



её состояний, в каждом из которых импульс частицы — один и тот же по абсолютной величине, но его направления противоположны:  $p_x = +\hbar k$  и  $p_x = -\hbar k$ . Коэффициенты  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  задают «пропорцию», в которой «смешаны» два состояния микрочастицы с указанными определёнными значениями импульса. Разумеется, в самом «смешанном» состоянии (3.2.21) импульс микрочастицы определённого значения не имеет.

Мы видим, что нетривиальные решения (3.2.13), (3.2.21) уравнения Шрёдингера для свободной частицы (3.2.9) имеются при любых значениях её энергии  $E \geq \Phi_0$ , т.е. у такой частицы — непрерывный энергетический спектр. Этот результат полностью согласуется с общими теоретическими положениями (п/п. 2.3.5).

### 3.2.3. Оператор импульса микрочастицы с одной степенью свободы

Чтобы построить оператор импульса  $\hat{p}_x$ , собственной функцией которого являются функции (3.2.19), (3.2.20), а собственным значением — величина  $p_x$ , запишем, используя (2.3.26), оператор Гамильтона свободной частицы, фигурирующий в левой части стационарного уравнения Шрёдингера (3.2.9),

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \Phi_0 \hat{1}, \quad (3.2.22)$$

и сравним его вид с функцией Гамильтона классической свободной частицы с одной степенью свободы (3.2.16)

$$H(x, p_x) = \frac{1}{2m} p_x^2 + \Phi_0. \quad (3.2.23)$$

Не может не броситься в глаза сходство выражений (3.2.22) и (3.2.23). Но можно добиться и ещё большего сходства, если формально переписать оператор Гамильтона (3.2.22) в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + \Phi_0 \hat{1}, \quad (3.2.24)$$

где фигурирует новый оператор

$$\hat{p}_x^2 \equiv -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (3.2.25)$$

Будем рассматривать оператор (3.2.25) как квадрат искомого оператора импульса.

Вообще *квадратом* любого оператора  $\hat{F}$  называется такой оператор  $\hat{F}^2$ , результатом действия которого на *любую* функцию  $\psi$  (см. п/п. 2.5.1) является повторное действие на эту функцию оператора  $\hat{F}$ :

$$\hat{F}^2 \psi \equiv \hat{F} \varphi, \quad \varphi = \hat{F} \psi$$

или, кратко,

$$\hat{F}^2 \psi \equiv \hat{F} (\hat{F} \psi).$$

Например, оператор вычисления второй производной от функции, которая есть результат повторного дифференцирования, т.е. вычисления первой производной, является квадратом оператора дифференцирования:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi = \frac{d}{dx} \left( \frac{d}{dx} \psi \right) \equiv \left( \frac{d}{dx} \right)^2 \psi.$$

С учётом сделанных определений ясно, что вид оператора импульса  $\hat{p}_x$ , удовлетворяющего равенству (3.2.25), может быть либо

$$\hat{p}_x = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (3.2.26)$$

либо

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (3.2.27)$$

Воздействовав оператором (3.2.26) на собственную функцию оператора импульса (3.2.19), (3.2.20) (т.е. продифференцировав её и умножив результат на  $i\hbar$ ), вместо правильного результата (3.2.1) получим неправильный [точнее, не соответствующий выбору в качестве собственной функции оператора импульса именно функции (3.2.19), а не альтернативного выражения со знаком «минус» в показателе экспоненты]:

$$\hat{p}_x \psi_{p_x}(t, x) = -p_x \psi_{p_x}(t, x).$$

Следовательно, оператор (3.2.26) не является оператором импульса, если собственная функция оператора импульса выбрана в виде (3.2.19), (3.2.20).

Напротив, проделав ту же операцию с оператором (3.2.27), получим правильный результат (3.2.1). Таким образом, мы приходим к выводу, что оператор (3.2.27) есть искомый оператор импульса микрочастицы с одной степенью свободы.

Как мы видим, у оператора импульса  $\hat{p}_x$  — непрерывный спектр собственных значений в интервале  $-\infty \leq p_x \leq \infty$ . Этот результат — очевидное следствие непрерывности энергетического спектра свободной частицы (3.2.16) (см. последний абзац п/п. 3.2.2).

Наводящие рассуждения о сходстве функции Гамильтона классической частицы  $H(x, p_x)$  (3.2.23) и оператора Гамильтона квантовой частицы  $\hat{H}$  (3.2.24), которые позволили нам «угадать» вид оператора импульса  $\hat{p}_x$ , основаны на так называемом *принципе*

соответствия Н. Бора, смысл которого мы более подробно обсудим в дальнейшем.

Воздействие оператора импульса  $\hat{p}_x$  (3.2.27) на произвольную волновую функцию  $\psi(t, x)$  приводит к следующему результату:

$$\hat{p}_x \psi(t, x) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}.$$

### 3.2.4. Операторы проекций импульса микрочастицы и их общие собственные функции

У «нормальной» корпускулы, обладающей тремя степенями свободы, имеется три проекции вектора импульса  $\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$ . Им соответствуют три оператора проекций импульса микрочастицы:  $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ .

Волновая функция, описывающая состояние микрочастицы с определённым импульсом, т.е. с определёнными (не случайными) значениями всех трёх проекций вектора импульса, является *общей* собственной функцией операторов всех трёх проекций импульса:

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \psi_{p_x, p_y, p_z}(t, x, y, z) &= p_x \psi_{p_x, p_y, p_z}(t, x, y, z); \\ \hat{p}_y \psi_{p_x, p_y, p_z}(t, x, y, z) &= p_y \psi_{p_x, p_y, p_z}(t, x, y, z); \\ \hat{p}_z \psi_{p_x, p_y, p_z}(t, x, y, z) &= p_z \psi_{p_x, p_y, p_z}(t, x, y, z). \end{aligned} \quad (3.2.28)$$

Соотношения (3.2.28) можно записать в компактном виде:

$$\hat{p}_\alpha \psi_p(t, \mathbf{r}) = p_\alpha \psi_p(t, \mathbf{r}); \quad \alpha = x, y, z, \quad (3.2.29)$$

где использовано обозначение

$$\psi_p(t, \mathbf{r}) \equiv \psi_{p_x, p_y, p_z}(t, x, y, z).$$

Собственная функция трёх операторов проекций импульса  $\psi_p(t, \mathbf{r})$  должна удовлетворять тем же условиям, что и в случае одной степени свободы (п/п. 3.2.2):

- описывать состояние свободной частицы, на которую не действуют никакие силы, а потенциальная энергия постоянна и равна  $\Phi_0$ ;
- быть пространственно – периодической с периодом, равным длине волны де Бройля

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}; \quad p = |\mathbf{p}|; \quad (3.2.30)$$

- и, наконец, предсказывать равновероятность любых положений микрочастицы в пространстве:

$$|\psi_p(t, \mathbf{r})|^2 = \text{const.} \quad (3.2.31)$$

Искомая функция имеет вид, аналогичный (3.2.6):

$$\psi_{\mathbf{p}}(t, \mathbf{r}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}). \quad (3.2.32)$$

Пространственная часть волновой функции (3.2.32)

$$u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right) \equiv A \exp\left[\frac{i}{\hbar} (p_x x + p_y y + p_z z)\right] \quad (3.2.33)$$

[ср. с (3.2.19)] является частным решением стационарного уравнения Шрёдингера

$$\hat{H} u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = E u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \quad (3.2.34)$$

с оператором Гамильтона (2.2.19), аналогичным (3.2.24):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \Phi_0 \hat{1}. \quad (3.2.35)$$

Решение уравнения (3.2.34), (3.2.35), которое аналогично процедуре, описанной в п/п. 3.2.2, будет рассмотрено ниже.

Подставив волновую функцию (3.2.33) в уравнение Шрёдингера (3.2.34), (3.2.35), получим аналогичное (3.2.16) «классическое» соотношение, которое выражает энергию микрочастицы через её импульс и потенциальную энергию:

$$E = \Phi_0 + \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \equiv \Phi_0 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (3.2.36)$$

Формула (3.2.36) определяет классическую функцию Гамильтона микрочастицы, т.е. её энергию, выраженную через координаты и импульсы [в данном случае функция (3.2.36) от координат не зависит].

Легко видеть, что волновая функция (3.2.32), (3.2.33) удовлетворяет двум требованиям, сформулированным в начале этого подпункта.

- Вследствие постоянства энергии микрочастицы (3.2.36) её импульс также является интегралом движения, т.е. имеет определённые величину и направление.
- Квадрат модуля волновой функции (3.2.31) постоянен:

$$|\psi_{\mathbf{p}}(t, \mathbf{r})|^2 = |u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 = A^2 = \text{const.}$$

Убедиться в том, что волновая функция (3.2.32), (3.2.33) является пространственно – периодической, можно так же, как в одномерном случае (п/п. 3.2.2). Выберем одну из координатных осей — например, ось  $x$  — вдоль постоянного направления вектора импульса  $\mathbf{p}$ . В такой системе координат  $p_x = p$ ,  $p_y = p_z = 0$ , и трёхмерные функции (3.2.32), (3.2.33) примут в точности такой же вид, что и (3.2.19), (3.2.20). А пространственная периодичность одномерных функций (3.2.19), (3.2.20) с периодом, равным длине волны де Бройля (3.2.30), доказана в п/п. 3.2.2.



Теперь выясним вид операторов проекций импульса.

По аналогии с (3.2.36) (а фактически используя принцип соответствия Бора, который будет изложен ниже) можно записать и оператор Гамильтона микрочастицы — см. (3.2.24):

$$\hat{H} = \Phi_0 + \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m}. \quad (3.2.37)$$

Сравнивая (3.2.37) и (3.2.35), получим аналогичные (3.2.25) выражения для операторов квадрата импульса:

$$\hat{p}_\alpha^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2}; \quad \alpha = x, y, z. \quad (3.2.38)$$

Из (3.2.38) найдём искомые выражения операторов проекций импульса:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}; \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (3.2.39)$$

Выражения (3.2.39) имеют вид, который естественным образом обобщает соотношение (3.2.27) для одномерного случая.

Результатом воздействия любого из операторов (3.2.39) на произвольную функцию  $\psi(t, x, y, z) \equiv \psi(t, \mathbf{r})$  является выражение

$$\hat{p}_\alpha \psi(t, x, y, z) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha}; \quad \alpha = x, y, z.$$

Наконец, обсудим некоторые опущенные выше «технические» подробности.

Стационарное трёхмерное уравнение Шрёдингера с оператором Гамильтона (3.2.35)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u_p(\mathbf{r}) + \Phi_0 u_p(\mathbf{r}) = E u_p(\mathbf{r}) \quad (3.2.40)$$

представляется в виде

$$\Delta u_p(\mathbf{r}) = -k^2 u_p(\mathbf{r}), \quad (3.2.41)$$

где, как в (3.2.10), (3.2.11),

$$k^2 \equiv \frac{2m(E - \Phi_0)}{\hbar^2} > 0. \quad (3.2.42)$$

Уравнение (3.2.41) решается методом разделения переменных: неизвестная функция ищется в виде произведения трёх функций, каждая из которых зависит только от одной пространственной переменной:

$$u_p(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z). \quad (3.2.43)$$

Подставив (3.2.43) в (3.2.41), получим:

$$YZ \frac{d^2 X}{dx^2} + XZ \frac{d^2 Y}{dy^2} + XY \frac{d^2 Z}{dz^2} = -k^2 XYZ.$$

Разделим полученное соотношение на  $XYZ$ :

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} + \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -k^2. \quad (3.2.44)$$

Каждое из слагаемых в левой части равенства (3.2.44) зависит только от одного из трёх переменных  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , и все они независимы. В правой части равенства — константа. Поскольку равенство (3.2.44) должно выполняться при любых значениях указанных переменных, то каждое из слагаемых в левой части равенства (3.2.44) также равно константе:

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = -k_x^2; \quad \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = -k_y^2; \quad \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -k_z^2, \quad (3.2.45)$$

причём

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2. \quad (3.2.46)$$

Нетрудно убедиться, что каждое из слагаемых в левой части (3.2.46) неотрицательно — в противном случае нетривиальные решения уравнений (3.2.45) неограниченны при больших по модулю значениях координат и, следовательно, не могут быть волновыми функциями.

Дальнейшее решение каждого из трёх обыкновенных дифференциальных уравнений (3.2.44) выполняется так же, как в п/п. 3.2.2. В результате получаем частное решение

$$u_p(\mathbf{r}) = A \exp[i(k_x x + k_y y + k_z z)], \quad (3.2.47)$$

которое переходит в (3.2.33) при условии, что

$$k_\alpha = p_\alpha / \hbar; \quad \alpha = x, y, z \quad (3.2.48)$$

[ср. с (3.2.15)].

Приведенные в этом параграфе доказательства нельзя признать абсолютно строгими, а соотношения для операторов импульса и его собственных функций получены не столько благодаря безупречной математической логике, сколько путём правдоподобных рассуждений. Тем не менее, результаты этих рассуждений лежат в основе квантовой механики, и вытекающие из них следствия полностью соответствуют действительности.

### 3.2.5. Является ли свободная микрочастица «плоской волной»?

Функция вида (3.2.32), (3.2.47) хорошо известна в теории распространения волн (электромагнитных, акустических и др.) как *плоская волна*. Эта функция является простейшим решением *волнового уравнения*, описывающего процессы распространения акустических волн в однородных изотропных средах, а электромагнитных — в вакууме. Если  $\varphi(t, \mathbf{r})$  — полевая переменная (плотность вещества в акустическом поле, одна из проекций напряжённости электрического или магнитного поля в электромагнитном поле), то волновое уравнение имеет вид

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = c^2 \Delta \varphi, \quad (3.2.49)$$

где  $c$ , как мы увидим далее — скорость распространения волны.

Уравнение (3.2.49) без труда решается методом разделения переменных и имеет вид плоской волны

$$\varphi(t, \mathbf{r}) = A \exp[i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)] \equiv A \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (3.2.50)$$

причём

$$\omega^2 / k^2 = c^2; \quad k = |\mathbf{k}|. \quad (3.2.51)$$

Величина  $\omega$  в (3.2.50) представляет собой *угловую частоту* колебаний полевой переменной, а  $k$  называется *волновым вектором*. Его абсолютная величина связана с длиной распространяющейся в пространстве волны  $\lambda$  (3.2.50) соотношением [см. (1.4.6), (1.4.7)]:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (3.2.52)$$

Соотношение (3.2.50) по форме действительно совпадает с волновой функцией свободной частицы (3.2.32), (3.2.33), если, помимо соотношения Эйнштейна – де Бройля (1.4.5), (3.2.48)

$$p = \hbar k, \quad (3.2.53)$$

принять связь между частотой и энергией

$$E = \hbar \omega, \quad (3.2.54)$$

по форме напоминающую формулу Планка – Эйнштейна (1.4.3), (1.4.10).

Рассмотренная аналогия провоцирует вопрос: поскольку плоская волна (3.2.50) описывает реальный физический волновой процесс, протекающий в пространстве и во времени, не описывает ли и волновая функция свободной частицы (3.2.32), (3.2.33) реальное распространение микрочастицы?

Ответ на этот вопрос категорически отрицателен, т.к. утвердительный ответ привёл бы к нелепым выводам. В самом деле: рассмотрим *поверхность постоянной фазы* волны (3.2.50)

$$\delta(t, \mathbf{r}) \equiv \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t = \text{const.} \quad (3.2.55)$$

В фиксированный момент времени  $t$  соотношение (3.2.55) представляет собой уравнение плоскости, нормальной вектору  $\mathbf{k}$ . Именно поэтому волна (3.2.50) называется плоской. С течением времени поверхность постоянной фазы — *фазовая плоскость* или *фронт волны* — смещается со скоростью

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{c}_p, \quad (3.2.56)$$

которую можно вычислить, продифференцировав (3.2.55) по времени:

$$\mathbf{k} \cdot \dot{\mathbf{r}} = \omega. \quad (3.2.57)$$

Скорость (3.2.56) распространения фазовой плоскости или фронта волны (3.2.50) называется *фазовой скоростью*.

Поскольку в процессе движения фронт волны остаётся всё время перпендикулярным волновому вектору  $\mathbf{k}$ , то фазовая скорость направлена вдоль волнового вектора, т.е.

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{c}_p = D\mathbf{k}, \quad (3.2.58)$$

где  $D$  — константа. Подставим (3.2.58) в (3.2.57), вычислим эту константу:

$$D = \omega / k^2.$$

Подставляя полученное соотношение в правую часть (3.2.58), получим формулу для подсчёта фазовой скорости:

$$c_p = \omega k / k^2. \quad (3.2.59)$$

Абсолютная величина фазовой скорости (3.2.59), как видно из (3.2.51), действительно равна константе  $c$  из волнового уравнения (3.2.49), так что

$$c_p = c k / k = c s, \quad (3.2.60)$$

где  $s$  — единичный вектор в направлении распространения волны:

$$k = ks.$$

А теперь доведём до конца аналогию между свободной частицей и плоской волной, подставив выражения для импульса (3.2.53) и энергии (3.2.54) частицы в соотношение (3.2.51),



связывающее волновое число, частоту и скорость распространения плоской волны. Получим:

$$E = pc. \quad (3.2.61)$$

Формула (3.2.61) похожа на соотношение, вытекающее из формулы теории относительности (1.2.14) для ультрарелятивистской частицы, у которой масса покоя  $m$  равна нулю, а скорость  $c$  равна скорости распространения света в вакууме. На самом деле, как показано в п/п. 1.2.8, релятивистская формула получится, если в правую часть (3.2.61) добавить произвольную постоянную  $E_0$ , с точностью до которой определяется энергия.

Поскольку нами, напротив, рассматривается нерелятивистская квантовая механика, и волновая функция (3.2.32), (3.2.33) описывает состояние нерелятивистской частицы с конечной массой покоя, то скорость частицы  $c$  не имеет никакого отношения к скорости света, и правильным должно быть соотношение между скоростью и импульсом  $p = mc$ . Но тогда из (3.2.61) получим нелепое соотношение

$$E = p^2 / m. \quad (3.2.62)$$

Вместе с тем из уравнения Шрёдингера, решением которого является волновая функция свободной частицы, следует совершенно другое соотношение между энергией и импульсом (3.2.36):

$$E = \Phi_0 + \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \equiv \Phi_0 + \frac{p^2}{2m}.$$

И если это соотношение имеет совершенно очевидный смысл, то выражение (3.2.62), полученное в предположении, что свободная частица — это плоская волна, напротив, столь же бессмысленно.

Заметим, кстати, что поскольку энергия всегда определена лишь с точностью до произвольного начала отсчёта, а частота, определяющая пространственную периодичность процесса, напротив, есть величина вполне определённая, то соотношение (3.2.54), будто бы связывающее энергию частицы с частотой волны, также не имеет никакого смысла.

Итак, никакого распространения чего бы то ни было в пространстве волновая функция микрочастицы не описывает. Об этом выше (см. п. 1.4) мы уже говорили.

## **Вопросы для самопроверки**

3.2.1. Почему собственная функция оператора импульса должна описывать состояние свободной микрочастицы и равномерное распределение вероятности любых её положений в пространстве?

3.2.2. Как происходит отбор частных решений уравнения Шрёдингера для свободной микрочастицы при построении собственной функции оператора импульса?

3.2.3. В чём состоит принцип соответствия Н. Бора и как он используется при построении оператора импульса?

3.2.4. Благодаря чему удаётся применить метод разделения переменных при решении уравнения Шрёдингера для свободной микрочастицы с тремя степенями свободы и как выбираются частные решения для построения общей собственной функции операторов трёх проекций импульса?

### **3.3. Оператор координаты**

#### **3.3.1. Свойства собственной функции оператора координаты в одномерном случае**

Оператор координаты  $\hat{x}$  представляет в математическом аппарате квантовой механики динамическую переменную, которая определяет положение микрочастицы в пространстве, т.е. её координату. Однако следует иметь в виду, что переменная  $x$ , от которой зависит волновая функция микрочастицы  $\psi(t, x)$  — объект воздействия оператора  $\hat{x}$ , — это не координата микрочастицы, а независимая пространственная переменная.

Собственная функция  $\psi_\xi(t, x)$  оператора координаты  $\hat{x}$  и соответствующее ей собственное значение  $\xi$  в соответствии с определением (3.1.3) (п/п. 3.1.2) удовлетворяют равенству

$$\hat{x} \psi_{\xi}(t, x) = \xi \psi_{\xi}(t, x). \quad (3.3.1)$$

Очевидно, у оператора  $\hat{x}$  — непрерывный спектр собственных значений  $\xi$ ,  $-\infty < \xi < \infty$ , и каждому из них принадлежит «своя» собственная функция  $\psi_{\xi}(t, x)$ , которая описывает состояние частицы, находящейся в точке  $x = \xi$ . Заметим, что эти собственные функции взаимно ортогональны (см. ниже п/п. 3.3.3), чего и требует общая теория самосопряжённых операторов (гл. 4).

Функция  $\psi_{\xi}(t, x)$  должна описывать такое состояние микрочастицы, когда её положение в пространстве (одномерном) в момент времени  $t$  является *строго определённым* и соответствует значению координаты  $x = \xi$ . При этом достоверно известно, что нигде в другом месте частица не находится, т.е. для всех  $x$  из интервала  $-\infty < x < \infty$ , кроме  $x = \xi$ ,  $\psi_{\xi}(t, x) = 0$ . Вместе с тем значение этой функции  $\psi_{\xi}(t, \xi)$ , очевидно, должно быть отличным от нуля. В противном случае получится, что функция  $\psi_{\xi}(t, x)$  тождественно равна нулю, т.е. состояния микрочастицы, в котором её координата имеет определённое значение, не существует — а это противоречит здравому смыслу.

Более того: рассмотрим интеграл

$$J = \int_a^b \psi_{\xi}(t, x) f(x) dx, \quad (3.3.2)$$

где  $f(x)$  — любая функция, непрерывная при  $x = \xi$ . Если значение  $\xi$  не содержится в области интегрирования  $(a, b)$ , то подынтегральная функция (3.3.1) в пределах этой области тождественно равна нулю, а вместе с этим и  $J$ . Если же  $a < \xi < b$ , а  $\psi_\xi(t, \xi)$  — любое конечное число, то интеграл (3.3.2), очевидно равен нулю.

Но если выбрать область интегрирования в (3.3.2) равной области определения волновой функции, т.е.  $a = -\infty$ ,  $b = \infty$ , то получится, что функция  $\psi_\xi(t, x)$  ортогональна *любой* функции  $f(x)$ , что нелепо.

Следовательно, при  $x = \xi$  функция  $\psi_\xi(t, x)$  должна принимать бесконечное значение, такое, для которого интеграл (3.3.2) был бы отличен от нуля.

Ясно, что не существует аналитической функции, которая описывала бы подобное причудливое поведение рассматриваемого объекта.

### 3.3.2. Дельта – функция Дирака

Чтобы преодолеть возникшее противоречие в математическом аппарате квантовой механики, П.А.М. Дирак ввёл принципиально новую функцию, обозначив её  $\delta(x)$ . В дальнейшем эта функция была названа его именем.

По определению, дельта – функция Дирака равна нулю при всех значениях аргумента  $x$ , кроме  $x = 0$ . При  $x = 0$  значение этой функции бесконечно велико — «настолько», чтобы, как уже было

сказано в п/п. 3.3.1, интеграл от неё по всей области изменения аргумента был бы не нулём, а конечной величиной. Эта величина принята равной единице. Таким образом,

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0; \\ \infty, & x = 0. \end{cases}; \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (3.3.3)$$

Если заменить в интеграле (3.3.3) бесконечные пределы интегрирования любыми конечными  $(a, b)$ , такими, что  $a < 0 < b$ , значение интеграла, очевидно, не изменится, т.к. при этом мы удалили нулевые значения подынтегральной функции.

Из определения (3.3.3) следует, что интеграл в пределах  $(-\infty, \infty)$  от произведения  $\delta$ -функции на любую функцию  $f(x)$ , непрерывную при  $x = 0$ , конечен и равен

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0). \quad (3.3.4)$$

Доказать (3.3.4), используя свойства  $\delta$ -функции (3.3.3), можно так. Заменим в левой части (3.3.4) бесконечные пределы интегрирования конечными  $(a, b)$ , такими, что  $a < 0 < b$ . Тогда вследствие примечания к определению (3.3.3)

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = \int_a^b f(x) \delta(x) dx.$$

Теперь устремим в правой части полученного равенства оба предела интегрирования к нулю, а после этого воспользуемся теоремой о среднем:

$$\int_a^b f(x)\delta(x)dx = f(0)\int_a^b \delta(x)dx = f(0) \cdot 1$$

[см. примечание к определению]. В итоге получаем равенство (3.3.4).

Математики встретили новацию физика Дирака в штыки, характеризуя её как математическое хулиганство. Однако спустя некоторое время оказалось, что, используя  $\delta$ –функцию, удаётся находить решения таких задач математической физики, которые раньше считались не решаемыми. В математике сформировалось новое направление — теория обобщённых функций. А почётное место «самой главной» обобщённой функции заняла  $\delta$ –функция Дирака.

Хотя  $\delta$ –функция (3.3.3) не похожа на обычные функции, её можно «построить» как предел последовательности обычных непрерывных функций  $\varphi(x, \alpha)$ , зависящих от параметра  $\alpha$ .

Каждая из этих функций должна быть чётной относительно точки  $x = 0$ , обладать при  $x = 0$  максимумом  $\varphi(0, \alpha)$ , а при  $|x| \rightarrow \infty$  — быстро обращаться в нуль. При  $\alpha \rightarrow \infty$  максимум функции  $\varphi(x, \alpha)$  должен неограниченно возрастать,  $\varphi(0, \alpha) \rightarrow \infty$ . Однако при любом значении параметра  $\alpha$  должно выполняться равенство

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x, \alpha) dx = 1. \quad (3.3.5)$$

Мы видим, что функции  $\varphi(x, \alpha)$  имеют вид пиков. По мере увеличения параметра  $\alpha$  вследствие условия (3.3.4) и возрастания высоты пика  $\varphi(0, \alpha)$  ширина пика должна уменьшаться и при  $\alpha \rightarrow \infty$  стремиться к нулю. Таким образом, действительно, при  $\alpha \rightarrow \infty$  поведение рассматриваемых функций всё более напоминает поведение  $\delta$ –функции (3.3.5), так что

$$\varphi(x, \alpha) \xrightarrow{\alpha \rightarrow \infty} \delta(x). \quad (3.3.6)$$

Одним из примеров функций, предел последовательности которых сходится к  $\delta$ –функции, является хорошо известная из теории вероятностей гауссова экспонента

$$\varphi(x, \alpha) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha x^2}. \quad (3.3.7)$$

Выполнение равенства (3.3.5) обеспечивает знаменитый интеграл Пуассона:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$$



Разумеется, можно построить сколько угодно равноценных или эквивалентных представлений  $\delta$ – функции  $\varphi(x, \alpha)$ . Выбор конкретного представления определяется соображениями удобства.

Далее мы построим ещё одно полезное представление  $\delta$ – функции.

### 3.3.3. Собственная функция оператора координаты и свойство оператора координаты в одномерном случае

Сказанное в п/п. 3.3.1 и свойства  $\delta$ – функции, описанные в п/п. 3.3.2, наводят на мысль, что собственная функция оператора координаты  $\psi_\xi(t, x)$  просто выражается через  $\delta$ – функцию:

$$\psi_\xi(t, x) = e^{-i\alpha(t)} \delta(x - \xi), \quad (3.3.7)$$

где  $\alpha(t)$  — некоторая действительная функция времени.

Запишем выражение для скалярного произведения двух собственных функций координаты, которые принадлежат разным собственным значениям (см. ниже п/п. 4.1.2):

$$\begin{aligned} \langle \xi | \xi' \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\xi^*(t, x) \psi_{\xi'}(t, x) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - \xi) \delta(x - \xi') dx = \delta(\xi' - \xi). \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

[Интеграл от произведения  $\delta$ –функций в области непрерывности одной из них вычисляется по соотношению (3.3.3)].

При  $\xi \neq \xi'$  выражение (3.3.8) равно нулю, и, следовательно, рассматриваемые функции взаимно ортогональны:

$$\langle \xi | \xi' \rangle = 0; \quad \xi \neq \xi'. \quad (3.3.9)$$

Вместе с тем, как следует из (3.3.8), норма собственной функции оператора координаты

$$\langle \xi | \xi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\xi}^*(t, x) \psi_{\xi}(t, x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{\xi}(t, x)|^2 dx$$

не определена, что имеет место для собственных функций любых операторов с непрерывным спектром собственных значений.

Действие оператора координаты  $\hat{x}$  на любую функцию  $\psi(t, x)$  определяется равенством

$$\hat{x} \psi(t, x) = x \psi(t, x). \quad (3.3.10)$$

На первый взгляд может показаться, что соотношение (3.3.10) — это уравнение на собственные функции и собственные значения оператора  $\hat{x}$ , записанное в соответствии с определением (3.1.3) (п/п. 3.1.2). Однако в действительности  $x$  в правой части (3.3.10) — это вовсе не собственное значение микрочастицы, указывающее её

положение в пространстве, а аргумент функции  $\psi(t, x)$ , так что  $x\psi(t, x)$  — новая функция, полученная в результате воздействия рассматриваемого оператора на исходную функцию.

Соотношение (3.3.1) естественным образом следует из свойства оператора координаты (3.3.10). В самом деле: подставим функцию  $\psi_\xi(t, x)$  в уравнение (3.3.10). Поскольку функция  $\psi_\xi(t, x)$  отлична от нуля только при  $x = \xi$ , в правой части уравнения (3.3.10), не нарушая равенства, можно заменить переменную  $x$  значением параметра  $\xi$ , и тогда оно станет тождественным соотношению (3.3.1).

Доказать свойство (3.3.10) из приведенных выше соотношений в рамках используемого в данном пособии подхода Э Шрёдингера, в основе которого — волновая функция  $\psi(t, x)$ , невозможно. Это удаётся естественным образом сделать только на основе матричного подхода В. Гайзенберга и подхода П.А.М. Дирака, использующего для описания микросистем абстрактные векторы состояния.

### **3.3.4. Операторы координат микрочастицы и их общая собственная функция**

Каждую декартову координату  $x, y, z$  в квантовой механике представляет соответствующий оператор  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ . Сокращая обозначения, будем писать, что координаты  $x_\alpha$  представляют операторы  $\hat{x}_\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$  или  $1, 2, 3$ ).

Аналогично (3.3.10), оператор координаты  $\hat{x}_\alpha$  следующим образом воздействует на волновую функцию  $\psi(t, x, y, z)$ :

$$\hat{x}_\alpha \psi(t, x, y, z) = x_\alpha \psi(t, x, y, z); \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (3.3.11)$$

Например,

$$\hat{y} \psi(t, x, y, z) = y \psi(t, x, y, z).$$

Общая собственная функция всех трёх операторов координат  $\psi_{\xi, \eta, \zeta}(t, x, y, z)$  описывает такое состояние микрочастицы, когда в момент времени  $t$  она находится в определённой точке пространства с координатами  $x = \xi(t)$ ,  $y = \eta(t)$ ,  $z = \zeta(t)$ . При этом, аналогично (3.3.1),

$$\hat{x}_\alpha \psi_{\xi, \eta, \zeta}(t, x, y, z) = x_\alpha \psi_{\xi, \eta, \zeta}(t, x, y, z); \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (3.3.12)$$

Функция  $\psi_{\xi, \eta, \zeta}(t, x, y, z)$  отлична от нуля только в точке  $x = \xi$ ,  $y = \eta$ ,  $z = \zeta$  и равна нулю при любых остальных значениях пространственных аргументов. Аналогично (3.3.7)

$$\psi_{\xi, \eta, \zeta}(t, x, y, z) = e^{-i\alpha(t)} \delta(x - \xi) \delta(y - \eta) \delta(z - \zeta). \quad (3.3.13)$$

## **Вопросы для самопроверки**

3.3.1. Какое состояние микрочастицы описывает собственная функция оператора координаты?

3.3.2. Каковы основные свойства дельта – функции Дирака?

3.3.3. Как воздействует оператор координаты на произвольную волновую функцию и на свою собственную функцию?

3.3.4. Как записать общую собственную функцию операторов трёх декартовых координат микрочастицы?

## **3.4. Оператор Гамильтона**

### **3.4.1. Принцип соответствия Н. Бора**

Хотя квантовомеханическое описание микросистем (волновая функция, уравнение Шрёдингера) не имеет практически ничего общего с описанием на основе классической механики (траектория, уравнения Ньютона), но, как мы неоднократно подчёркивали, при определённых условиях (см. п/п. 1.4.7) квантовые эффекты оказываются несущественными, и результаты квантового описания должны совпасть с выводами классической механики. Для этого, очевидно, математический аппарат квантовой механики должен быть устроен надлежащим образом, содержа возможность перехода к классическому описанию в соответствующем пределе.

Требования, которым должен удовлетворять математический аппарат квантовой механики (а ещё шире — квантовой физики), чтобы обеспечить переход к классическому описанию микросистем, сформулировал Н. Бор. Они называются *принципом соответствия*.

Существуют различные формулировки принципа соответствия, зависящие от того, к какой конкретной физической ситуации этот принцип применяется. Мы предложим простую, хотя не универсальную и не вполне строгую формулировку, которая, впрочем, вполне удовлетворяет наши потребности и легко обобщается. Эта формулировка представляет собой правило, как, зная вид динамической переменной некоторой системы в классической механике, построить квантовый оператор, представляющий данную динамическую переменную.

Пусть интересующая нас динамическая переменная, обладающая  $f$  степенями свободы, является определённой функцией координат  $q_1, q_2, \dots, q_f$  и «сопряжённых» (т.е. относящихся к тем же степеням свободы механической системы) импульсов  $p_1, p_2, \dots, p_f$ , а также, возможно, времени  $t$ :

$$F \equiv F(t, q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f). \quad (3.4.1)$$

Тогда оператор  $\hat{F}$ , представляющий данную динамическую переменную в квантовой механике, должен быть *такой же* функцией операторов координат и импульсов:

$$\hat{F} \equiv F(t, \hat{q}_1, \hat{q}_2, \dots, \hat{q}_f, \hat{p}_1, \hat{p}_2, \dots, \hat{p}_f). \quad (3.4.2)$$

Необходимо пояснить, что означает «функция оператора».

В п/п. 3.2.3 мы уже познакомились с функцией «квадрат оператора». Обобщая приведенные там рассуждения, дадим определение оператора «оператор в произвольной целочисленной степени  $n$ ». Если оператором  $\hat{\xi}$  воздействовать на какую-либо функцию  $\psi(t, q^f)$  (см. п/п. 2.2.5), получим другую функцию  $\psi_1(t, q^f)$ . Воздействовав на  $\psi_1(t, q^f)$  снова оператором  $\hat{\xi}$ , получим ещё одну функцию  $\psi_2(t, q^f)$  — и т.д. Результатом  $n$  – го шага будет функция  $\psi_n(t, q^f)$ .

Оператор  $\hat{\xi}^n$ , который, подействовав на  $\psi(t, q^f)$ , сразу даёт  $\psi_n(t, q^f)$ , по определению, и есть « $n$  – я степень оператора  $\hat{\xi}$ »:

$$\hat{\xi}^n \psi(t, q^f) \equiv \hat{\xi}(\hat{\xi}(\dots n \text{ раз}) \psi(t, q^f)) = \psi_n(t, q^f). \quad (3.4.3)$$

Теперь рассмотрим произвольную функцию  $f(\xi)$  и разложим её в ряд Тейлора:

$$f(\xi) = f(\xi_0) + f'(\xi_0)(\xi - \xi_0) + \frac{1}{2!} f''(\xi_0)(\xi - \xi_0)^2 + \frac{1}{3!} f'''(\xi_0)(\xi - \xi_0)^3 + \dots$$

Оператор  $f(\hat{\xi})$  называется функцией оператора  $\hat{\xi}$ , если результатом его воздействия на произвольную функцию  $\psi(t, q^f)$  является следующее выражение, содержащее степени оператора  $\hat{\xi}$  и единичный оператор  $\hat{1}$ :

$$f(\hat{\xi}) \psi(t, q^f) = f(\xi_0) \psi(t, q^f) + f'(\xi_0)(\hat{\xi} - \xi_0 \hat{1}) \psi(t, q^f) + \\ + \frac{1}{2!} f''(\xi_0)(\hat{\xi} - \xi_0 \hat{1})^2 \psi(t, q^f) + \frac{1}{3!} f'''(\xi_0)(\hat{\xi} - \xi_0 \hat{1})^3 \psi(t, q^f) + \dots \quad (3.4.4)$$

Поскольку равенство (3.4.4) справедливо для любой функции  $\psi(t, q^f)$ , то его можно переписать в «чисто» операторном виде:

$$f(\hat{\xi}) \equiv f(\xi_0) + f'(\xi_0)(\hat{\xi} - \xi_0 \hat{1}) + \frac{1}{2!} f''(\xi_0)(\hat{\xi} - \xi_0 \hat{1})^2 + \\ + \frac{1}{3!} f'''(\xi_0)(\hat{\xi} - \xi_0 \hat{1})^3 + \dots \quad (3.4.5)$$

Теперь, используя определение (3.4.5), на основе принципа соответствия (3.4.2) с некоторыми оговорками (которых мы пока для простоты не будем делать) можно сконструировать оператор любой динамической переменной.

Разумеется, справедливость принципа соответствия Н. Бора в конечном счёте можно проверить, только сравнив полученные с его использованием результаты с экспериментом. Поскольку этот принцип используется в квантовой механике при конструировании любых операторов, более сложных, чем операторы координаты и



импульса, то речь фактически идёт о проверке соответствия действительности самой квантовой механики, а этот вопрос уже неоднократно обсуждался выше.

### 3.4.2. Оператор кинетической энергии микрочастицы

Этот оператор для случая микрочастицы с одной степенью свободы уже был «де факто» введен в п/п. 3.2.3 — см. (3.2.24):

$$\hat{K} = \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2. \quad (3.4.6)$$

Действие оператора (3.4.6) на любую функцию  $\psi(t, x)$ , как видно из (3.2.22), сводится к следующему:

$$\hat{K} \psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (3.4.7)$$

Следовательно, в «координатном представлении» оператор кинетической энергии имеет вид

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (3.4.8)$$

Для «обычной» микрочастицы с тремя степенями свободы тот же оператор имеет вид (3.2.37) (см. п/п. 3.2.4):

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m}. \quad (3.4.9)$$

Действие оператора (3.4.9) на любую функцию  $\psi(t, \mathbf{r})$  приводит к результату

$$\hat{K} \psi(t, \mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi. \quad (3.4.10)$$

Таким образом, в «координатном представлении»

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \quad (3.4.11)$$

Фактически при записи приведенных выше выражений уже использовался принцип соответствия (3.4.1), (3.4.2).

### **3.4.3. Оператор потенциальной энергии микрочастицы**

В соответствии с определением оператора координаты  $\hat{x}$  (3.3.1), а также с учётом материала, изложенного в п/п. 3.4.2,

результатом действия оператора  $f(t, \hat{x})$  любой функции координаты  $f(t, x)$  (3.4.5) на произвольную волновую функцию  $\psi(t, x)$  получится новая функция  $f(t, x) \psi(t, x)$ :

$$f(t, \hat{x}) \psi(t, x) = f(t, x) \psi(t, x). \quad (3.4.12)$$

Если потенциальная энергия микрочастицы с одной степенью свободы равна  $\Phi(t, x)$ , то, согласно принципу соответствия (3.4.1), (3.4.2), оператор потенциальной энергии равен

$$\hat{\Phi} = \Phi(t, \hat{x}). \quad (3.4.13)$$

Отсюда в соответствии с (3.4.12)

$$\hat{\Phi} \psi(t, x) = \Phi(t, x) \psi(t, x). \quad (3.4.14)$$

Из (3.4.14) видно, что оператор потенциальной энергии в «координатном представлении» имеет вид

$$\hat{\Phi} = \Phi(t, x) \hat{1}, \quad (3.4.15)$$

где  $\hat{1}$  — единичный оператор (2.2.17).

Если потенциальная энергия «реальной» микрочастицы с тремя степенями свободы есть  $\Phi(t, x, y, z) \equiv \Phi(t, \mathbf{r})$ , то, аналогично (3.4.13), оператор потенциальной энергии есть

$$\hat{\Phi} = \Phi(t, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}). \quad (3.4.16)$$

Тогда, аналогично (3.4.14), действие оператора (3.4.16) на любую волновую функцию микрочастицы  $\psi(t, \mathbf{r}) \equiv \psi(t, x, y, z)$  сводится к следующему:

$$\hat{\Phi} \psi(t, \mathbf{r}) = \Phi(t, \mathbf{r}) \psi(t, \mathbf{r}). \quad (3.4.17)$$

Из (3.4.17) видно, что оператор потенциальной энергии в «координатном представлении», аналогично (3.4.15), имеет вид

$$\hat{\Phi} = \Phi(t, \mathbf{r}) \hat{1}, \quad (3.4.18)$$

Точно так же на волновую функцию будет действовать любой оператор, являющийся функцией операторов координат.

#### 3.4.4. Оператор Гамильтона микрочастицы

В классической механике функцией Гамильтона называется динамическая переменная, которая определяет энергию механической системы как функцию обобщённых (а как частный случай — и декартовых) координат и импульсов:

$$E = H(t, q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f). \quad (3.4.19)$$

Функция Гамильтона (3.4.19) является суммой кинетической энергии, зависящей в общем случае как от импульсов, так и от координат, и потенциальной энергии, которая зависит только от координат и, в общем случае, от времени.

Функция Гамильтона микрочастицы (см. п/п. 1.2.7) имеет вид (1.2.11), (1.2.12):

$$H(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = K(\mathbf{p}) + \Phi(t, \mathbf{r}); \quad K(\mathbf{p}) = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2. \quad (3.4.20)$$

Согласно принципу соответствия оператор Гамильтона микрочастицы получим, заменив в (3.4.20) координаты и проекции импульса их операторами. Тогда с учётом изложенного в п/пп. 3.4.2 и 3.4.3 и используя соотношения (3.4.9) – (3.4.11) и (3.4.16) – (3.4.18):

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{\Phi} \quad (3.4.21)$$

или, в координатном представлении,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \Phi(t, \mathbf{r}) \hat{1}. \quad (3.4.22)$$

Именно этот оператор (3.4.22) был использован ранее под названием оператора Гамильтона в п/п. 2.2.5 для операторной

записи уравнения Шрёдингера (2.2.18), (2.2.19). А в п/п. 2.3.2 было показано, что если оператор потенциальной энергии в (3.4.21), (3.4.22) явно не зависит от времени, то микрочастица находится в стационарном состоянии, причём волновая функция микрочастицы, описывающая это состояние, является собственной функцией оператора (3.4.22). В соответствии с принятыми в п/п. 3.1.2 обозначениями запишем соответствующее соотношение в виде

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0: \quad \hat{H} \psi_E(t, \mathbf{r}) = E \psi_E(t, \mathbf{r}). \quad (3.4.23)$$

В п/п. 2.3.2 было доказано, что собственная функция оператора Гамильтона  $\psi_E(t, \mathbf{r})$ , удовлетворяющая уравнению (3.4.23), имеет вид (2.3.21)

$$\psi_E(t, \mathbf{r}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right) u_E(\mathbf{r}), \quad (3.4.24)$$

причём  $u_E(\mathbf{r})$  — также собственная функция оператора Гамильтона:

$$\hat{H} u_E(\mathbf{r}) = E u_E(\mathbf{r}), \quad (3.4.25)$$

отличающаяся от (3.4.24) только множителем, зависящим от времени, на который оператор Гамильтона «не действует».

Но в соответствии с общим правилом (п. 3.1), которое ставит в соответствие классической динамической переменной представляющий её в квантовой механике оператор, всякое собственное значение оператора энергии, которым в действительности и является оператор Гамильтона (см. соответствующее обсуждение в п/п. 2.4.1) — это возможное значение энергии микросистемы. Таким образом, величина  $E$  в уравнениях (3.4.24), (3.4.25) есть действительно энергия микросистемы — что мы и предполагали, рассматривая теорию стационарных состояний в п. 2.4.

### **Вопросы для самопроверки**

3.4.1. В чём состоит принцип соответствия Н. Бора и как он используется при построении оператора Гамильтона?

3.4.2. Как построить оператор кинетической энергии микрочастицы и системы микрочастиц?

3.4.3. Как построить оператор потенциальной энергии микрочастицы и системы микрочастиц?

3.4.4. Как записать уравнение Шрёдингера и стационарное уравнение Шрёдингера, используя оператор Гамильтона микросистемы?

## 4. СТАТИСТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИНАМИЧЕСКИХ ПЕРЕМЕННЫХ

### 4.1. Пространство волновых функций

#### 4.1.1. Функциональное пространство

*Функциональное пространство* — основное понятие функционального анализа, области математики, активно используемой в математическом аппарате квантовой механики.

Функциональное пространство — обобщение понятия векторного пространства. В трёхмерном пространстве вектор — это упорядоченная совокупность трёх чисел — проекций на оси координат:  $\mathbf{a}\{a_x, a_y, a_z\}$ . Используя вместо «содержательных» обозначений координатных осей просто номера, то же можно записать в виде  $\mathbf{a}\{a_1, a_2, a_3\}$ . В  $n$  – мерном векторном пространстве вектор определяется уже  $n$  проекциями:  $\mathbf{a}\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ . Возможны и бесконечномерные векторные пространства, в которых  $n = \infty$ . Однако и в этом случае набор координатных осей пространства, а следовательно, и проекций вектора, образует счётное множество.

Очень важным для установления «взаимоотношений» между векторами — элементами векторного пространства — является понятие *скалярного произведения* векторов. В трёхмерном



пространстве скалярное произведение двух векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$  определяется соотношением

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z \equiv \sum_{\alpha=1}^3 a_{\alpha} b_{\alpha};$$

в  $n$  – мерном пространстве

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{\alpha=1}^n a_{\alpha} b_{\alpha}.$$

Если проекциями векторов являются комплексные числа (комплексное векторное пространство), то скалярное произведение векторов представляет собой комплексное число, которое зависит от порядка сомножителей:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{\alpha=1}^n (a_{\alpha})^* b_{\alpha}; \quad \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} = \sum_{\alpha=1}^n (b_{\alpha})^* a_{\alpha}; \quad \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^*. \quad (4.1.1)$$

Теперь по аналогии с «обычными» векторными пространствами введём понятие функционального пространства.

Функцию  $f(x)$ , которая определена в области значений аргумента  $a \leq x \leq b$ , можно приближённо задать в виде последовательности  $n$  её значений в  $n$  узловых «точках»

$$x_1 < x_2 < \dots < x_n; \quad x_1 = a; \quad x_n = b. \quad (4.1.2)$$

При этом функция оказывается  $n$  – мерным вектором. Проекциями такого вектора являются значения функции в узловых точках (4.1.2):

$$f(x)\{f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n)\}. \quad (4.1.3)$$

Такое приближённое представление функции всем хорошо известно — это просто задание функции в виде таблицы.

Множество различных функций (4.1.3), заданных на одной и той же узловой сетке (4.1.2), образует  $n$  – мерное векторное пространство.

Очевидно, подобное представление функций тем точнее, чем больше  $n$ . Совершенно точным оно станет, если в качестве «узлов» таблицы будут использованы все точки отрезка  $(a, b)$ , т.е. всё множество значений аргумента  $x$  из области определения функции. Но это множество *несчётно*, т.е. образует *континуум*. Для «нумерации» элементов этого множества уже невозможно использовать натуральные числа, т.к. их «не хватит». Поэтому с этой целью используются «просто» сами значения аргумента функции  $x$ .

Векторное пространство, в котором векторами в указанном смысле являются всевозможные функции, заданные в одной и той же области определения, и есть функциональное пространство.

### 4.1.2. Скалярное произведение функций

Теперь рассмотрим две, вообще говоря, комплексные функции действительного аргумента  $f(x)$  и  $g(x)$  — элементы одного и того же функционального пространства. По аналогии с (4.1.1) определим скалярное произведение этих «векторов», просто заменив сумму по всем компонентам (проекциям) интегралом по аргументу:

$$\langle f | g \rangle \equiv (f, g) \equiv \int_a^b f^*(x)g(x)dx. \quad (4.1.4)$$

В левой части этого определения записаны два обозначения скалярного произведения функций, которые используются в разных источниках. Мы будем пользоваться первым из них, которое ввёл П.А.М. Дирак.

В математическом аппарате квантовой механики будут рассматриваться скалярные произведения волновых функций, описывающих различные состояния некоторой микросистемы. Скалярное произведение двух таких функций  $\varphi(t, q)$  и  $\psi(t, q)$  в соответствии с определением (4.1.4) запишем в виде:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^*(t, q)\psi(t, q)dq. \quad (4.1.5)$$

В (4.1.5) буквой  $q$  для краткости обозначена совокупность всех  $f$  координат, от которых зависят волновые функции рассматриваемой

микросистемы (в гл. 2 с этой целью мы использовали сокращённое обозначение  $q^f$  — см. п/п. 2.2.5, но теперь мы его ещё больше упростим). Интеграл (4.1.5) —  $f$ –мерный, а символ  $dq$  представляет собой элемент объёма в этом  $f$ –мерном пространстве,

$$dq \equiv dq_1 dq_2 \dots dq_f.$$

Скалярное произведение комплексных функций (4.1.4), (4.1.5), как и векторов (4.1.1), зависит от порядка сомножителей:

$$\langle \varphi | \psi \rangle^* = \langle \psi | \varphi \rangle. \quad (4.1.6)$$

Скалярное произведение функции на саму себя называется *нормой* функции. Как видно из определения скалярного произведения (4.1.5), под знаком интеграла при этом оказывается квадрат модуля функции. Поэтому норма любой функции неотрицательна:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int |\psi(t, q)|^2 dq \geq 0. \quad (4.1.7)$$

Равенство нулю в (4.1.7) имеет место только в случае  $\psi \equiv 0$ .

Как и в векторной алгебре, две функции называются *ортгональными*, если их скалярное произведение равно нулю:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = 0. \quad (4.1.8)$$

### 4.1.3. Амплитуда и вероятность перехода

Скалярное произведение двух волновых функций называется в квантовой механике *амплитудой перехода* микросистемы из «начального» или «исходного» состояния, описываемого волновой функцией  $\psi(t, q)$ , в «конечное» состояние, описываемое волновой функцией  $\varphi(t, q)$ .

Квадрат модуля амплитуды перехода определяет *вероятность перехода* микросистемы из состояния, описываемого волновой функцией  $\psi(t, q)$ , в состояние, описываемое волновой функцией  $\varphi(t, q)$ :

$$w(\psi \rightarrow \varphi) = |\langle \varphi | \psi \rangle|^2. \quad (4.1.9)$$

Если набор функций  $\varphi(t, q)$  и описываемых ими возможных «конечных» состояний микросистемы образует счётное множество, то выражение (4.1.9) можно рассматривать буквально как вероятность перехода микросистемы в одно из них. В противном случае равенство (4.1.9) следует интерпретировать как величину, пропорциональную плотности вероятности перехода. Заметим, однако, что это не так просто сделать. Величина (4.1.9) безразмерна, что и требуется для вероятности; но плотность

вероятности имеет размерность, обратную размерности случайной величины.

Покажем, как из (4.1.9) следует обсуждавшаяся в п/п. 2.1.2 вероятностная интерпретация волновой функции (2.1.8). Рассмотрим для простоты случай микрочастицы с одной степенью свободы. Скалярное произведение (4.1.5) волновой функции такой системы на собственную функцию оператора координаты  $\psi_\xi(t, x)$  (п/п. 2.3.1) равно

$$\langle \psi_\xi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\xi^*(t, x) \psi(t, x) dx.$$

Поскольку функция  $\psi_\xi(t, x)$  отлична от нуля только при  $x = \xi$ , это выражение можно переписать в виде

$$\langle \psi_\xi | \psi \rangle = \psi(t, \xi) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\xi^*(t, x) dx.$$

Комплексно – сопряжённое от полученного выражения:

$$\langle \psi_\xi | \psi \rangle^* = \psi^*(t, \xi) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\xi(t, x) dx.$$

Перемножая два последних выражения, получим

$$|\langle \psi_\xi | \psi \rangle|^2 = \psi^*(t, \xi) \psi(t, \xi) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\xi^*(t, x) dx \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\xi(t, x) dx.$$

А теперь опустим одно из интегрирований по координате, чтобы получить плотность вероятности для случайной переменной  $\xi$ :

$$P(t, \xi) = |\psi(t, \xi)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_\xi(t, x)|^2 dx.$$

Но вследствие (3.3.6) под знаком интеграла здесь находится  $\delta$ -функция (3.3.5), интеграл от которой равен 1. Отсюда имеем равенство, тождественное (2.1.4):

$$P(t, \xi) = |\psi(t, \xi)|^2.$$

Покажем, что вероятности перехода (4.1.9) в обоих направлениях одинаковы, т.е.

$$w(\psi \rightarrow \varphi) = w(\varphi \rightarrow \psi). \quad (4.1.10)$$

В самом деле,

$$\begin{aligned} w(\psi \rightarrow \varphi) &= |\langle \varphi | \psi \rangle|^2 = \langle \varphi | \psi \rangle^* \langle \varphi | \psi \rangle = \\ &= \langle \varphi | \psi \rangle \langle \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^* \langle \psi | \varphi \rangle = |\langle \psi | \varphi \rangle|^2 = w(\varphi \rightarrow \psi). \end{aligned}$$

Соотношение (4.1.10) называется *принципом микроскопической обратимости*.

### **Вопросы для самопроверки**

4.1.1. Имеется ли аналогия между скалярным произведением векторов в векторном пространстве и функций в функциональном пространстве?

4.1.2. Всегда ли скалярное произведение волновых функций зависит от порядка сомножителей?

4.1.3. Как записать условие ортогональности волновых функций?

4.1.4. Какова вероятность перехода между состояниями микросистемы, если описывающие их волновые функции ортогональны?

4.1.5. Выведите соотношение, выражающее принцип микроскопической обратимости.

## **4.2. Сопряжённые и самосопряжённые операторы**

### **4.2.1. Сопряжённый оператор**

Любому оператору  $\hat{F}$ , представляющему какую-либо динамическую переменную некоторой микросистемы, можно



поставить в соответствие множество комплексных чисел. Каждый элемент этого множества определяется парой волновых функций микросистемы:

$$\langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle = \int \varphi^* (\hat{F} \psi) dq. \quad (4.2.1)$$

Величина (4.2.1) представляет собой скалярное произведение (4.1.5) волновой функции  $\varphi(t, q)$ , «стоящей» в левом углу «операторных скобок»  $\langle |$ , на волновую функцию  $\chi(t, q)$ :

$$\langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle = \langle \varphi(t, q) | \chi(t, q) \rangle.$$

Эта последняя функция, в свою очередь, является результатом воздействия оператора  $\hat{F}$  на волновую функцию  $\psi(t, q)$ , «стоящую» в правом углу «операторных скобок» (4.2.1).

$$\chi(t, q) = \hat{F} \psi(t, q).$$

Таким образом,

$$\langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle = \langle \varphi(t, q) | \hat{F} \psi(t, q) \rangle. \quad (4.2.2)$$

Комплексное число, определяемое выражениями (4.2.1), (4.2.2), иногда также удобно записывать в виде элемента некоторой

матрицы, «нумеруемого» вместо целочисленных индексов обозначениями соответствующих волновых функций:

$$F_{\varphi\psi} \equiv \langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle. \quad (4.2.3)$$

Рассмотрим другой оператор  $\hat{F}^+$  и, используя определение (4.2.1), поставим ему в соответствие следующую операторную скобку (или матричный элемент):

$$F_{\psi\varphi}^+ \equiv \langle \psi | \hat{F}^+ | \varphi \rangle = \int \psi^* (\hat{F}^+ \varphi) dq. \quad (4.2.4)$$

Вычислим комплексно сопряжённое от (4.2.4) выражение:

$$(F_{\psi\varphi}^+)^* \equiv \langle \psi | \hat{F}^+ | \varphi \rangle^* = [\int \psi^* (\hat{F}^+ \varphi) dq]^* = \int \psi (\hat{F}^+ \varphi)^* dq.$$

Если для любых двух функций  $\varphi(t, q)$  и  $\psi(t, q)$  выполняется равенство

$$\langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{F}^+ | \varphi \rangle^* \quad (4.2.5)$$

или

$$F_{\varphi\psi} = (F_{\psi\varphi}^+)^*, \quad (4.2.6)$$

то оператор  $\hat{F}^+$  называется *сопряжённым* оператору  $\hat{F}$ .

Сопряжённый оператор — это, в известном смысле, аналог комплексно сопряжённого числа. Следует, однако, понимать, что операция комплексного сопряжения ( $F^*$ ) применима только к числам, и поэтому для обозначения сопряжённого оператора мы используем другое обозначение ( $\hat{F}^+$ ).

Напомним читателям некоторые аналогии рассматриваемых операторных скобок или матричных элементов сопряжённых операторов с матрицами, которые изучаются в обычной линейной алгебре.

В теории матриц с вещественными (действительными) матричными элементами всякой матрице с элементами  $A_{\alpha\beta}$  можно поставить в соответствие *транспонированную* матрицу с элементами  $\tilde{A}_{\alpha\beta} = A_{\beta\alpha}$ . В этом случае матрица, сопряжённая по отношению к исходной, совпадает с транспонированной матрицей. Приведенное соотношение похоже на (4.2.6).

Если матричные элементы — комплексные числа, то матрицей, сопряжённой по отношению к исходной, называется транспонированная матрица с комплексно – сопряжёнными элементами:  $A_{\alpha\beta}^+ = (A_{\beta\alpha})^* = (\tilde{A}_{\alpha\beta})^*$ . Это соотношение полностью аналогично (4.2.6).

*В качестве примера докажем следующее соотношение.*

**Теорема 4.2.1:** операторы дифференцирования  $\frac{\partial}{\partial x}$  и  $-\frac{\partial}{\partial x}$

являются взаимно сопряжёнными, или

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^+ = -\frac{\partial}{\partial x}. \quad (4.2.7)$$

*Доказательство.* Действительно, для любых нормируемых функций  $\varphi(x)$  и  $\psi(x)$  (аргумент  $t$  для сокращения не выписываем)

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \frac{\partial}{\partial x} | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \frac{d\psi}{dx} dx = \varphi^* \psi \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{d\varphi^*}{dx} dx = \\ &= \left( \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{d\varphi}{dx}\right) dx \right)^* = \langle \psi | -\frac{\partial}{\partial x} | \varphi \rangle^*. \end{aligned}$$

В приведенных выкладках выполняется интегрирование по частям, и при этом используется свойство нормируемых функций быстро обращаться в нуль, когда модуль аргумента  $x$  неограниченно возрастает. Доказательство основывается на применении определения (4.2.5).

**Теорема 4.2.2:** если  $\hat{A} = c\hat{F}$ , где  $c$  — комплексное число, то

$$\hat{A}^+ = c^* \hat{F}^+. \quad (4.2.8)$$

*Доказательство.* В самом деле, для любых функций  $\psi, \varphi$

$$\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \left[ \int \varphi^* (c\hat{F}) \psi dq \right]^* = c^* \left( \int \varphi^* \hat{F} \psi dq \right)^* =$$

$$\begin{aligned}
&= c^* \langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle^* = c^* \langle \psi | \hat{F}^+ | \varphi \rangle = \\
&= c^* \int \psi^* \hat{F}^+ \varphi dq = \int \psi^* (c^* \hat{F}^+) \varphi dq = \langle \psi | \hat{A}^+ | \varphi \rangle.
\end{aligned}$$

Доказательство основывается на применении определения (4.2.5).

**Следствие теоремы 4.2.2:** если  $\hat{A} = c_1 \hat{F} + c_2 \hat{G}$ , где  $c_1$  и  $c_2$  — комплексные числа, то

$$\hat{A}^+ = c_1^* \hat{F}^+ + c_2^* \hat{G}^+.$$

*Доказательство* читателю предлагается проделать самостоятельно. Для этого предварительно докажите, что

$$(\hat{\xi} + \hat{\eta})^+ = \hat{\xi}^+ + \hat{\eta}^+$$

[это элементарно следует из (4.2.5)], а затем используйте *теорему 4.2.2*.

### 4.2.2. Самосопряжённый оператор

*Самосопряжённым* называется оператор, совпадающий со своим сопряжённым:

$$\hat{F} = \hat{F}^+. \quad (4.2.9)$$

Равенство (4.2.9) означает, что для любых функций  $\varphi(x)$  и  $\psi(x)$  равны операторные скобки

$$\langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \varphi \rangle^* \quad (4.2.10)$$

или матричные элементы

$$F_{\varphi\psi} = (F_{\psi\varphi})^*. \quad (4.2.11)$$

**Теорема 4.2.3:** если  $\hat{F}$  — самосопряжённый оператор, а  $c$  — действительное число, то  $\hat{A} = c\hat{F}$  — самосопряжённый оператор.

*Доказательство.* В самом деле: в теореме 4.2.2 [см. (4.2.8)] доказано, что

$$\hat{A}^+ = c^* \hat{F}^+.$$

Но по условию данной теоремы  $\hat{F} = \hat{F}^+$ , а  $c = c^*$ . Поэтому

$$\hat{A}^+ = c\hat{F} = \hat{A}. \quad (4.2.12)$$

**Следствие из теоремы 4.2.3:** если  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  — самосопряжённые операторы, а  $c_1$  и  $c_2$  — действительные числа, то  $\hat{A} = c_1\hat{F} + c_2\hat{G}$  — самосопряжённый оператор.

*Доказательство* читателю предлагается проделать самостоятельно.

Продолжим аналогии рассматриваемых операторных скобок (4.2.10) или матричных элементов самосопряжённых операторов (4.2.11) с матрицами, которые изучаются в обычной линейной алгебре.

В теории матриц с вещественными (действительными) матричными элементами матрица, совпадающая со своей транспонированной матрицей,  $A_{\alpha\beta} = \tilde{A}_{\alpha\beta}$ , называется *симметричной*. Приведенное соотношение похоже на (4.2.11).

Если матричные элементы — комплексные числа, то *самосопряжённой* матрицей называется матрица, совпадающая со своей транспонированной матрицей, у которой элементы заменены комплексно — сопряжёнными:  $A_{\alpha\beta} = (A_{\beta\alpha})^* = (\tilde{A}_{\alpha\beta})^*$ . Это соотношение полностью аналогично (4.2.11).

**Теорема 4.2.4:** если оператор  $\hat{F}$  — самосопряжённый, то для любой функции  $\psi(x)$  операторная скобка  $\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle$  — действительное число.

*Доказательство:* в самом деле, полагая в определении (4.2.10), (4.2.11)  $\varphi = \psi$ , получим

$$\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle^*. \quad (4.2.13)$$

Иными словами, *диагональные* матричные элементы (4.2.11) самосопряжённого оператора являются *действительными*:

$$F_{\psi\psi} = (F_{\psi\psi})^* . \quad (4.2.14)$$

*В качестве примера* докажем следующее соотношение.

**Теорема 4.2.5:** оператор  $i \frac{\partial}{\partial x}$  является самосопряжённым.

*Доказательство.* Найдём оператор, сопряжённый заданному в условии теоремы, воспользовавшись результатом *теоремы 4.2.2*. Из соотношения (4.2.8) имеем:

$$\left( i \frac{\partial}{\partial x} \right)^+ = i^* \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)^+ = -i \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)^+ .$$

Оператор, сопряжённый оператору дифференцирования, перепишем в соответствии с *теоремой 4.2.1* (4.2.7). В результате имеем

$$\left( i \frac{\partial}{\partial x} \right)^+ = i \frac{\partial}{\partial x} . \quad (4.2.15)$$

Но согласно определению (4.2.9) равенство и означает, что заданный в условии теоремы оператор — самосопряжённый.



**Задача 4.2.1.** Докажите, что оператор импульса  $\hat{p}_x$  (3.2.27) — самосопряжённый.

**Задача 4.2.2.** Докажите, что оператор координаты  $\hat{x}$  (3.3.1) — самосопряжённый.

Можно показать (это сделано ниже: см. п/п. 5.2.1, следствие 5.2.1.4 теоремы 5.2.1), что если оператор  $\hat{\xi}$  — самосопряжённый, то и любая действительная функция этого оператора  $f(\hat{\xi})$  (3.4.4) тоже является самосопряжённым оператором. Отсюда следует, что поскольку операторы импульса и координаты — самосопряжённые, как показано в решениях задач 4.2.1 и 4.2.2, то оператор  $\hat{F}$ , представляющий любую динамическую переменную  $F \equiv F(t, q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f)$  (3.4.1), вследствие (3.4.2) является самосопряжённым.

В частности, самосопряжённым является оператор Гамильтона микрочастицы  $\hat{H}$  (см. п/п. 3.4.4).

### **Вопросы для самопроверки**

4.2.1. Постройте оператор, сопряжённый оператору дифференцирования. Является ли он самосопряжённым?

4.2.2. Проверьте, что оператор дифференцирования, помноженный на мнимую единицу, является самосопряжённым.

4.2.3. Докажите, что квадрат любого самосопряжённого оператора является тоже самосопряжённым оператором.

### 4.3. Собственные значения и собственные функции самосопряжённых операторов

#### 4.3.1. Собственные значения

Как мы уже знаем, операторы представляют в квантовой механике динамические переменные микросистем, а собственные значения оператора суть возможные значения соответствующей динамической переменной, в частности — результатов её измерения. Ясно, что значения любой физической величины являются *действительными числами*. Вместе с тем собственные значения действительны вовсе не у всех операторов.

Рассмотрим, например, оператор дифференцирования функций по переменной  $x$ . Найдём собственные значения  $\alpha$  и собственные функции  $\psi_\alpha(x)$  этого оператора, используя уравнение (3.1.3):

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi_\alpha(x) = \alpha\psi_\alpha(x). \quad (4.3.1)$$

Уравнение (4.3.1) имеет решение при любом значении параметра  $\alpha$ :

$$\psi_\alpha(x) = Ae^{\alpha x}. \quad (4.3.2)$$

Собственные значения  $\alpha$  могут быть как действительными, так и комплексными. При этом функция (4.3.2) ограничена, только если  $\alpha$  — чисто мнимое число,  $\alpha = ia$  ( $a$  — действительное число). Таким образом, оператор дифференцирования не годится на роль представителя какой-либо физической величины.

Существует, однако, класс операторов, собственные значения которых *всегда действительны*. Это — *самосопряжённые операторы* (п/п. 4.2.2). По этой причине только они и могут использоваться как представители динамических переменных в математическом аппарате квантовой механики. Сейчас мы докажем сформулированное утверждение.

**Теорема 4.3.1.** Собственные значения самосопряжённого оператора действительны.

*Доказательство.* Пусть  $\hat{F}$  — самосопряжённый оператор. Рассмотрим соотношение (3.1.3), определяющее собственное значение  $F$  самосопряжённого оператора и принадлежащую ему собственную функцию  $\psi_F$ :

$$\hat{F}\psi_F = F\psi_F.$$

Умножим это соотношение на  $\psi_F^*$  и проинтегрируем, используя обозначения (4.1.5) и (4.2.1) и учитывая, что собственное значение не зависит от аргументов волновой функции, по которым выполняется интегрирование:

$$\langle \psi_F | \hat{F} | \psi_F \rangle = F \langle \psi_F | \psi_F \rangle. \quad (4.3.3)$$

Из (4.3.3) получим

$$F = \langle \psi_F | \hat{F} | \psi_F \rangle / \langle \psi_F | \psi_F \rangle. \quad (4.3.4)$$

Как доказано в *теореме 4.2.4*, числитель правой части выражения (4.3.4) для самосопряжённого оператора — действительное число. Знаменатель этого выражения представляет собой норму функции  $\psi_F$  (4.1.7), которая действительна и неотрицательна. Следовательно, число  $F$  — действительное,

$$F = F^*, \quad (4.3.5)$$

что и требовалось доказать.

### 4.3.2. Собственные функции

Собственные функции самосопряжённых операторов также обладают очень важным свойством, которое будет неоднократно использоваться нами в дальнейшем.

**Теорема 4.3.2.** Собственные функции самосопряжённого оператора, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны.

*Доказательство.* Рассмотрим соотношения (3.1.3), определяющие две собственные функции самосопряжённого оператора, принадлежащие разным собственным значениям:

$$\hat{F}\psi_{F'} = F'\psi_{F'}; \quad (4.3.6)$$

$$\hat{F}\psi_{F''} = F''\psi_{F''}; \quad F' \neq F''. \quad (4.3.7)$$

Умножим первое из них на  $\psi_{F''}^*$  и проинтегрируем:

$$\langle \psi_{F''} | \hat{F} | \psi_{F'} \rangle = F' \langle \psi_{F''} | \psi_{F'} \rangle. \quad (4.3.8)$$

Возьмём от равенства (4.3.8) комплексно сопряжённое:

$$\langle \psi_{F''} | \hat{F} | \psi_{F'} \rangle^* = (F')^* \langle \psi_{F''} | \psi_{F'} \rangle^*. \quad (4.3.9)$$

Используя определение самосопряжённого оператора (4.2.5), свойство скалярного произведения функций (4.1.6) и доказанную выше *теорему 4.3.1*, получим из равенства (4.3.9):

$$\langle \psi_{F'} | \hat{F} | \psi_{F''} \rangle = F' \langle \psi_{F'} | \psi_{F''} \rangle. \quad (4.3.10)$$

Далее, умножим второе из исходных равенств на  $\psi_{F'}^*$  и проинтегрируем:

$$\langle \psi_{F'} | \hat{F} | \psi_{F''} \rangle = F'' \langle \psi_{F'} | \psi_{F''} \rangle. \quad (4.3.11)$$

Вычтя равенство (4.3.11) почленно из (4.3.10), получим

$$0 = (F' - F'') < \psi_{F'} | \psi_{F''} >. \quad (4.3.12)$$

Но по условию теоремы  $(F' - F'') \neq 0$ . Тогда из (4.3.12) следует

$$< \psi_{F'} | \psi_{F''} > = 0, \quad (4.3.13)$$

что и требовалось доказать.

**Задача 4.3.1.** Докажите, что собственные функции оператора Гамильтона из задачи 2.3.1 (частица в прямоугольной потенциальной «яме» со «стенками» бесконечной высоты) обладают свойством (4.3.13)

$$< u_{E_m} | u_{E_n} > \equiv < u_m | u_n > = 0; \quad m \neq n, \quad (4.3.14)$$

которое вытекает из *теоремы 4.3.2*.

### **4.3.3. Полнота системы собственных функций самосопряжённого оператора**

Следующая теорема для своего доказательства требует весьма серьёзных математических средств и поэтому будет нами принята без доказательства.

**Теорема 4.3.3.** Собственные функции любого самосопряжённого оператора, действующего в некотором

функциональном пространстве, образуют *полную ортогональную систему* в этом функциональном пространстве.

Формулировка *теоремы 4.3.3* означает, что собственные функции самосопряжённого оператора образуют *ортогональный базис* функционального пространства, в котором можно *представить* любую функцию.

Сделаем необходимые пояснения.

В трёхмерном векторном пространстве базисом могут служить любые три взаимно ортогональных вектора  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ :  $\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{e}_\beta = 0$  ( $\alpha \neq \beta$ ). Обычно такие векторы принимаются нормированными:  $\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{e}_\alpha = |\mathbf{e}_\alpha|^2 = 1$ . Все эти равенства можно записать в виде одного:

$$\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{e}_\beta = \delta_{\alpha,\beta}, \quad (4.3.15)$$

где

$$\delta_{\alpha,\beta} = \begin{cases} 0, & \alpha \neq \beta \\ 1, & \alpha = \beta \end{cases} \quad (4.3.16)$$

— символ Кронеккера, дающий элементы единичного тензора (единичной матрицы).

Из векторной алгебры известно, что любой вектор  $\mathbf{a}$  может быть представлен в виде разложения по ортогональным векторам (ортам):

$$\mathbf{a} = a_1 \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_2 + a_3 \mathbf{e}_3. \quad (4.3.17)$$

Совершенно то же можно утверждать и для  $n$  – мерного векторного пространства. Выбрав любые  $n$  взаимно ортогональных векторов  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n$ , можно разложить по ним любой вектор:

$$\mathbf{a} = \sum_{\alpha=1}^n a_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha}. \quad (4.3.18)$$

Если выбранные векторы к тому же и нормированы, то условие *ортонормированности* их системы можно записать в виде одного соотношения (4.3.15).

Проекцию вектора  $\mathbf{a}$  на какой – либо из ортов  $\mathbf{e}_{\beta}$  получим, подсчитав скалярное произведение этих векторов. Очевидно, соответствующий коэффициент разложения (4.3.18)  $a_{\beta}$  равен рассматриваемому скалярному произведению:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_{\beta} = \sum_{\alpha=1}^n a_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{e}_{\beta} = \sum_{\alpha=1}^n a_{\alpha} \delta_{\alpha, \beta} = a_{\beta}. \quad (4.3.19)$$

В теории линейных векторных пространств показывается, что всякий полный ортонормированный набор векторов  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n$  является системой *собственных векторов* некоторого *самосопряжённого (эрмитова) оператора — тензора* (матрицы



размером  $n \times n$ ). Разумеется, систем ортов столько же, сколько и таких операторов, т.е. бесчисленное множество.

Точно так же *любую* функцию, принадлежащую некоторому функциональному пространству, можно *разложить* по полной системе собственных функций любого самосопряжённого оператора, поскольку они образуют *ортонормированный базис* этого функционального пространства.

#### **4.3.4. Разложение произвольной функции по полной ортонормированной системе собственных функций самосопряжённого оператора. Дискретный спектр собственных значений**

Пусть у самосопряжённого оператора  $\hat{F}$  — *дискретный спектр* собственных значений  $F_1, F_2, \dots, F_n, \dots$  и, соответственно, счётное множество принадлежащих этим собственным значениям собственных функций  $\psi_{F_1}(q), \psi_{F_2}(q), \dots, \psi_{F_n}(q), \dots$ . Поскольку функции  $\psi_{F_n}(q)$  нормируемы,

$$\int |\psi_{F_n}(q)|^2 dq = 1, \quad (4.3.20)$$

и вследствие *теоремы 4.3.2* попарно ортогональны (4.3.13), то *условие ортонормированности* этой системы функций запишем в виде

$$\langle \psi_{F_m} | \psi_{F_n} \rangle = \delta_{m,n}, \quad (4.3.21)$$

где  $\delta_{m,n}$  — символ Кронеккера (4.3.16).

Тогда вследствие *теоремы 4.3.3* любую функцию можно разложить по этим собственным функциям в *обобщённый ряд Фурье*:

$$\psi(q) = \sum_{n \geq 1} c_n \psi_{F_n}(q). \quad (4.3.22)$$

Коэффициенты этого разложения  $c_n$  и будут «проекциями» разлагаемой функции на соответствующие «орты» функционального пространства.

Выражение для подсчёта любого из этих коэффициентов получим с учётом (4.3.21), аналогично (4.3.19) помножив разложение (4.3.22) на  $\psi_{F_m}^*$  и проинтегрировав равенство по  $q$ :

$$\langle \psi_{F_m} | \psi \rangle = \sum_{n \geq 1} c_n \langle \psi_{F_m} | \psi_{F_n} \rangle = \sum_{n \geq 1} c_n \delta_{m,n} = c_m$$

или

$$c_n = \langle \psi_{F_n} | \psi \rangle. \quad (4.3.23)$$

#### 4.3.5. Разложение произвольной функции по полной ортонормированной системе собственных функций самосопряжённого оператора. Непрерывный спектр собственных значений

Пусть самосопряжённый оператор  $\hat{F}$  обладает *непрерывным спектром* собственных значений в интервале  $F_{\min} \leq F \leq F_{\max}$ . По аналогии с (4.3.22) хотелось бы записать разложение произвольной функции по собственным функциям этого оператора  $\psi_F(q)$  в виде суммы

$$\psi(q) = \sum_{F_{\min}}^{F_{\max}} c_F \psi_F(q).$$

Однако такая запись, разумеется, *неправильна*: множество  $F$  *несчётно*. Вместо суммирования по дискретному набору собственных значений в рассматриваемом случае следует *интегрировать* по интервалу, в котором лежат собственные значения:

$$\psi(q) = \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c(F) \psi_F(q) dF. \quad (4.3.24)$$

Разложение (4.3.24) называется *обобщённым интегралом Фурье*.

Попытаемся вычислить коэффициент разложения (4.3.24)  $c(F)$  тем же способом, которым получена формула (4.3.23) в случае,

когда спектр оператора дискретен. Для этого умножим (4.3.24) на  $\psi_{F'}^*(q)$  и проинтегрируем по  $q$ :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{F'} | \psi \rangle &= \int \psi_{F'}^*(q) \left[ \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c(F) \psi_F(q) dF \right] dq = \\ &= \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c(F) \left[ \int \psi_{F'}^*(q) \psi_F(q) dq \right] dF = \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c(F) f(F, F') dF, \quad (4.3.25) \end{aligned}$$

где

$$f(F, F') = \int \psi_{F'}^*(q) \psi_F(q) dq = \langle \psi_{F'} | \psi_F \rangle. \quad (4.3.26)$$

Предположим, что норма  $\langle \psi_F | \psi_F \rangle$  собственной функции  $\psi_F(q)$ , как и (4.3.20), конечна. Но такое предположение приводит к абсурду.

В самом деле: вследствие ортогональности собственных функций (4.3.13) из (4.3.26) следует, что  $f(F, F') = 0$  при всех  $F \neq F'$ , и только в одной единственной «точке»  $F = F'$  подынтегральное выражение интеграла (4.3.25)  $f(F', F') = \langle \psi_{F'} | \psi_{F'} \rangle$  оказывается отличным от нуля. Это означает, что интеграл (4.3.25) равен нулю. Полученный результат и в самом деле — бессмысленный: выходит, что *любая* собственная

функция оператора  $\hat{F}$  оказывается ортогональной произвольной функции  $\psi(q)$ !

Выход из этого положения был предложен П.А.М. Дираком и состоит в использовании уже знакомой нам дельта – функции (п/п. 3.3.2):

$$\langle \psi_{F'} | \psi_F \rangle = \delta(F - F'). \quad (4.3.27)$$

Соотношение (4.3.27) и является альтернативным (4.3.21) условием ортонормированности системы собственных функций самосопряжённого оператора с непрерывным спектром собственных значений. В отличие от (4.3.21), как следует из (3.3.5), норма любой такой функции  $\langle \psi_{F'} | \psi_{F'} \rangle = \delta(0)$  бесконечна.

Теперь вычислим интеграл (4.3.25) с учётом (4.3.27), используя основное свойство  $\delta$  – функции:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \delta(x) dx = \varphi(0), \quad (4.3.28)$$

где  $\varphi(x)$  — любая функция, непрерывная при  $x = 0$  — см. (3.3.4).

Теперь запишем требуемое равенство с учётом (4.3.27):

$$\langle \psi_{F'} | \psi \rangle = \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c(F) \delta(F - F') dF = c(F')$$

или

$$c(F) = \langle \psi_F | \psi \rangle. \quad (4.3.29)$$

Соотношение (4.3.29), как и ожидалось, полностью аналогично (4.3.23).

#### **4.3.6. Разложение волновой функции произвольного стационарного состояния микрочастицы по полной ортонормированной системе собственных функций оператора импульса**

В качестве примера разложим в обобщённый интеграл Фурье (4.3.24) волновую функцию произвольного стационарного состояния микрочастицы с одной степенью свободы  $\psi(t, x)$  по собственным функциям оператора импульса (3.2.19), (3.2.20)

$$\psi_{p_x}(t, x) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)\right] = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) u_{p_x}(x); \quad (4.3.30)$$

$$u_{p_x}(x) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}p_x x\right), \quad (4.3.31)$$

и вычислим коэффициент этого разложения (4.3.29).

Вначале, однако, убедимся, что функции (4.3.30), (4.3.31) удовлетворяют условию ортонормировки (4.3.27)

$$\langle \psi_{p'_x} | \psi_{p''_x} \rangle = \delta(p''_x - p'_x). \quad (4.3.32)$$

Подставим функции (4.3.30), (4.3.31) в левую часть (4.3.32), чтобы подсчитать их скалярное произведение. При этом экспоненциальные множители, определяющие зависимость функций (4.3.30) от времени, уничтожатся, и мы получим:

$$\langle \psi_{p'_x} | \psi_{p''_x} \rangle = \langle u_{p'_x} | u_{p''_x} \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p''_x - p'_x)x} dx. \quad (4.3.33)$$

Обозначим

$$k = \frac{p''_x - p'_x}{\hbar}. \quad (4.3.34)$$

С учётом обозначения (4.3.34) подсчитаем главное значение несобственного интеграла (4.3.33):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx = \lim_{\xi \rightarrow \infty} \int_{-\xi}^{\xi} e^{ikx} dx. \quad (4.3.35)$$

Интеграл, входящий в (4.3.35) под знаком предельного перехода, легко вычисляется и с учётом формулы Эйлера для тригонометрического представления «мнимой экспоненты» оказывается действительной величиной:

$$\int_{-\xi}^{\xi} e^{ikx} dx = \frac{1}{ik} (e^{ik\xi} - e^{-ik\xi}) = \frac{2}{k} \sin(k\xi). \quad (4.3.36)$$

Правая часть (4.3.36) при  $\xi \rightarrow \infty$  выражается через  $\delta$ – функцию Дирака в соответствии с тригонометрическим представлением, описанным ниже в п/п. 4.3.7. (Заметим, что, как указано в п/п. 4.3.7, тригонометрическое представление в действительности определяет не  $\delta$ – функцию Дирака, а другую обобщённую функцию с подходящими свойствами. Однако в литературе на это почему–то не обращают внимание). Используя это представление, с учётом (4.3.35) имеем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx = \lim_{\xi \rightarrow \infty} \frac{2}{k} \sin(k\xi) = 2\pi\delta(k). \quad (4.3.37)$$

Подставляя (4.3.37) в (4.3.33) с учётом обозначения (4.3.34), получим:

$$\langle \psi_{p'_x} | \psi_{p''_x} \rangle = \langle u_{p'_x} | u_{p''_x} \rangle = A^2 2\pi\delta\left(\frac{p''_x - p'_x}{\hbar}\right). \quad (4.3.38)$$

Для того чтобы придать выражению (4.3.38) требуемый вид, используем ещё одно свойство  $\delta$ – функции: если  $a$  — любая константа, то



$$\delta(ax) = \frac{1}{a} \delta(x). \quad (4.3.39)$$

Действительно:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(ax) dx = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(ax) d(ax) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) dt \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{a} \delta(x) dx. \quad (4.3.40)$$

Приравнивая подынтегральные выражения первого и последнего интегралов в (4.3.40), получим равенство (4.3.39).

Чтобы дополнительно убедиться в справедливости равенства (4.3.39), можно аналогично (4.3.40) показать, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \delta(ax) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \frac{1}{a} \delta(x) dx,$$

где  $\varphi(x)$  — произвольная непрерывная функция. В самом деле:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \delta(ax) dx = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \delta(ax) d(ax) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi\left(\frac{t}{a}\right) \delta(t) dt = \frac{1}{a} \varphi(0);$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \frac{1}{a} \delta(x) dx = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \delta(x) dx = \frac{1}{a} \varphi(0).$$

Мы видим, что использование выражений, записанных в обеих частях равенства (4.3.39), приводит к одинаковому результату.

Используя (4.3.39), из (4.3.38) получим:

$$\langle \psi_{p'_x} | \psi_{p''_x} \rangle = \langle u_{p'_x} | u_{p''_x} \rangle = A^2 2\pi\hbar \delta(p''_x - p'_x). \quad (4.3.41)$$

Сравнивая (4.3.41) с (4.3.32), найдём нормировочную постоянную в собственной функции оператора импульса (4.3.30), (4.3.31):

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (4.3.41)$$

Теперь мы можем, применяя формулу (4.3.24), разложить произвольную волновую функцию микрочастицы с одной степенью свободы, находящейся в стационарном состоянии (см. п/пп. 2.3.2 и 3.4.4),

$$\psi_E(t, x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) u_E(x), \quad (4.3.42)$$

в обобщённый интеграл Фурье по собственным функциям оператора импульса (4.3.30), (4.3.31), (4.3.41) (разумеется, значение параметра  $E$ , равного энергии частицы, в (4.3.42) и (4.3.30) одно и то же):

$$\psi_E(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p_x) \psi_{p_x}(t, x) dp_x$$

или, после подстановок и сокращений,

$$u_E(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p_x) \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right) dp_x. \quad (4.3.43)$$

Соотношение (4.3.43), в сущности, представляет собой обыкновенный интеграл Фурье.

Коэффициент разложения, или, как принято говорить в математике, фурье – образ функции  $u_E(x)$ , подсчитаем в соответствии с формулой (4.3.29):

$$c(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} u_E(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_x x\right) dx. \quad (4.3.44)$$

Соотношение (4.3.44) в соответствии с математической терминологией является обратным по отношению к (4.3.43) преобразованием Фурье.

#### **4.3.7. Тригонометрическое представление дельта – функции**

Наряду с представлением  $\delta$  – функции в виде предела последовательности гауссовских экспонент (п/п. 3.3.2) известно и широко используется *тригонометрическое представление  $\delta$  – функции*:

$$f(x, \alpha) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin(\alpha x)}{x} \xrightarrow{\alpha \rightarrow \infty} \delta(x). \quad (4.3.45)$$

Действительно: как и требуется для любого представления  $\delta$ -функции, функция  $f(x, \alpha)$  (4.3.45) является чётной,  $f(x, \alpha) = f(-x, \alpha)$ , и имеет при  $x = 0$  максимум

$$f(0, \alpha) = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\sin(\alpha x)}{x} = \frac{1}{\pi} \lim_{\alpha x \rightarrow 0} \alpha \frac{\sin(\alpha x)}{\alpha x} = \frac{\alpha}{\pi}, \quad (4.3.46)$$

который неограниченно возрастает при  $\alpha \rightarrow \infty$ . При  $x \rightarrow \infty$  рассматриваемая функция быстро убывает:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} f(x, \alpha) = 0. \quad (4.3.47)$$

Благодаря этому рассматриваемая функция является интегрируемой в интервале  $-\infty < x < \infty$ .

Поскольку, как известно из математики, при любом  $\alpha > 0$

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin(\alpha x)}{x} dx = \frac{\pi}{2},$$

то с учётом чётности функции подынтегральной функции при любом значении параметра  $\alpha$  выполняется соотношение

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x, \alpha) dx = 2 \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sin(\alpha x)}{x} dx = 1, \quad (4.3.48)$$

что и требуется по определению  $\delta$ – функции (3.3.5).

Тем не менее, соответствие рассматриваемого представления  $\delta$ – функции определению (3.3.5) не очевидно, т.к. при  $\alpha \rightarrow \infty$  для конечных значений  $x$  функция  $f(x, \alpha)$  не только не стремится к нулю, но и неограниченно возрастает.

В самом деле: функция  $f(x) = \sin x / x$  равна 1 при  $x = 0$ , монотонно убывает до нуля при возрастании  $x$  до  $\pi$  и при последующем росте  $x$  осциллирует, проходя через узловые точки  $x_n = \pm \pi n$ ,  $n = 1, 2, \dots$ . В промежутках между узловыми точками располагаются точки экстремумов. Координаты этих точек являются решениями трансцендентного уравнения  $x_n^* = \operatorname{tg} x_n^*$ . Приблизительно  $x_n^* \approx \pm \pi(n + 1/2)$ ;  $n = 1, 2, \dots$ . При этом

$$f(x_n^*) \approx (-1)^n / x_n^*.$$

С учётом сказанного функция  $f(x, \alpha)$  проходит через узловые точки с координатами  $x_n = \pm \pi n / \alpha$ ,  $n = 1, 2, \dots$ . В точках экстремумов с координатами  $x_n^* \approx \pm \pi(n + 1/2) / \alpha$ ,  $n = 1, 2, \dots$ , значения функции  $f(x, \alpha)$  приблизительно равны

$$f(x_n^*, \alpha) \approx \frac{(-1)^n}{\pi x_n^*} = \frac{(-1)^n \alpha}{\pi^2 (n + 1/2)}.$$

Видно, что хотя сами по себе абсолютные значения экстремумов рассматриваемой функции убывают по мере роста по модулю их координат, но все эти значения при  $\alpha \rightarrow \infty$ , действительно, не только не стремятся к нулю, а, напротив, неограниченно возрастают. При этом расстояния между соседними узлами и экстремумами, равные  $\pi n/\alpha$ , по мере роста  $\alpha$  уменьшаются, а сами эти точки «стягиваются» к  $x = 0$ , так что число узлов и экстремумов функции  $f(x, \alpha)$  в любой конечной окрестности  $x = 0$  по мере увеличения  $\alpha$  неограниченно растёт. Иными словами, в рассматриваемом представлении  $\delta$ –функция выглядит как частый гребень. К сожалению, такое поведение мало напоминает «классическую»  $\delta$ –функцию. Фактически объект, определённый равенством (4.3.45), является другой обобщённой функцией.

Следует, однако, отметить, что сама по себе  $\delta$ –функция не входит ни в один окончательный результат математических выкладок, а всегда используется для последующего интегрирования. В частности, таково соотношение (4.3.28),

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \delta(x) dx = \varphi(0), \quad (4.3.49)$$

( $\varphi(x)$  — любая функция, непрерывная при  $x = 0$ ), которое является основным свойством  $\delta$ -функции. Именно свойство (4.3.49) обычно используется в вычислениях, в которых участвует  $\delta$ -функция.

Покажем, что свойство (4.3.49) выполняется для представления  $\delta$ -функции (4.3.45).

Разобьём область интегрирования узловыми точками  $x_n$ :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) f(x, \alpha) dx &= \int_{-|x_1|}^{|x_1|} \varphi(x) f(x, \alpha) dx + \\ &+ \left[ \int_{-|x_2|}^{-|x_1|} \varphi(x) f(x, \alpha) dx + \int_{|x_1|}^{|x_2|} \varphi(x) f(x, \alpha) dx \right] + \dots \end{aligned}$$

При  $\alpha \rightarrow \infty$  в каждом из рассматриваемых промежутков располагается острый пик функции  $f(x, \alpha)$ , который быстро спадает к краям интервала. Поэтому каждый из интегралов можно вычислить, используя теорему о среднем:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) f(x, \alpha) dx &= \varphi(0) \int_{-|x_1|}^{|x_1|} f(x, \alpha) dx + \\ &+ \left[ \varphi(-|x_1|) \int_{-|x_2|}^{-|x_1|} f(x, \alpha) dx + \varphi(|x_1|) \int_{|x_1|}^{|x_2|} f(x, \alpha) dx \right] + \dots \end{aligned}$$

Но при  $\alpha \rightarrow \infty$   $|x_n^*| \rightarrow 0$  при любом  $n$ , и, следовательно,  $\varphi(\pm|x_n^*|) \rightarrow \varphi(0)$ . Следовательно,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) f(x, \alpha) dx = \varphi(0) \left[ \int_{-|x_1|}^{|x_1|} f(x, \alpha) dx + \int_{-|x_2|}^{-|x_1|} f(x, \alpha) dx + \int_{|x_1|}^{|x_2|} f(x, \alpha) dx + \dots \right]$$

Сумма же интегралов в квадратных скобках есть просто интеграл от функции  $f(x, \alpha)$  по всей области интегрирования:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) f(x, \alpha) dx = \varphi(0) \int_{-\infty}^{\infty} f(x, \alpha) dx.$$

Но интеграл в правой части полученного равенства вследствие (4.3.48) равен 1. Таким образом, в пределе при  $\alpha \rightarrow \infty$  полученное равенство превращается в требуемое соотношение (4.3.49).

### Вопросы для самопроверки

4.3.1. Докажите, что любое собственное значение самосопряжённого оператора является действительным числом.

4.3.2. Докажите, что любые собственные функции самосопряжённого оператора, принадлежащие разным собственным значениям, ортогональны.



4.3.3. Почему динамические переменные микросистем представляются в квантовой механике только самосопряжёнными операторами?

4.3.4. Что такое полная система собственных функций?

4.3.5. Почему построение процедуры разложения произвольной волновой функции в обобщённый интеграл Фурье по собственным функциям самосопряжённого оператора, обладающего непрерывным спектром собственных значений, невозможно без введения дельта – функции Дирака? Ведь в случае дискретного спектра собственных значений оператора для разложения той же функции по его собственным функциям в обобщённый ряд Фурье удаётся обойтись традиционным математическим аппаратом.

## ***4.4. Распределение вероятностей динамической переменной***

**4.4.1. Вероятность результата измерения динамической переменной: дискретный спектр собственных значений**

Заметим теперь, что коэффициент (4.3.23)

$$c_n = \langle \psi_{F_n} | \psi \rangle. \quad (4.4.1)$$

разложения (4.3.22) волновой функции микросистемы  $\psi(t, q)$  по собственным функциям  $\psi_{F_n}(t, q)$  самосопряжённого оператора  $\hat{F}$ , обладающего дискретным спектром собственных значений  $F_1, F_2, \dots, F_n, \dots$ , представляет собой *амплитуду перехода* микросистемы из состояния  $\psi(t, q)$  в состояние  $\psi_{F_n}(t, q)$  (см. п/п. 4.1.3). В соответствии с (4.1.9) квадрат модуля величины (4.4.1) есть *вероятность* соответствующего перехода:

$$|c_n|^2 = \left| \langle \psi_{F_n} | \psi \rangle \right|^2 = w(\psi \rightarrow \psi_{F_n}) \equiv w_n. \quad (4.4.2)$$

Мы знаем, что в произвольном состоянии микросистемы  $\psi(t, q)$  динамическая переменная (физическая величина)  $F$ , вообще говоря, является случайной величиной, а в состоянии  $\psi_{F_n}(t, q)$  — имеет строго определённое значение  $F = F_n$ . В какой же физической ситуации может произойти переход микросистемы, которому соответствует амплитуда (4.4.1) и вероятность (4.4.2)? Очевидно, это — *измерение* динамической переменной (физической величины)  $F$ , результатом которого является одно из возможных значений  $F_1, F_2, \dots$ , а именно  $F = F_n$ .

Таким образом, величина  $w_n$  (4.4.2) представляет собой вероятность случайного события, состоящего в том, что при измерении физической величины  $F$  микросистемы, находящейся в состоянии  $\psi(t, q)$ , получится значение  $F_n$ .

Проверим, что если волновая функция  $\psi(t, q)$  нормирована на 1,

$$\int |\psi(t, q)|^2 dq = \int \psi^*(t, q) \psi(t, q) dq = 1, \quad (4.4.3)$$

то и распределение вероятностей  $w_n$  нормировано, т.е.

$$\sum_{n \geq 1} w_n = 1. \quad (4.4.4)$$

Для этого подставим в подынтегральное выражение (4.4.3) вместо  $\psi(t, q)$  разложение (4.3.22), а вместо  $\psi^*(t, q)$  — разложение

$$\psi^*(t, q) = \sum_{m \geq 1} c_m^* \psi_{F_m}^*(t, q). \quad (4.4.5)$$

Поменяем в полученном выражении порядок суммирования и интегрирования и вынесем за знак интеграла константы:

$$1 = \sum_{m \geq 1} \sum_{n \geq 1} c_m^* c_n \int \psi_{F_m}^* \psi_{F_n} dq.$$

А теперь воспользуемся условием ортонормированности собственных функций оператора  $\hat{F}$  (4.3.21) и свойством символа Кронеккера  $\delta_{mn}$  (4.3.16):

$$1 = \sum_{m \geq 1} \sum_{n \geq 1} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_{n \geq 1} c_n^* c_n = \sum_{n \geq 1} |c_n|^2 = \sum_{n \geq 1} w_n.$$

Равенство (4.4.4) доказано.

#### 4.4.2. Среднее значение динамической переменной: дискретный спектр собственных значений

Математическое ожидание (среднее значение) результата измерения дискретной случайной величины  $F$  в состоянии микросистемы  $\psi(t, q)$  по определению (2.1.14) равно

$$\bar{F} = \sum_{n \geq 1} w_n F_n. \quad (4.4.6)$$

Покажем, что величину (4.4.6) можно подсчитать по гораздо более простой формуле, не требующей предварительного расчёта собственных функций и собственных значений оператора, а также суммирования по множеству этих значений:

$$\bar{F}(t) = \int \psi^*(t, q) \hat{F} \psi(t, q) dq \equiv \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \quad (4.4.7)$$

[см. обозначение (4.2.1)].

С этой целью разложим функции в подынтегральном выражении (4.4.7) в ряды (4.3.22), (4.4.5) и воспользуемся тем, что

оператор  $\hat{F}$ , действуя на свою собственную функцию  $\psi_{F_n}(t, q)$ , даёт ту же функцию, помноженную на собственное значение  $F_n$ , а на константы он, разумеется, не действует. Далее, чтобы получить требуемый результат, следует поступить так же, как в п/п. 4.4.1 при доказательстве соотношения (4.4.4).

Заметим, что формула (4.4.7) имеет смысл только при условии, что входящий в её правую часть интеграл, вообще говоря, несобственный, сходится. Указанное условие будет выполнено, если волновая функция имеет конечную норму. Но это и предполагалось при выводе формулы (4.4.7), поскольку вывод опирался на условие нормировки (4.4.3).

#### **4.4.3. Плотность вероятности результата измерения динамической переменной: непрерывный спектр собственных значений**

Коэффициент (4.3.23)

$$c(F) = \langle \psi_F | \psi \rangle \quad (4.4.8)$$

разложения (4.3.24) волновой функции микросистемы  $\psi(t, q)$  по собственным функциям  $\psi_F(t, q)$  самосопряжённого оператора  $\hat{F}$ , обладающего непрерывным спектром собственных значений  $F_{\min} \leq F \leq F_{\max}$ , представляет собой *амплитуду перехода* микросистемы из состояния  $\psi(t, q)$  в состояние  $\psi_F(t, q)$  (см.

п/п. 4.1.3). В соответствии с (4.1.9) квадрат модуля величины (4.4.8) есть *плотность вероятности* соответствующего перехода:

$$|c(F)|^2 = |\langle \psi_F | \psi \rangle|^2 = P(\psi \rightarrow \psi_F) = P(F). \quad (4.4.9)$$

Функция  $P(F)$  (4.4.9) представляет собой плотность вероятности случайного события (п/п. 1.1.4), состоящего в том, что при измерении физической величины  $F$  микросистемы, находящейся в состоянии  $\psi(t, q)$ , получится значение  $F$ . Иначе говоря, вероятность того, что результат измерения окажется в интервале  $F_1 \leq F \leq F_2$  (1.4.25), равна

$$w(F_1 \leq F \leq F_2) = \int_{F_1}^{F_2} P(F) dF. \quad (4.4.10)$$

Докажем что, если волновая функция  $\psi(t, q)$ , описывающая состояние микросистемы, нормирована на 1 (4.4.3), то и плотность вероятности (4.4.9) нормирована (1.4.27):

$$\int_{F_{\min}}^{F_{\max}} P(F) dF \equiv \int_{-\infty}^{\infty} P(F) dF = 1. \quad (4.4.11)$$

(вне интервала  $F_{\min} \leq F \leq F_{\max}$   $P(F) \equiv 0$ ).

Для этого подставим в подынтегральное выражение (4.4.3) вместо  $\psi(t, q)$  разложение (4.3.24), а вместо  $\psi^*(t, q)$  — разложение, следующее из (4.3.24):

$$\psi^*(q) = \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c^*(F') \psi_{F'}^*(q) dF'. \quad (4.4.12)$$

Далее воспользуемся условием ортонормировки собственных функций  $\psi_F(t, q)$  (4.3.27) и свойством (4.3.28) дельта – функции Дирака:

$$\begin{aligned} 1 &= \int \psi^* \psi dq = \int \left[ \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c^*(F') \psi_{F'}^*(q) dF' \right] \left[ \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c(F) \psi_F(q) dF \right] dq = \\ &= \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c^*(F') dF' \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c(F) dF \int \psi_{F'}^*(q) \psi_F(q) dq = \\ &= \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c^*(F') dF' \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c(F) \delta(F - F') dF = \\ &= \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c^*(F') c(F') dF' = \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} P(F') dF'. \end{aligned}$$

Равенство (4.4.11) доказано.

#### 4.4.4. Среднее значение динамической переменной: непрерывный спектр собственных значений

Математическое ожидание (среднее значение) результата измерения непрерывной случайной величины  $F$  в состоянии микросистемы  $\psi(t, q)$  по определению (2.1.15) равно

$$\bar{F} = \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} F P(F) dF. \quad (4.4.13)$$

Покажем, что величину (4.4.13), как и для случая дискретного спектра собственных значений (п/п. 4.4.2) можно подсчитать по соотношению (4.4.7).

В самом деле: разлагая функции под знаком интеграла (4.4.7) в обобщённый интеграл Фурье и учитывая, что результатом воздействия оператора на собственную функцию является произведение той же функции на собственное значение, а на константы оператор не действует, получим:

$$\begin{aligned} \int \psi^* \hat{F} \psi dq &= \int \left[ \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c^*(F') \psi^*_{F'}(q) dF' \right] \left[ \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c(F) \hat{F} \psi_F(q) dF \right] dq = \\ &= \int \left[ \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c^*(F') \psi^*_{F'}(q) dF' \right] \left[ \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c(F) F \psi_F(q) dF \right] dq = \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
&= \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c^*(F') dF' \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c(F) F dF \int \psi^*_{F'}(q) \psi^*_F(q) dq = \\
&= \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} c^*(F') dF' \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} F c(F) \delta(F - F') dF = \\
&= \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} F' c^*(F') c(F') dF' = \int_{F_{\min}}^{F_{\max}} F' P(F') dF' = \bar{F}.
\end{aligned}$$

Точно так же можно показать, что если  $f(\hat{F})$  — функция оператора, представляющего динамическую переменную микросистемы, то, независимо от того, дискретный у оператора  $\hat{F}$  спектр собственных значений или непрерывный,

$$\bar{f} = \int \psi^*(t, q) f(\hat{F}) \psi(t, q) dq \equiv \langle \psi | f(\hat{F}) | \psi \rangle \quad (4.4.14)$$

**Задача 4.4.1.** Вычислите среднее значение координаты микрочастицы, находящейся в стационарном состоянии в поле силы «прямоугольная потенциальная яма со стенками бесконечной высоты» (задача 2.3.1).

**Задача 4.4.2.** Вычислите среднее значение импульса микрочастицы в условиях задачи 4.4.1.

#### 4.4.5. Коэффициент разложения как волновая функция в $F$ – представлении

Нетрудно заметить, что коэффициент (4.3.29), (4.4.8)

$$c(t, F) = \langle \psi_F | \psi \rangle$$

разложения (4.3.24) волновой функции микросистемы  $\psi(t, q)$  по собственным функциям  $\psi_F(t, q)$  самосопряжённого оператора  $\hat{F}$ , обладающего непрерывным спектром собственных значений  $F_{\min} \leq F \leq F_{\max}$ , по своим свойствам очень похож на саму волновую функцию  $\psi(t, q)$ . Разница состоит лишь в том, что волновая функция зависит от координат микросистемы, а функция  $c(t, F)$  — от какой-то другой динамической переменной  $F$  той же микросистемы.

Если квадрат модуля «обычной» волновой функции  $\psi(t, q)$  позволяет описать распределение вероятностей координат микросистемы как случайных величин, то квадрат модуля функция  $c(t, F)$  описывает распределение вероятностей динамической переменной  $F$  (импульса, энергии и т.п.) *в том же состоянии* микросистемы. Это распределение позволяет вычислить любые статистические характеристики данной динамической переменной  $F$  как случайной величины (4.4.14): среднее значение  $\bar{F}$ , дисперсию  $D(F)$  (2.1.12), среднеквадратичное отклонение от среднего значения  $\Delta F_{rms} = \sqrt{D(F)}$  (2.1.13) и т.д. — точно так же, как «обычная» волновая функция — статистические характеристики координат.

В этом смысле «обычную» волновую функцию  $\psi(t, q)$ , описывающую некоторое состояние микросистемы, можно было бы назвать волновой функцией «в координатном представлении», а

функцию  $c(t, F)$  (4.4.8) — волновой функцией «в  $F$  – представлении», заменив в обозначении «для симметрии» букву  $c$  буквой  $\psi$ .

$$\psi(t, F) \equiv c(t, F) = \langle \psi_F | \psi \rangle. \quad (4.4.15)$$

Например, если  $\psi_E(t, x)$  (4.3.42) — волновая функция, описывающая стационарное состояние микрочастицы с одной степенью свободы в координатном представлении, то функцию  $c(p_x)$  (4.3.44) можно назвать волновой функцией, описывающей то же состояние микрочастицы в импульсном представлении:

$$\psi_E(p_x) \equiv c(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} u_E(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_x x\right) dx. \quad (4.3.44)$$

Точно так же как волновую функцию «в  $F$  – представлении» можно рассматривать набор коэффициентов (4.4.1)

$$c_n = \langle \psi_{F_n} | \psi \rangle$$

разложения (4.3.22) волновой функции микросистемы  $\psi(t, q)$  по собственным функциям  $\psi_{F_n}(t, q)$  самосопряжённого оператора  $\hat{F}$ , обладающего дискретным спектром собственных значений  $F_1, F_2, \dots, F_n, \dots$ . При этом у рассматриваемой функции — не

непрерывный, как в (4.4.15), а дискретный, как у вектора, набор значений

$$\begin{aligned}\psi(t, F) &= \{c_1, c_2, \dots, c_n, \dots\} = \\ &= \{\langle \psi_{F_1} | \psi \rangle, \langle \psi_{F_2} | \psi \rangle, \dots, \langle \psi_{F_n} | \psi \rangle, \dots\}.\end{aligned}$$

### Вопросы для самопроверки

4.4.1. Как связана вероятность того или иного результата измерения динамической переменной микросистемы в состоянии, описываемом некоторой волновой функцией, с коэффициентами разложения этой функции в ряд по собственным функциям оператора, обладающего дискретным спектром собственных значений, который представляет данную динамическую переменную?

4.4.2. Как связана плотность вероятности того или иного результата измерения динамической переменной микросистемы в состоянии, описываемом некоторой волновой функцией, с коэффициентами разложения этой функции в интеграл по собственным функциям оператора, обладающего непрерывным спектром собственных значений, который представляет данную динамическую переменную?

4.4.3. Докажите, что в обоих случаях среднее значение (математическое ожидание) результатов измерения динамической переменной вычисляется по одной и той же формуле.

## 4.5. Теоремы П. Эренфеста

### 4.5.1. Формулировки, смысл и применение теорем П. Эренфеста

Используя формулы (4.4.7), (4.4.14) для вычисления средних значений динамических переменных и уравнение Шрёдингера, можно доказать, что соответствующие *квантовомеханические средние* удовлетворяют тем же соотношениям, что и *сами динамические переменные* в классической механике — см. п. 1.2.

Так, для случая микрочастицы с одной степенью свободы имеем следующие соотношения.

**Теорема 4.5.1 (Первая теорема Эренфеста):**

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{1}{m} \overline{p_x}. \quad (4.5.1)$$

**Теорема 4.5.2 (Вторая теорема Эренфеста):**

$$\frac{d\overline{p_x}}{dt} = \overline{F_x}; \quad F_x = -\frac{\partial\Phi}{\partial x}. \quad (4.5.2)$$

Аналогичные соотношения выводятся в рамках доказательства теорем Эренфеста для микрочастицы с тремя степенями свободы.

Теоремы Эренфеста показывают, что в уравнении Шрёдингера и других исходных положениях, на которых базируется математический (и понятийный) аппарат квантовой механики, «содержатся» уравнения классической механики Ньютона. Благодаря этому в соответствующем пределе квантовое описание поведения микрочастицы перейдёт в классическое.

В самом деле: в этом пределе, когда неопределённости значений координат и проекций импульса станут настолько «малыми», что их будет невозможно обнаружить (как, например, у падающего кирпича), положение и скорость движения частицы будут практически точно соответствовать средним значениям координат и проекций импульса. И хотя состояние микрочастицы по-прежнему описывается квантовым уравнением Шрёдингера, но фактически, в соответствие с теоремами Эренфеста, её пространственно-временное поведение следует уравнениям классической механики Ньютона. Зависимость от времени средних значений координаты  $\bar{x}(t)$  и импульса  $\bar{p}_x(t)$  частицы представляет собой в подобных условиях классическую траекторию.

Однако, когда квантовые эффекты существенны, теоремы Эренфеста не дают никакого представления о динамическом поведении микрочастицы и уж, конечно, не могут служить инструментом количественного анализа этого поведения.

Рассмотрим, например, микрочастицу, находящуюся в стационарном связанном состоянии. В этом случае средние значения любых динамических переменных микросистемы не зависят от времени.

В самом деле, поскольку в стационарном состоянии

$$\psi(t, q) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)u(q),$$

то при вычислении среднего значения временной множитель пропадает,

$$\overline{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi dq = \int u^* \hat{F} u dq \equiv \langle u | \hat{F} | u \rangle,$$

и вычисленная величина не зависит от переменной  $t$ .

Итак, в стационарном связанном состоянии среднее значение координаты микрочастицы  $\bar{x}$  не зависит от времени. И это естественно: если неподвижен центр силы, удерживающий возле себя частицу, то в среднем неподвижна и сама частица. Тогда производная по времени от среднего значения координаты в левой части соотношения, которое доказывается в первой теореме Эренфеста, должна быть равна нулю.

Разумеется, равна нулю и правая часть этого соотношения, пропорциональная среднему значению импульса: если бы эта величина была отлична от нуля, то частица «убегала» бы с соответствующей скоростью от удерживающего её неподвижного центра силы — но тогда её состояние было бы не связанным, а состоянием рассеяния!

Таким образом, среднее значение импульса частицы, находящейся в стационарном связанном состоянии, не только не зависит от времени, но и равно нулю.

Раз так, то левая часть соотношения, доказываемого во второй теореме Эренфеста, т.е. производная по времени от среднего импульса микрочастицы, равна нулю. Понятно, что тому же равна и правая часть этого соотношения. В самом деле: чтобы частица не «убежала» от удерживающего её силового центра, сила должна быть возвращающей, т.е. направленной в сторону, противоположную смещению частицы от центра, и «не позволяющей» частице «убежать» ни в какую сторону. В среднем такая сила, очевидно, равна нулю, поскольку её положительные значения в процессе движения частицы полностью уравниваются отрицательными.

Таким образом, обе теоремы Эренфеста в рассматриваемом случае принимают вид «ноль равен нулю». Ясно, что извлечь из этих неконструктивных равенств какие-то более детальные количественные сведения о «движении» микрочастицы, находящейся в стационарном связанном состоянии, не удастся. Это и не удивительно: по квантовым представлениям, в рассматриваемом случае никакого движения просто нет.

Как уже разъяснялось в конце п/п. 4.4.2, формулы (4.4.7), (4.4.14), используемые для вычисления средних значений динамических переменных, которые входят в уравнения Эренфеста (5.1.1), (5.1.2), имеют смысл, только если интегралы (4.4.7), (4.4.14) сходятся. Указанное требование будет выполнено, если волновая



функция имеет конечную норму. А это обеспечивается используемым при выводе соотношений (4.4.7), (4.4.14) условием нормировки волновой функции (4.4.3).

Но отсюда ясно, что теоремы Эренфеста справедливы только для таких состояний микросистемы, когда описывающие их волновые функции удовлетворяют условию (4.4.3) и, следовательно, достаточно быстро убывают при удалении микрочастицы от источника поля. А это означает, что применимость обсуждаемых теорем ограничивается связанными состояниями (но, конечно, не обязательно стационарными) микрочастицы с источником поля.

#### 4.5.2. Доказательство первой теоремы П. Эренфеста

Докажем равенство (4.5.1).

В соответствии с формулой для вычисления средних значений (4.4.7) запишем, используя свойство оператора координаты (3.3.1):

$$\bar{x}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{x} \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \psi^*(x) \psi(x) dx. \quad (4.5.3)$$

Продифференцируем выражение (4.5.3) по времени:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi dx + \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* dx. \quad (4.5.4)$$

Хорошо видно, что два слагаемых в правой части выражения (4.5.4) — комплексно сопряжённые величины. Обозначив одно из них

$$P \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* dx, \quad (4.5.5)$$

запишем:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = P + P^*. \quad (4.5.6)$$

Производную по времени от волновой функции в подынтегральном выражении для  $P$  (4.5.5) вычислим, используя уравнение Шрёдингера:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \Phi(t, x) \psi \right]. \quad (4.5.7)$$

Получим:

$$P \equiv Q + R, \quad (4.5.8)$$

где

$$Q \equiv \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi \psi^* \psi dx; \quad (4.5.9)$$

$$R \equiv -\frac{\hbar}{i2m} \int_{-\infty}^{\infty} x \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx. \quad (4.5.10)$$

Из (4.5.6), учитывая (4.5.8), получим

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = Q + Q^* + R + R^*. \quad (4.5.11)$$

Из (4.5.9) очевидно, что  $Q^* = -Q$ , так что  $Q + Q^* = 0$ .  
Следовательно, из (4.5.11) получим:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = R + R^*. \quad (4.5.12)$$

Величину  $R$  (4.5.10) преобразуем, вычислив соответствующий интеграл по частям:

$$R = -\frac{\hbar}{i2m} \left[ x \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \right]. \quad (4.5.13)$$

Первое слагаемое в квадратных скобках правой части (4.5.13) равно нулю, т.к. волновая функция быстро обращается в нуль при  $|x| \rightarrow \infty$ ,

а производная от неё ограничена. Оставшиеся слагаемые в (4.5.13) обозначим

$$S \equiv \frac{\hbar}{i2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx; \quad (4.5.14)$$

$$T \equiv \frac{\hbar}{i2m} \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx, \quad (4.5.15)$$

так что

$$R \equiv S + T. \quad (4.5.16)$$

Таким образом, в соответствии с (4.5.12) получим:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = S + S^* + T + T^*. \quad (4.5.17)$$

Из (4.5.15) ясно, что  $T^* = -T$ , так что в (4.5.17)  $T + T^* = 0$ .

Вычислим  $S$  (4.5.14) по частям:

$$S = \frac{\hbar}{i2m} \left[ \psi^* \psi \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx \right]. \quad (4.5.18)$$

Первое слагаемое в правой части (4.5.18) равно нулю. Второе же слагаемое, как видно из исходного выражения для  $S$  (4.5.14), равно

$S^*$ . Отсюда следует, что  $S$  — действительная величина, и тогда из (4.5.17) получим:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = 2S = \frac{\hbar}{im} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx. \quad (4.5.19)$$

Но поскольку дифференциальный оператор, который заключён в скобки в подынтегральном выражении (4.5.19), есть оператор импульса (3.2.27),

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad (4.5.20)$$

то соотношению (4.5.19) можно придать вид

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}_x \psi dx \equiv \frac{1}{m} \langle \psi | \hat{p}_x | \psi \rangle. \quad (4.5.21)$$

Операторная скобка в правой части равенства (4.5.21) и есть среднее значение импульса микрочастицы: с учётом (4.5.20)

$$\overline{p_x} = \langle \psi | \hat{p}_x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx. \quad (4.5.22)$$

Итак, первая теорема Эренфеста доказана.

### 4.5.3. Доказательство второй теоремы П. Эренфеста

Докажем равенство (4.5.2).

Продифференцируем по времени выражение для среднего значения импульса (4.5.22). Полученное соотношение содержит в правой части два слагаемых:

$$\frac{d\overline{p_x}}{dt} = P + Q, \quad (4.5.23)$$

где

$$P = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx; \quad (4.5.24)$$

$$Q = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial t \partial x} dx. \quad (4.5.25)$$

Выражение (4.5.25) преобразуем путём интегрирования по частям:

$$Q = \frac{\hbar}{i} \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial t} dx \right]. \quad (4.5.26)$$

В выражении (4.5.26) первое слагаемое в квадратных скобках равно нулю, т.к. нормированная волновая функция, а вместе с ней и её производная по времени обращается в нуль при  $|x| \rightarrow \infty$ .

Сравнивая оставшийся вклад в  $Q$  (4.5.26) с  $P$ , убедимся, что  $Q = P^*$ , так что из (4.5.23) имеем:

$$\frac{d\overline{p_x}}{dt} = Q + Q^*, \quad (4.5.27)$$

где

$$Q = -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx. \quad (4.5.28)$$

Преобразуем выражение (4.5.28) для  $Q$ . Производную по времени от волновой функции выразим, используя уравнение Шрёдингера (4.5.7). В результате получим:

$$Q = R + S, \quad (4.5.29)$$

где

$$R = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx; \quad (4.5.30)$$

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx. \quad (4.5.31)$$

Тогда из (4.5.27), (4.5.29) с учётом (4.5.30), (4.5.31) получим:

$$\frac{d\overline{p_x}}{dt} = R + R^* + S + S^*, \quad (4.5.32)$$

причём

$$R^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} dx; \quad (4.5.33)$$

$$S^* = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx. \quad (4.5.34)$$

Преобразуем выражение для  $R^*$  (4.5.33) путём интегрирования по частям:

$$R^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx \right]. \quad (4.5.35)$$

В квадратных скобках выражения (4.5.35) первое слагаемое равно нулю (доказать это не так просто, как в предыдущих случаях: к доказательству требуется привлечь понятие плотности потока



вероятности, которое в данном курсе ещё не обсуждалось). Но тогда  $R^* = -R$ , и из (4.5.27) имеем:

$$\frac{d\overline{p_x}}{dt} = S + S^*. \quad (4.5.36)$$

Выражение в правой части соотношения (4.5.36) преобразуем так:

$$S + S^* = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi \left( \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi \frac{\partial(\psi\psi^*)}{\partial x} dx. \quad (4.5.37)$$

Вычисляя интеграл в правой части (4.5.37) по частям, получим:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi \frac{\partial(\psi\psi^*)}{\partial x} dx = \Phi \psi\psi^* \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \frac{\partial \Phi}{\partial x} dx. \quad (4.5.38)$$

Первое слагаемое в выражении (4.5.38) равно нулю, а второе есть среднее значение динамической переменной  $-\partial\Phi/\partial x$ .

Подставляя (4.5.37) с учётом (4.5.38) в (4.5.36), получим требуемое соотношение (4.5.2). Это и доказывает вторую теорему Эренфеста.

Как уже указывалось, теоремы Эренфеста можно сформулировать и доказать для трёхмерного случая. При доказательстве потребуются теоремы Грина из векторного анализа,

являющиеся обобщением теоремы «обычного» анализа об интегрировании по частям.

### **Вопросы для самопроверки**

4.5.1. Объясните физический смысл теорем П. Эренфеста.

4.5.2. При каких условиях теоремы П. Эренфеста приближенно описывают динамическое поведение нестационарной микросистемы? Чем определяется степень точности такого описания?

4.5.3. Почему теоремы П. Эренфеста не позволяют получить содержательную информацию о динамическом поведении микросистемы, находящейся в стационарном состоянии?

## 5. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТЕЙ

### 5.1. Коммутация операторов

#### 5.1.1. Основные правила алгебры операторов

В предыдущих разделах данного пособия мы уже использовали некоторые обозначения, позволяющие условно интерпретировать некоторые действия с операторами как алгебраические операции: приравнивание операторов друг другу, сложение операторов, умножение операторов и т.п. Подчеркнём, что подобные термины не следует понимать буквально: операторы — не величины, а способы преобразования объектов (чисел, векторов, функций). Поэтому необходимо чётко условиться, что подразумевается под каждым из таких терминов.

Ниже приведены и систематизированы основные определения и правила алгебры операторов. В качестве объектов, на которые воздействуют операторы, рассматриваются функции — элементы функционального пространства.

#### 1. Нулевой оператор $\hat{0}$ .

Результатом воздействия этого оператора на *любую* функцию является *ноль*:

$$\hat{0} \psi = 0. \quad (5.1.1)$$

## 2. Единичный оператор $\hat{1}$ .

Результатом воздействия этого оператора на *любую* функцию является *та же функция*:

$$\hat{1} \psi = \psi. \quad (5.1.2)$$

## 3. Равенство операторов.

Операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  *равны* друг другу,

$$\hat{F} = \hat{G}, \quad (5.1.3)$$

если для *любой* функции  $\psi$  выполняется равенство

$$\hat{F} \psi = \hat{G} \psi. \quad (5.1.4)$$

## 4. Умножение оператора на число.

Если  $c$  — число (действительное или комплексное), то результат воздействия оператора  $\hat{P} \equiv c \hat{F}$  на *любую* функцию  $\psi$  равен результату воздействия оператора  $\hat{F}$  на эту функцию  $\psi$ , умноженному на данное число:

$$\hat{P} \psi \equiv c \hat{F} \psi = c(\hat{F} \psi). \quad (5.1.5)$$

Промежуточное обозначение  $\hat{P}$  обычно не используют.

## 5. Сумма операторов.

Оператор  $\hat{S} \equiv \hat{F} + \hat{G}$  называется *суммой* операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$ , если для *любой* функции  $\psi$  выполняется равенство

$$\hat{S} \psi \equiv (\hat{F} + \hat{G}) \psi = \hat{F} \psi + \hat{G} \psi. \quad (5.1.6)$$

Промежуточное обозначение  $\hat{S}$  обычно не используют.

*Примечание 1.* Оператор, представляющий в квантовой механике физическую величину (динамическую переменную) микросистемы, имеет *размерность*, совпадающую с размерностью этой физической величины — см., например, равенство (3.1.3). Очевидно, что по правилу (5.1.6) можно складывать операторы только *одинаковой* размерности.

*Примечание 2.* Очевидно, что в смысле (5.1.3)  $\hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}$ . Можно сказать, что операция сложения операторов *коммутативна*, т.е. не зависит от порядка выполнения операций.

## 6. Линейная комбинация операторов.

Пусть  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  — операторы, а  $c_1$  и  $c_2$  — числа. *Линейной комбинацией* операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  называется сумма операторов (5.1.6), каждый из которых представляет собой произведение оператора на число (определение №4):

$$\hat{L} \equiv c_1 \hat{F} + c_2 \hat{G}.$$

При этом для *любой* функции  $\psi$  выполняется равенство

$$\hat{L} \psi \equiv (c_1 \hat{F} + c_2 \hat{G}) \psi = c_1 \hat{F} \psi + c_2 \hat{G} \psi. \quad (5.1.7)$$

Промежуточное обозначение  $\hat{L}$  обычно не используют.

*Примечание 1.* В линейную комбинацию (5.1.7) могут входить операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  разных размерностей, помноженные на константы  $c_1$  и  $c_2$  соответствующих размерностей, так что слагаемые в (5.1.7) имеют одинаковые размерности или являются безразмерными.

*Примечание 2.* Если  $c_1 = 1$ , а  $c_2 = -1$ , то линейная комбинация (5.1.7)  $\hat{F} - \hat{G}$  называется *разностью* операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$ .

*Примечание 3.* Равенство операторов (5.1.3) с учётом определения нулевого оператора (5.1.1) можно записать, используя определение разности операторов (см. примечание 2):

$$\hat{F} - \hat{G} = \hat{0}. \quad (5.1.8)$$

## 7. Произведение операторов.

Оператор  $\hat{F} \hat{G}$  называется *произведением* операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$ , если для *любой* функции  $\psi$  выполняется равенство

$$\hat{F} \hat{G} \psi = \hat{F} (\hat{G} \psi). \quad (5.1.9)$$

Равенство (5.1.9) подразумевает следующее правило действия оператора  $\hat{F} \hat{G}$  на функцию: сначала на эту функцию действует второй сомножитель  $\hat{G}$ , а затем на функцию  $\varphi \equiv \hat{G} \psi$  действует первый сомножитель  $\hat{F}$ .

*Примечание 1.* Операторы  $\hat{F} \hat{G}$  и  $\hat{G} \hat{F}$ , вообще говоря, различны (т.е. не равны в смысле определения №3), поскольку результат последовательного воздействия операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  на функцию  $\psi$ , как правило, зависит от порядка выполнения операций. Таким образом, операция умножения операторов в общем случае *не коммутативна*.

*Примечание 2.* Если  $\hat{F} \hat{G} = \hat{G} \hat{F}$  в смысле определения (5.1.3), то говорят, что операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  *коммутируют*.

*Примечание 3.* Любой оператор коммутирует сам с собой:  
*Доказательство* этого утверждения читатель без труда проделает самостоятельно.

## 8. Степень оператора.

Оператор  $\hat{F}^n$ , действие которого сводится к повторному  $n$  – кратному действию оператора  $\hat{F}$ , называется  $n$  –й степенью оператора  $\hat{F}$ :

$$\hat{F}^n \psi \equiv \hat{F} (\hat{F} (\dots n \text{ раз}) \psi) \dots). \quad (5.1.10)$$

Например, квадрат оператора — это случай  $n = 2$ :

$$\hat{F}^2 \psi \equiv \hat{F} (\hat{F} \psi). \quad (5.1.11)$$

Однозначность определений (5.1.10), (5.1.11) обеспечивается примечанием 3 к определению №7.

## 9. Обратный оператор.

Оператор  $\hat{F}^{-1}$  называется *обратным* оператору  $\hat{F}$ , если выполняются операторные равенства

$$\hat{F} \hat{F}^{-1} = \hat{F}^{-1} \hat{F} = \hat{1}. \quad (5.1.12)$$

При записи (5.1.12) использованы определения № 2, 3 и 7.

Из сформулированных определений вытекают **следствия**. Сформулируем их в виде теорем.

**Теорема 5.1.1.** Единичный оператор коммутирует с любым оператором, а их произведение равно самому оператору:

$$\hat{1} \hat{F} = \hat{F} \hat{1} = \hat{F}. \quad (5.1.13)$$

*Доказательство.* Вследствие определения №2 для любой функции  $\psi$  имеем:

$$\hat{1} \hat{F} \psi = \hat{1} (\hat{F} \psi) = \hat{F} \psi, \quad \hat{F} \hat{1} \psi = \hat{F} (\hat{1} \psi) = \hat{F} \psi.$$



Отсюда по определению №3 следует (5.1.13).

**Теорема 5.1.2.** Оператор  $(\hat{F}\hat{G})^{-1}$ , обратный оператору  $\hat{F}\hat{G}$  — произведению операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$ , — равен произведению обратных операторов  $\hat{F}^{-1}$  и  $\hat{G}^{-1}$  в обратном порядке:

$$(\hat{F}\hat{G})^{-1} = \hat{G}^{-1} \hat{F}^{-1}. \quad (5.1.14)$$

*Доказательство.* Запишем последовательность тождественных выражений:

$$(\hat{F}\hat{G})\hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1}\psi \equiv (\hat{F}\hat{G})\hat{G}^{-1}(\hat{F}^{-1}\psi) \equiv \hat{F}(\hat{G}\hat{G}^{-1}(\hat{F}^{-1}\psi)).$$

Далее, в соответствии с определениями (5.1.12) и (5.1.2), запишем

$$\hat{F}(\hat{G}\hat{G}^{-1}(\hat{F}^{-1}\psi)) = \hat{F}(\hat{1}(\hat{F}^{-1}\psi)) = \hat{F}(\hat{F}^{-1}\psi) = \hat{F}\hat{F}^{-1}\psi = \hat{1}\psi.$$

Таким образом, в соответствии с определением №3

$$(\hat{F}\hat{G})\hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1} \equiv (\hat{F}\hat{G})(\hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1}) = \hat{1}.$$

Но по определению (5.1.12) операторы, произведение которых фигурирует в полученном равенстве, являются взаимно обратными. Это и доказывает равенство (5.1.14).

### 5.1.2. Коммутатор операторов

*Коммутатором* операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  называется оператор

$$[\hat{F}, \hat{G}] \equiv \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}. \quad (5.1.15)$$

Порядок операторов в коммутаторе важен: очевидно, что

$$[\hat{G}, \hat{F}] \equiv \hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G} = -[\hat{F}, \hat{G}]. \quad (5.1.16)$$

Если операторы коммутируют,  $\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}$ , то их коммутатор равен нулевому оператору:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{0}. \quad (5.1.17)$$

Вследствие (5.1.13) и (5.1.17)

$$[\hat{F}, \hat{1}] = [\hat{1}, \hat{F}] = \hat{0}. \quad (5.1.18)$$

Из (5.1.16), а также из примечания 3 к определению 7 п/п. 5.1.1 очевидно, что для любого оператора

$$[\hat{F}, \hat{F}] = \hat{0}.$$

### 5.1.3. Коммутаторы операторов координат и проекций импульса

Вычислим коммутаторы операторов, которые представляют в квантовой механике динамические переменные.

В соответствии с основным свойством оператора координаты (3.3.1), (3.3.11) коммутирующими являются операторы разных координат  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ , действующие на волновые функции микрочастицы: например,

$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{y}\psi(t, x, y, z) &= \hat{x}(\hat{y}\psi(t, x, y, z)) = \\ &= \hat{x}(y\psi(t, x, y, z)) = y\hat{x}\psi(t, x, y, z) = yx\psi(t, x, y, z)\end{aligned}$$

и аналогично

$$\hat{y}\hat{x}\psi(t, x, y, z) = xy\psi(t, x, y, z) = yx\psi(t, x, y, z),$$

т.е.

$$[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{y}, \hat{x}] = \hat{0}.$$

В общем случае

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta] = \hat{0}; \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3. \quad (5.1.19)$$

Легко показать, что коммутируют между собой операторы, являющиеся произвольными функциями координат: в самом деле, поскольку для любой такой функции

$$f(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})\psi(x, y, z) = f(x, y, z)\psi(x, y, z),$$

то

$$[f(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}), g(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})] = \hat{0}. \quad (5.1.20)$$

Точно так же коммутируют между собой и операторы проекций импульса (3.2.39). Например,

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \hat{p}_y \psi &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left( -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y}; \\ \hat{p}_y \hat{p}_x \psi &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \left( -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y}, \end{aligned}$$

т.е.

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = \hat{0},$$

или в общем случае

$$[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = \hat{0}; \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3. \quad (5.1.21)$$

Коммутируют также операторы координаты и проекции импульса, относящиеся к разным степеням свободы микрочастицы: например,

$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{p}_y\psi &= \hat{x}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) = -i\hbar\hat{x}\frac{\partial\psi}{\partial y} = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial y}; \\ \hat{p}_y\hat{x}\psi &= \hat{p}_yx\psi = -i\hbar\frac{\partial(x\psi)}{\partial y} = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial y}\end{aligned}$$

или

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{p}_y, \hat{x}] = \hat{0}.$$

В общем виде

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = \hat{0}; \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3; \quad \alpha \neq \beta. \quad (5.1.22)$$

Однако операторы «одноимённых» координаты и проекции импульса *не коммутируют*. Так,

$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{p}_x\psi &= \hat{x}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = -i\hbar\hat{x}\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}; \\ \hat{p}_x\hat{x}\psi &= \hat{p}_xx\psi = -i\hbar\frac{\partial(x\psi)}{\partial x} = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} - i\hbar\psi,\end{aligned}$$

и, следовательно,

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{1}. \quad (5.1.23)$$

В общем виде

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha] = i\hbar \hat{1}; \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (5.1.24)$$

Выведем коммутационное соотношение между произвольной функцией оператора координаты  $f(\hat{x})$  [см. п/п. 3.4.3, (3.4.12)] и оператором «одноимённой» проекции импульса  $\hat{p}_x$ :

$$\begin{aligned} f(\hat{x})\hat{p}_x\psi &= f(\hat{x})\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = -i\hbar f(\hat{x})\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar f(x)\frac{\partial\psi}{\partial x}; \\ \hat{p}_x f(\hat{x})\psi &= \hat{p}_x f(x)\psi = -i\hbar\frac{\partial(f\psi)}{\partial x} = -i\hbar f(x)\frac{\partial\psi}{\partial x} - i\hbar\frac{df}{dx}\psi, \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$[f(\hat{x}), \hat{p}_x] = i\hbar\frac{df}{dx}\hat{1}. \quad (5.1.25)$$

**Задача 5.1.1.** Выведите коммутационное соотношение между операторами импульса  $\hat{p}_x$  и Гамильтона  $\hat{H}$  (3.4.22)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \Phi(t, x)\hat{1}$$

микрочастицы с одной степенью свободы:

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial x} \hat{1}. \quad (5.1.26)$$

*Примечание.* При выводе используйте доказанные выше утверждения о коммутации оператора с самим собой и о коммутационном соотношении между операторами импульса и функции координаты. Результат проверьте непосредственным вычислением.

**Задача 5.1.2.** Выведите коммутационное соотношение между операторами координаты  $\hat{x}$  и Гамильтона  $\hat{H}$  микрочастицы с одной степенью свободы:

$$[\hat{H}, \hat{x}] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x. \quad (5.1.27)$$

*Примечание 1.* При выводе используйте доказанные выше утверждения о коммутации любых функций операторов координат.

*Примечание 2.* Используйте коммутационное соотношение между операторами квадрата проекции импульса и одноимённой координаты:

$$[\hat{p}_x^2, \hat{x}] = -2i\hbar \hat{p}_x. \quad (5.1.28)$$

Докажем соотношение (5.1.28), используя коммутационное соотношение (5.1.23). Последующие выкладки в комментариях не нуждаются.

$$[\hat{p}_x^2, \hat{x}] = \hat{p}_x^2 \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x^2;$$

$$\hat{p}_x^2 \hat{x} = \hat{p}_x (\hat{p}_x \hat{x}) = \hat{p}_x (\hat{x} \hat{p}_x - i\hbar \hat{1}) = \hat{p}_x \hat{x} \hat{p}_x - i\hbar \hat{p}_x;$$

$$\hat{p}_x \hat{x} \hat{p}_x = (\hat{p}_x \hat{x}) \hat{p}_x = (\hat{x} \hat{p}_x - i\hbar \hat{1}) \hat{p}_x = \hat{x} \hat{p}_x^2 - i\hbar \hat{p}_x;$$

$$\hat{p}_x^2 \hat{x} = \hat{x} \hat{p}_x^2 - 2i\hbar \hat{p}_x.$$

Перенеся  $\hat{x} \hat{p}_x^2$  в левую часть последнего равенства, получим требуемое соотношение.

### Вопросы для самопроверки

5.1.1. Можно ли построить оператор, который являлся бы дробной степенью исходного оператора?

5.1.2. Выведите самостоятельно выражение для коммутатора операторов координаты и кинетической энергии микрочастицы.

5.1.3. Выведите самостоятельно выражение для коммутатора операторов проекции импульса и потенциальной энергии микрочастицы.



## 5.2. Свойства произведений операторов

### 5.2.1. Оператор, сопряжённый произведению операторов

**Теорема 5.2.1.** Оператор  $(\hat{F}\hat{G})^+$ , сопряжённый произведению операторов  $\hat{F}\hat{G}$ , равен произведению сопряжённых операторов в обратном порядке:

$$(\hat{F}\hat{G})^+ = \hat{G}^+ \hat{F}^+. \quad (5.2.1)$$

*Доказательство.* В соответствии с определением сопряжённого оператора (4.2.5) для любых функций  $\psi$  и  $\varphi$  имеем:

$$\langle \psi | (\hat{F}\hat{G})^+ | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hat{F}\hat{G} | \psi \rangle^* = \dots$$

(обозначаем  $\hat{G}\psi \equiv \psi_1$ )

$$\dots = \langle \varphi | \hat{F} | \psi_1 \rangle^* = \langle \psi_1 | \hat{F}^+ | \varphi \rangle = \dots$$

(обозначаем  $\hat{F}^+ \varphi = \varphi_1$ )

$$\begin{aligned} \dots &= \langle \psi_1 | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle^* = \langle \varphi_1 | \hat{G} | \psi \rangle^* = \\ &= \langle \psi | \hat{G}^+ | \varphi_1 \rangle = \langle \psi | \hat{G}^+ \hat{F}^+ | \varphi \rangle, \end{aligned}$$

или, окончательно,

$$\langle \psi | (\hat{F}\hat{G})^+ | \varphi \rangle = \langle \psi | \hat{G}^+ \hat{F}^+ | \varphi \rangle.$$

Но поскольку полученное равенство выполняется для *любых* функций  $\psi$  и  $\varphi$ , то выполняется и операторное равенство (5.2.1), что и требовалось доказать.

### **Следствия теоремы 5.2.1.**

*Следствие 5.2.1.1.* Оператор, сопряжённый произведению самосопряжённых операторов, вообще говоря, не является самосопряжённым.

*Доказательство.* Пусть  $\hat{F} = \hat{F}^+$  и  $\hat{G} = \hat{G}^+$ . Тогда в соответствии с теоремой 5.2.1

$$(\hat{F}\hat{G})^+ = \hat{G}^+ \hat{F}^+ = \hat{G} \hat{F}, \quad (5.2.2)$$

и, следовательно,

$$(\hat{F}\hat{G})^+ \neq \hat{F} \hat{G}.$$

Таким образом, оператор  $(\hat{F}\hat{G})^+$  действительно не является самосопряжённым, что и требовалось доказать.

*Следствие 5.2.1.2.* Если самосопряжённые операторы коммутируют,  $\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}$ , то оператор, сопряжённый произведению этих операторов, является самосопряжённым:

$$(\hat{F}\hat{G})^+ = \hat{F} \hat{G}. \quad (5.2.3)$$

*Доказательство* непосредственно следует из (5.2.2) и условия рассматриваемого следствия.

*Следствие 5.2.1.3.* Если оператор  $\hat{F}$  — самосопряжённый, то любая его степень  $\hat{F}^n$  [определение №8 из п/п. 5.1.1, равенство (5.1.10)] также является самосопряжённым оператором.

*Доказательство.* Самосопряжённость оператора  $\hat{F}^2 = \hat{F} \hat{F}$  (5.1.11) вытекает непосредственно из *следствия 5.2.1.2*. Для этого в равенстве (5.2.3) следует положить  $\hat{G} = \hat{F}$ .

Далее воспользуемся методом математической индукции. Допустим, что оператор  $\hat{G} = \hat{F}^{n-1}$  — самосопряжённый. Тогда в соответствии с (5.2.3) и оператор

$$\hat{F}^n = \hat{F} \hat{G} = \hat{F} \hat{F}^{n-1} = \hat{F}^{n-1} \hat{F} = \hat{G} \hat{F}$$

— самосопряжённый, что и требовалось доказать.

*Следствие 5.2.1.4.* Если оператор  $\hat{F}$  — самосопряжённый, то любая его действительная функция  $f(\hat{F})$  — самосопряжённый оператор.

*Доказательство.* По определению (3.4.5) действительная функция оператора представляет собой линейную комбинацию его степеней с действительными коэффициентами. Поэтому в соответствии со *следствием 5.2.1.3* из *теоремы 5.2.1* и равенством (4.2.12) из *теоремы 4.2.3* такое выражение является самосопряжённым оператором, что и требовалось доказать.

## 5.2.2. Самосопряжённые комбинации самосопряжённых операторов

**Теорема 5.2.2.** Если операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  — самосопряжённые, т.е.  $\hat{F} = \hat{F}^+$  и  $\hat{G} = \hat{G}^+$ , то оператор  $\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}$  — также самосопряжённый:

$$(\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F})^+ = \hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}. \quad (5.2.4)$$

*Доказательство.* Последующие выкладки основаны на определении сопряжённого оператора (4.2.5) и соотношении (5.2.1) и не нуждаются в дополнительных комментариях.

$$\begin{aligned} (\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F})^+ &= (\hat{F}\hat{G})^+ + (\hat{G}\hat{F})^+ = \hat{G}^+ \hat{F}^+ + \hat{F}^+ \hat{G}^+ = \\ &= \hat{G}\hat{F} + \hat{F}\hat{G} = \hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}. \end{aligned}$$

В итоге получено равенство (5.2.4), которое и требовалось доказать.

**Теорема 5.2.3.** Если операторы  $\hat{F} = \hat{F}^+$  и  $\hat{G} = \hat{G}^+$  — самосопряжённые, то оператор  $i[\hat{F}, \hat{G}]$  — также самосопряжённый.

*Доказательство.* Вначале, используя теорему 5.2.1, покажем, что  $[\hat{F}, \hat{G}]$  — не самосопряжённый, а «антисопряжённый» оператор:

$$[\hat{F}, \hat{G}]^+ = (\hat{F}\hat{G})^+ - (\hat{G}\hat{F})^+ = \hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G} = -(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}) = -[\hat{F}, \hat{G}]. \quad (5.2.5)$$

Затем применим, равенство (4.2.8) из теоремы 4.2.2 и соотношение (5.2.5):

$$(i[\hat{F}, \hat{G}])^+ = -i[\hat{F}, \hat{G}]^+ = i[\hat{F}, \hat{G}]. \quad (5.2.6)$$

Но равенство (5.2.6) и показывает, что заданный в условии теоремы оператор — действительно самосопряжённый.

### 5.2.3. Положительно определённые операторы

**Теорема 5.2.4.** Операторы  $\hat{F}\hat{F}^+$  и  $\hat{F}^+\hat{F}$ , где  $\hat{F}$  — любой оператор, положительно определённые.

*Определение.* Оператор  $\hat{P}$  называется положительно определённым, если для любой функции  $\psi$  он удовлетворяет условию

$$\langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle \geq 0. \quad (5.2.7)$$

Очевидно, любой положительно определённый оператор является самосопряжённым — см. теорему 4.2.4 и соотношение (4.2.13).

Докажем, что операторы  $\hat{F}\hat{F}^+$  и  $\hat{F}^+\hat{F}$  — самосопряжённые. Действительно:

$$(\hat{F}\hat{F}^+)^+ = (\hat{F}^+)^+ \hat{F}^+ = \hat{F}\hat{F}^+ \quad (5.2.8)$$

и аналогично

$$(\hat{F}^+\hat{F})^+ = \hat{F}^+(\hat{F}^+)^+ = \hat{F}^+\hat{F}. \quad (5.2.9)$$

Теперь докажем, что оператор  $\hat{F}\hat{F}^+$  — положительно определённый, т.е. удовлетворяет условию (5.2.7). Действительно: обозначим

$$\hat{F}^+\psi = \psi_1.$$

Тогда, используя определение сопряжённого оператора (4.2.5) и свойство скалярного произведения (4.1.6), получим

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{F}\hat{F}^+ | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{F} | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{F}^+ | \psi \rangle^* = \\ &= \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle^* = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle. \end{aligned}$$

Но последнее слагаемое в полученном равенстве есть норма функции  $\psi_1$  (4.1.7):

$$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \equiv \int \psi_1^* \psi_1 dq = \int |\psi_1|^2 dq \geq 0.$$

Следовательно,

$$\langle \psi | \hat{F}\hat{F}^+ | \psi \rangle \geq 0, \quad (5.2.10)$$

так что рассматриваемый оператор удовлетворяет условию (5.2.7) и, стало быть, действительно является положительно определённым.

Аналогично доказывается, что

$$\langle \psi | \hat{F}^+ \hat{F} | \psi \rangle \geq 0. \quad (5.2.11)$$

## Вопросы для самопроверки

5.2.1. Выведите самостоятельно правило вычисления оператора, сопряжённого произведению операторов.

5.2.2. Является ли коммутатор самосопряжённых операторов тоже самосопряжённым оператором? Проверьте.

5.2.3. Как можно «исправить» коммутатор самосопряжённых операторов, чтобы он стал тоже самосопряжённым оператором?

5.2.4. Докажите, что оператор кинетической энергии микрочастицы является положительно определённым.

## 5.3. Теорема В. Гайзенберга

### 5.3.1. Неравенство Гайзенберга

**Теорема 5.3.1.** Пусть  $\hat{F} = \hat{F}^+$ ,  $\hat{G} = \hat{G}^+$  и  $\hat{\xi} = i[\hat{F}, \hat{G}]$ . Тогда выполняется неравенство Гайзенберга:

$$\overline{F^2} \overline{G^2} \geq \frac{1}{4} \overline{\xi^2} \geq 0. \quad (5.3.1)$$

*Доказательство.* Рассмотрим оператор

$$\hat{P} = x\hat{F} - i\hat{G},$$



где  $x$  — действительная величина. Сопряжённый оператор [равенство (4.2.8) из *теоремы 4.2.2*]:

$$\hat{P}^+ = x\hat{F} + i\hat{G}.$$

Используя *теорему 5.2.2*, построим положительно определённый оператор

$$\hat{\eta} = \hat{P}\hat{P}^+ = (x\hat{F} - i\hat{G})(x\hat{F} + i\hat{G}) = x^2\hat{F}^2 + x\hat{\xi} + \hat{G}^2.$$

Вычислим среднее значение (4.4.7) рассмотренного оператора в состоянии микросистемы, которое описывается волновой функцией  $\psi$ :

$$\bar{\eta} = \langle \psi | \hat{\eta} | \psi \rangle = x^2 \overline{F^2} + x\bar{\xi} + \overline{G^2}.$$

В соответствии с неравенством (5.2.10) из *теоремы 5.2.4*  $\bar{\eta} \geq 0$  и, следовательно,

$$x^2 \overline{F^2} + x\bar{\xi} + \overline{G^2} \geq 0. \quad (5.3.2)$$

Все три коэффициента полученного квадратного трёхчлена, будучи средними значениями самосопряжённых операторов, вследствие равенства (4.2.13) из *теоремы 4.2.4* действительны [вследствие равенства (5.2.6) из *теоремы 5.2.3* оператор  $\hat{\xi} = \hat{\xi}^+$  —

самосопряжённый]. Поэтому квадратный трёхчлен (5.3.2) не имеет действительных корней и, следовательно, в соответствии с известной теоремой элементарной алгебры его дискриминант неположителен:

$$\bar{\xi}^2 - 4\overline{F^2} \overline{G^2} \leq 0. \quad (5.3.3)$$

А из (5.3.3) вытекает неравенство (5.3.1), которое требуется доказать.

### 5.3.2. Следствие неравенства Гайзенберга

Рассмотрим операторы отклонений физических величин (динамических переменных микросистемы)  $F$  и  $G$  от их средних значений:

$$\hat{f} = \hat{F} - \bar{F}\hat{1}; \quad \hat{g} = \hat{G} - \bar{G}\hat{1}. \quad (5.3.4)$$

Поскольку операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  — самосопряжённые, то  $\hat{f} = \hat{f}^+$  и  $\hat{g} = \hat{g}^+$ .

Кроме того,

$$\hat{\xi} \equiv i[\hat{F}, \hat{G}] = i[\hat{f}, \hat{g}]. \quad (5.3.5)$$

Действительно,

$$[\hat{f}, \hat{g}] = (\hat{F} - \bar{F}\hat{1})(\hat{G} - \bar{G}\hat{1}) - (\hat{G} - \bar{G}\hat{1})(\hat{F} - \bar{F}\hat{1}) = \\ = (\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}) - \bar{F}\hat{G} - \bar{G}\hat{F} + \bar{G}\hat{F} + \bar{F}\hat{G} = [\hat{F}, \hat{G}].$$

Тогда из теоремы Гайзенберга [теорема 5.3.1, равенство (5.3.1)] следует, что

$$\overline{f^2} \overline{g^2} \geq \frac{1}{4} \bar{\xi}^2. \quad (5.3.6)$$

Следовательно, *среднеквадратичные отклонения* физических величин (динамических переменных микросистемы)  $F$  и  $G$  от их средних значений

$$\Delta F_{rms} \equiv \left( \overline{f^2} \right)^{1/2}; \quad \Delta G_{rms} \equiv \left( \overline{g^2} \right)^{1/2} \quad (5.3.7)$$

(*rms* — root-means-square), которые можно рассматривать как количественную меру *неопределённостей* значений физических величин (динамических переменных микросистемы)  $F$  и  $G$  в состоянии, описываемом волновой функцией  $\psi$  (по которой проводится усреднение), как видно из (5.3.6), (5.3.7), находятся между собой в следующем соотношении:

$$\Delta F_{rms} \Delta G_{rms} \geq \frac{1}{2} |\bar{\xi}|; \quad \bar{\xi} = \overline{i[\hat{F}, \hat{G}]}. \quad (5.3.8)$$

Полученное неравенство (5.3.8) есть *общее соотношение неопределённостей Гайзенберга*.

### 5.3.3. Соотношение неопределённостей между координатой и проекцией импульса

Рассмотрим, например,  $x$  и  $p_x$ . Подсчитаем величины, фигурирующие в соотношении неопределённостей (5.3.8):

$$\hat{\xi} = i[\hat{x}, \hat{p}_x] = -\hbar \hat{1}; \quad \bar{\xi} = -\hbar; \quad |\bar{\xi}| = \hbar.$$

Подставляя эти величины в общее соотношение неопределённостей (5.3.8), получим искомое конкретное соотношение неопределённостей между величинами  $x$  и  $p_x$ :

$$\Delta x_{rms} \Delta p_{x, rms} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.3.9)$$

Напомним, что *принцип неопределённостей Гайзенберга* (п/п. 1.4.3) применительно к тем же физическим величинам формулируется как «порядковое» неравенство

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim \hbar.$$

В этом неравенстве не конкретизировано, что такое «неопределённость» с количественной точки зрения, и поэтому само неравенство носит характер порядковой оценки «снизу» произведения неопределённостей.

В соотношении неопределённостей (5.3.9) по определению (5.3.4), (5.3.7) принято, что неопределённость случайной величины — это её среднеквадратичное отклонение, значение которого может быть рассчитано точно для данного состояния микросистемы, если известна описывающая его волновая функция. Само же соотношение (5.3.9) даёт точную нижнюю границу произведения среднеквадратичных отклонений.

Выведенное соотношение неопределённостей показывает, что «одноимённые» координата и импульс микрочастицы *никогда* не могут иметь одновременно определённые значения. Это объясняется тем, что среднее значение  $\overline{i[\hat{x}, \hat{p}_x]}$  не обращается в нуль ни в каком состоянии микрочастицы и всегда равно конечной величине  $-\hbar$ .

Вместе с тем «разноимённые» координаты и импульсы, а также и любые импульсы, и любые координаты в соответствии с соотношением неопределённостей могут одновременно иметь определённые значения, т.к. соответствующие операторы коммутируют друг с другом. Например,

$$\Delta x_{rms} \Delta y_{rms} \geq 0;$$

$$\Delta x_{rms} \Delta p_{y, rms} \geq 0;$$

$$\Delta p_{x, rms} \Delta p_{y, rms} \geq 0. \quad (5.3.10)$$

**Задача 5.3.1.** Выведите соотношение неопределённостей между энергией и импульсом:

$$\Delta H_{rms} \Delta p_{x, rms} \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|. \quad (5.3.11)$$

**Задача 5.3.2.** Выведите соотношение неопределённостей между энергией и координатой:

$$\Delta H_{rms} \Delta x_{rms} \geq \frac{\hbar}{4m} |\bar{p}_x|. \quad (5.3.12)$$

*Примечание.* При решении задач 5.3.1, 5.3.2 воспользуйтесь выведенными ранее коммутационными соотношениями между операторами соответствующих величин (5.1.27), (5.1.28) (задачи 5.1.1, 5.1.2).

### Вопросы для самопроверки

5.3.1. Выведите самостоятельно неравенство В. Гайзенберга.

5.3.2. Какому из основных принципов квантовой физики придаёт количественный смысл следствие из неравенства В. Гайзенберга?

5.3.3. Выведите самостоятельно соотношение неопределённостей между оператором координаты и кинетической энергии микрочастицы.

5.3.4. Выведите самостоятельно соотношение неопределённостей между проекцией импульса и потенциальной энергией микрочастицы.

## **5.4. Общие собственные функции коммутирующих самосопряжённых операторов**

### **5.4.1. Прямая теорема об общих собственных функциях коммутирующих операторов**

**Теорема 5.4.1.** Если операторы коммутируют, то у них — общая система собственных функций.

*Доказательство.* Пусть

$$\hat{F} \psi_F = F \psi_F \quad (5.4.1)$$

и

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{0}. \quad (5.4.2)$$

Воздействуем на уравнение (5.4.1) «слева» оператором  $\hat{G}$ :

$$\hat{G} \hat{F} \psi_F = \hat{G} F \psi_F = F \hat{G} \psi_F. \quad (5.4.3)$$

Используя условие коммутативности, в левой части равенства (5.4.3) заменим порядок следования операторов:

$$\hat{F}(\hat{G}\psi_F) = F(\hat{G}\psi_F). \quad (5.4.4)$$

Соотношение (5.4.4) показывает, что функция  $\hat{G}\psi_F$  является *собственной функцией* оператора  $\hat{F}$ , принадлежащей собственному значению  $F$ , поскольку результат воздействия на неё оператора  $\hat{F}$  — это та же самая функция, умноженная на число  $F$ .

Но у оператора  $\hat{F}$  по условию уже есть собственная функция, принадлежащая собственному значению  $F$ : это  $\psi_F$ . Следовательно, «новая» собственная функция должна совпадать со «старой» с точностью до численного множителя. Обозначим его  $G$ :

$$\hat{G}\psi_F = G\psi_F. \quad (5.4.5)$$

Полученное равенство (5.4.5) означает, что функция  $\psi_F$ , по-прежнему оставаясь собственной функцией оператора  $\hat{F}$ , одновременно является собственной функцией оператора  $\hat{G}$ , принадлежащей его собственному значению  $G$ .

Таким образом, любая собственная функция оператора  $\hat{F}$  вместе с тем является собственной функцией коммутирующего с ним оператора  $\hat{G}$ , и наоборот. Теорема доказана.



Чтобы подчеркнуть то, что у операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  — *общие собственные функции*, принадлежащие одновременно собственным значениям  $F$  и  $G$ , будем использовать обозначение

$$\hat{F} \psi_{F,G} = F \psi_{F,G}; \quad \hat{G} \psi_{F,G} = G \psi_{F,G}. \quad (5.4.6)$$

Интересно отметить, что в доказательстве теоремы не использовалось условие, что рассматриваемые операторы — самосопряжённые.

#### 5.4.2. Обратная теорема об общих собственных функциях коммутирующих самосопряжённых операторов

**Теорема 5.4.2.** Если у самосопряжённых операторов — общая система собственных функций, то они коммутируют.

*Доказательство.* Пусть у самосопряжённых операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  — общая система собственных функций (5.4.6)

$$\hat{F} \psi_{F,G} = F \psi_{F,G}; \quad \hat{G} \psi_{F,G} = G \psi_{F,G}.$$

Воздействуем на первое из этих равенств оператором  $\hat{G}$ , а на второе — оператором  $\hat{F}$ :

$$\begin{aligned} \hat{G} \hat{F} \psi_{F,G} &= \hat{G} F \psi_{F,G} = F \hat{G} \psi_{F,G} = F G \psi_{F,G}; \\ \hat{F} \hat{G} \psi_{F,G} &= \hat{F} G \psi_{F,G} = G \hat{F} \psi_{F,G} = G F \psi_{F,G} \end{aligned}$$

Вычтя почленно первое полученное соотношение из второго, получим:

$$[\hat{F}, \hat{G}]\psi_{F,G} = 0. \quad (5.4.7)$$

Полученное соотношение (5.4.7), конечно, ещё не доказывает, что коммутатор рассматриваемых операторов равен нулевому оператору: для этого требуется, чтобы равнялся нулю результат воздействия коммутатора на *любую* функцию  $\psi$ , а не только на *любую* общую собственную функцию этих операторов.

Поскольку, однако, по условию теоремы операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  — самосопряжённые, то их система собственных функций — *полная* (п/п. 4.3.3). Разложим *произвольную* функцию  $\psi$  по этой полной системе функций. Используем обозначение, которое можно будет одновременно применять к случаям как дискретного, так и непрерывного спектра собственных значений операторов, т.е. в одних случаях рассматривать как сумму ряда по всем собственным функциям, а в других — как интеграл по собственным значениям:

$$\psi(q) = \sum_{(F,G)} c_{F,G} \psi_{F,G}(q) \equiv \begin{cases} \sum_m \sum_n c_{m,n} \psi_{F_m, G_n} \\ \int \int_{FG} c(F, G) \psi_{F,G} dF dG. \end{cases} \quad (5.4.8)$$

Теперь воздействуем коммутатором  $[\hat{F}, \hat{G}]$  на обе части этого равенства и воспользуемся доказанным выше соотношением (5.4.7):

$$[\hat{F}, \hat{G}]\psi(q) = \text{SSc}_{F,G}[\hat{F}, \hat{G}]\psi_{F,G}(q) = 0. \quad (5.4.9)$$

$(F, G)$

Поскольку в (5.4.9) фигурирует *любая* функция  $\psi$ , то теперь теорема доказана:  $[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{0}$ .

### **Вопросы для самопроверки**

5.4.1. Всегда ли динамические переменные, операторы которых коммутируют, имеют одновременно определённые значения?

5.4.2. Могут ли иметь одновременно определённые значения динамические переменные, операторы которых не коммутируют?

## **5.5. Когда динамические переменные могут, а когда не могут одновременно иметь определённые значения?**

### **5.5.1. Что запрещают соотношения неопределённостей**

Как мы видели из материала, изложенного в п. 5.4, ответ на вопрос, который сформулирован в заголовке данного пункта, зависит от того, коммутируют ли самосопряжённые операторы, представляющие рассматриваемые динамические переменные.

Подчеркнём, что в данном контексте слово «одновременно» не имеет никакого отношения ко времени. Выражение «физические величины  $F$  и  $G$  имеют / не имеют одновременно определённые значения» означает, что *в данном состоянии* микросистемы и та, и другая величина являются не случайными, а детерминированными. Это позволяет измерить значения обеих рассматриваемых величин *в одном и том же* эксперименте.

Если операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$ , представляющие физические величины микросистемы  $F$  и  $G$ , коммутируют, т.е.  $[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{0}$ , то соотношение неопределённостей (5.3.8)

$$\Delta F_{rms} G_{rms} \geq \frac{1}{2} \overline{i[\hat{F}, \hat{G}]}. \quad (5.5.1)$$

для этих величин *всегда* имеет вид

$$\Delta F_{rms} \Delta G_{rms} \geq 0. \quad (5.5.2)$$

Соотношение (5.5.2) означает, что физические величины  $F$  и  $G$  в *любом* состоянии рассматриваемой микросистемы *могут* одновременно иметь определённые значения.

Однако даже если операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  *не коммутируют*, т.е.  $[\hat{F}, \hat{G}] \neq \hat{0}$ , но в *некотором* состоянии микросистемы, описываемом волновой функцией  $\psi$ , *среднее* значение коммутатора равно нулю,  $\overline{[\hat{F}, \hat{G}]} = 0$ , то соотношение неопределённостей (5.5.1) будет иметь тот же вид (5.5.2) — с нулём в правой части неравенства. Теперь оно означает, что физические величины  $F$  и  $G$  в *данном* состоянии микросистемы *могут* одновременно иметь определённые значения.

Если же  $\xi = \overline{i[\hat{F}, \hat{G}]} \neq 0$ , то физические величины  $F$  и  $G$  *не могут* в *данном* состоянии микросистемы иметь одновременно определённых значений, т.к., как видно из (5.5.1),

$$\Delta F_{rms} \Delta G_{rms} \geq \frac{1}{2} \overline{i[\hat{F}, \hat{G}]} > 0. \quad (5.5.3)$$

Наконец, если коммутатор операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  отличен от нуля,  $[\hat{F}, \hat{G}] \neq \hat{0}$ , а его среднее значение всегда отлично от нуля,  $\overline{[\hat{F}, \hat{G}]} \neq 0$ , то физические величины  $F$  и  $G$  не могут иметь одновременно определённых значений *никогда*, т.е. ни в одном

состоянии микросистемы. Типичным примером таких динамических переменных являются «одноимённые» (или, точнее, сопряжённые) координата  $x$  и импульс  $p_x$  микрочастицы. Как видно из соотношения (5.1.23), среднее значение коммутатора операторов этих величин

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

отлично от нуля, независимо от волновой функции, используемой для усреднения. Поэтому рассматриваемые физические величины ни при каких обстоятельствах не могут одновременно иметь определённые значения.

### **5.5.2. Что разрешают теоремы об общих собственных функциях коммутирующих самосопряжённых операторов**

Заметим, однако, что если соотношение неопределённостей *не запрещает* двум физическим величинам  $F$  и  $G$  одновременно иметь определённые значения, то это вовсе не означает, что данные величины *должны* их иметь.

«Разрешительный» характер носит *теорема 5.4.1* о коммутирующих самосопряжённых операторах: если операторы *коммутируют*, то соответствующие физические величины *обязательно всегда* имеют одновременно определённые значения.

Вместе с тем если операторы *не коммутируют*, то теорема о коммутирующих самосопряжённых операторах не запрещает

соответствующим физическим величинам иметь одновременно определённые значения в тех или иных состояниях микросистемы.

Примером подобной ситуации являются проекции вектора момента импульса  $M_x$ ,  $M_y$  и  $M_z$  (п.п. 6.1, 6.2), коммутаторы операторов которых (6.2.2) не являются нулевыми операторами. В большинстве ситуаций эти три величины не могут иметь одновременно определённые значения. Однако в том состоянии микрочастицы, когда квадрат вектора момента импульса равен нулю,  $M^2 = 0$ , все три рассматриваемые величины по очевидной с физической точки зрения причине тоже равны нулю,  $M_x = M_y = M_z = 0$ , т.е. имеют одновременно определённые (нулевые) значения (см. конец п/п. 6.3.3).

### **Вопросы для самопроверки**

5.5.1. Каков физический смысл с позиций теорем о собственных функциях и собственных значениях самосопряжённых операторов можно придать следствию из неравенства В. Гайзенберга для проекций координат и импульса микрочастицы?

5.5.2. Можно ли утверждать, что если операторы, представляющие две динамические переменные, не коммутируют, то эти динамические переменные никогда не могут одновременно иметь определённые значения?

## 5.6. Динамическое уравнение Гайзенберга

### 5.6.1. Скорость изменения среднего значения динамической переменной

Вычислим производную по времени от среднего значения динамической переменной, определяемого формулой (4.4.7):

$$\frac{d\bar{F}}{dt} = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{F} \psi(t, q) dq + \int \psi^*(t, q) \hat{F} \frac{\partial \psi}{\partial t} dq \equiv A + B. \quad (5.6.1)$$

Входящие в (5.6.1) частные производные по времени от волновой функции и её комплексно сопряжённой найдём из уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi; \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi; \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} (\hat{H} \psi)^*, \quad (5.6.2)$$

где  $\hat{H}$  — оператор Гамильтона микросистемы, представляющий её функцию Гамильтона.

Преобразуем первое слагаемое в правой части (5.6.1), используя (5.6.2) и соотношения теории сопряжённых операторов (п. 4.2 и 5.2):

$$A = -\frac{1}{i\hbar} \int (\hat{H} \psi)^* \hat{F} \psi dq = -\frac{1}{i\hbar} \left[ \int \psi^* \hat{F} (\hat{H} \psi) dq \right]^* = \dots$$



[использовано определение самосопряжённого оператора (4.2.10)]

$$\dots = -\frac{1}{i\hbar} \left[ \int \psi^* (\hat{F}\hat{H}) \psi dq \right]^* = -\frac{1}{i\hbar} \left[ \int \psi^* (\hat{F}\hat{H})^+ \psi dq \right]$$

[использовано определение сопряжённого оператора (4.2.5)].

Второе слагаемое из (5.6.1) с учётом (5.6.2) примет вид

$$B = \frac{1}{i\hbar} \left[ \int \psi^* (\hat{F}\hat{H}) \psi dq \right].$$

Окончательно получим из (5.6.1) выражение

$$\frac{d\bar{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* [(\hat{F}\hat{H}) - (\hat{F}\hat{H})^+] \psi dq. \quad (5.6.3)$$

Поскольку  $\hat{F}$  и  $\hat{H}$  — самосопряжённые операторы, то, используя *теорему 5.2.1*, имеем:  $(\hat{F}\hat{H})^+ = \hat{H}^+ \hat{F}^+ = \hat{H}\hat{F}$ . В итоге из (5.6.3) получим соотношение

$$\frac{d\bar{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* [\hat{F}, \hat{H}] \psi dq, \quad (5.6.4)$$

где

$$[\hat{F}, \hat{H}] \equiv \hat{F}\hat{H} - \hat{H}\hat{F}$$

— коммутатор операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{H}$ .

Соотношение (5.6.4) с учётом (4.4.7) запишем в виде

$$\frac{d\bar{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\bar{\hat{F}}, \bar{\hat{H}}], \quad (5.6.5)$$

где

$$[\bar{\hat{F}}, \bar{\hat{H}}] = \langle \psi | [\hat{F}, \hat{H}] | \psi \rangle.$$

Соотношение (5.6.5) называется уравнением Гайзенберга для среднего значения динамической переменной. В «матричной механике» В. Гайзенберга уравнение (5.6.5) используется для самих операторов:

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}].$$

Здесь мы не имеем возможности вдаваться в обсуждение вопроса о том, что означает производная по времени от оператора и каков смысл «собственно» уравнения Гайзенберга. Однако уравнением Гайзенберга для средних значений динамических переменных (5.6.5) можно успешно воспользоваться.

## 5.6.2. Уравнения Эренфеста как частные случаи уравнений Гайзенберга

В качестве примера применим уравнение Гайзенберга для средних значений динамических переменных (5.6.5) к координате  $x$  и импульсу  $p_x$  микрочастицы.

Коммутаторы соответствующих операторов с оператором Гамильтона микрочастицы вычислены в *задачах 5.1.1* и *5.1.2*:

$$[\hat{H}, \hat{x}] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x; \quad [\hat{H}, \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial x} \hat{1}. \quad (5.6.6)$$

Подставляя выражения (5.6.6) в (5.6.5), получим соответственно:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{1}{m} \overline{p_x}; \quad \frac{d\overline{p_x}}{dt} = -\overline{\frac{\partial \Phi}{\partial x}}. \quad (5.6.7)$$

Соотношения (5.6.7) суть *первое и второе уравнения Эренфеста* — см. *теоремы 5.6.1* и *5.6.2*.

Нельзя не заметить, насколько проще, изящней и «красивее» выполняется вывод этих соотношений с помощью уравнение Гайзенберга для средних значений динамических переменных по сравнению с тем довольно громоздким «прямым» подходом, который использовался при доказательстве теорем Эренфеста в п. 4.5 (п/пп. 4.5.2 и 4.5.3). Впрочем, если внимательно взглядеться в выкладки, то можно заметить, что преобразования, выполняемые в

п/пп. 4.5.2 и 4.5.3, фактически те же самые, что при выводе коммутационных соотношений (5.6.6) и динамического уравнения (5.6.5). Только здесь они проделаны в обобщённом свёрнутом виде, а там — для каждого конкретного случая отдельно и по-своему.

### **Вопросы для самопроверки**

5.6.1. Почему нельзя составить уравнение, которое бы описывало скорость изменения самой динамической переменной микросистемы, а не её среднего значения?

5.6.2. При выводе уравнений Эренфеста из уравнения Шрёдингера (п. 4.5) явно используется асимптотическое поведение волновой функции на бесконечных расстояниях. Вместе с тем при выводе тех же уравнений из динамического уравнения Гайзенберга (п/п. 5.6.2) явная необходимость в этом не возникает. Объясните, почему?

## 6. МИКРОЧАСТИЦА В ПОЛЕ ЦЕНТРАЛЬНОЙ СИЛЫ

### 6.1. Момент импульса

#### 6.1.1. Центральная сила

*Центральной* называется сила, действующая вдоль прямой, соединяющей точечный источник (центр) силы и частицу — материальную точку. Если центр силы находится в начале координат, а  $\mathbf{r}(x, y, z)$  — радиус – вектор положения частицы, то  $\mathbf{F} = C\mathbf{r}$  ( $C$  — скаляр).

Проверим, что потенциальная энергия  $\Phi(x, y, z)$  частицы, находящейся в поле центральной силы (или, как говорят, в центральном поле), зависит *только от расстояния* частицы до источника поля:

$$\Phi(t, x, y, z) = \Phi(t, r); \quad r \equiv |\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}. \quad (6.1.1)$$

Действительно, поскольку сила  $\mathbf{F}$  по определению равна градиенту от потенциальной энергии с обратным знаком, то, вычисляя градиент от выражения (6.1.1) с учётом правила дифференцирования сложной функции, имеем:

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{r}} = -\frac{\partial\Phi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial\mathbf{r}}.$$

Но проекция вектора градиента радиус – вектора равна

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{1}{2\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} 2x = \frac{x}{r},$$

так что

$$\frac{\partial r}{\partial\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r}.$$

Окончательно получим

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial\Phi}{\partial r} \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (6.1.2)$$

Таким образом, если потенциальная энергия частицы зависит от её положения по отношению к источнику поля в соответствии с (6.1.1), то сила (6.1.2), действующая на частицу со стороны источника поля, центральна, что и требовалось доказать.

Центральной, например, является сила тяготения (1.3.3), действующая на точечную частицу массы  $m_1$  со стороны точечного же источника гравитационного поля, обладающего массой  $m_2$  (п/п. 1.3.4):

$$F_{21} = G \frac{m_1 m_2}{r^2} \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{r}.$$

Соответствующая потенциальная энергия определяется законом всемирного тяготения (1.3.2):

$$\Phi(r) = -G \frac{m_1 m_2}{r} + E_0.$$

Ещё один пример центральной силы — сила взаимодействия точечных заряженных частиц (например, электрона и атомного ядра). В соответствии с законом Кулона (п/п. 1.3.8) потенциальная энергия одной из них в поле, создаваемом другой, равна (1.3.5)

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{q_1 q_2}{r} + \Phi_0 \text{ (CGSE)} \\ \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r} + \Phi_0 \text{ (SI)} \end{cases}, \quad (6.1.3)$$

где  $q_1$  и  $q_2$  — заряды частиц, а  $r$  — расстояние между частицами.

Центральными могут быть и силы взаимодействия между неточечными объектами — например, между двумя атомами.

Центральные силы играют важную роль в квантовой механике элементарных частиц, атомных ядер, атомов и молекул.

### 6.1.2. Момент импульса как классическая динамическая переменная микрочастицы

В классической механике *моментом импульса* (или, как иногда ещё говорят, моментом количества движения) частицы, находящейся в точке  $\mathbf{r}$  пространства и движущейся с импульсом  $\mathbf{p}$ , называется вектор

$$\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (6.1.4)$$

Проекции векторного произведения (6.1.4) выражаются через проекции векторов – сомножителей следующим образом:

$$M_x = yp_z - zp_y; \quad M_y = zp_x - xp_z; \quad M_z = xp_y - yp_x. \quad (6.1.5)$$

Фактически момент импульса — это не одна, а три динамических переменных  $M_x, M_y, M_z$  (6.1.5).

Момент импульса является важной динамической характеристикой материальной точки, движущейся относительно источника поля. Из (6.1.4) видно, что если частица движется вдоль луча, соединяющего её с источником поля, т.е. вектор  $\mathbf{p}$  параллелен (коллинеарен) вектору  $\mathbf{r}$ , то её момент импульса  $\mathbf{M}$  равен нулю. Рассматриваемый вектор отличен от нуля, только если вектор импульса  $\mathbf{p}$  (и скорости  $d\mathbf{r}/dt = \mathbf{p} / m$ ) имеет составляющую, перпендикулярную (нормальную) вектору  $\mathbf{r}$ , т.е. частица «закручивается» вокруг источника поля.



### 6.1.3. Сохранение момента импульса классической частицы в центральном поле

Докажем, что для частицы, находящейся в центральном поле, все эти три динамические переменные являются *интегралами движения*, т.е. не меняются с течением времени, так что и сам вектор момента импульса является интегралом движения. Для доказательства продифференцируем выражение (6.1.4) по времени:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{p} + \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt}. \quad (6.1.6)$$

Вспомним, что векторное произведение коллинеарных векторов равно нулю. В первом слагаемом правой части равенства (6.1.6) сомножителями векторного произведения являются скорость  $d\mathbf{r}/dt$  и импульс частицы  $\mathbf{p} = m d\mathbf{r}/dt$  — коллинеарные векторы. Сомножители второго слагаемого тоже коллинеарны, т.к. в соответствии со вторым законом Ньютона в поле центральной силы

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} = -\frac{d\Phi}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}.$$

Следовательно,

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = 0. \quad (6.1.7)$$

Таким образом, вектор момента импульса частицы в центральном поле, а значит, и все его проекции с течением времени не меняются, т.е. являются *интегралами движения*. Иными словами, постоянны как квадрат абсолютной величины (модуля) вектора момента импульса

$$\mathbf{M}^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 \quad (6.1.8)$$

или сам модуль этого вектора

$$M = |\mathbf{M}| = \sqrt{M_x^2 + M_y^2 + M_z^2},$$

так и его направление в пространстве.

Отсюда, между прочим, следует, что траектория движения частицы относительно неподвижного центра силы  $\mathbf{r}(t)$  является *плоской кривой*: она целиком лежит в плоскости, перпендикулярной постоянному вектору  $\mathbf{M}$ .

Действительно: поскольку векторы  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{p}$  — сомножители векторного произведения — перпендикулярны вектору  $\mathbf{M}$ , то в процессе движения частицы вдоль траектории вектор  $\mathbf{r}$  всё время образует с вектором  $\mathbf{M}$  прямой угол, поворачиваясь вокруг него как вокруг оси и меняя свою длину. Это, конечно, ещё не означает, что вектор  $\mathbf{r}$  движется в плоскости, перпендикулярной  $\mathbf{M}$  он мог бы смещаться вдоль  $\mathbf{M}$ , описывая винтовую поверхность. Но для

такого смещения у скорости изменения вектора  $\mathbf{r}$  должна быть составляющая, направленная вдоль  $\mathbf{M}$ . Однако поскольку скорость  $d\mathbf{r}/dt$  коллинеарна  $\mathbf{p}$ , то она не имеет составляющей, параллельной  $\mathbf{M}$ . Следовательно, вектор  $\mathbf{r}$  не смещается вдоль  $\mathbf{M}$ , а всё время остаётся в одной плоскости, перпендикулярной  $\mathbf{M}$ .

#### 6.1.4. Сохранение энергии классической частицы в центральном поле

Если потенциальная энергия частицы в центральном поле  $\Phi(r)$  не зависит от времени явно, то, наряду с тремя проекциями момента импульса (6.1.5), частица обладает ещё одним хорошо известным интегралом движения — энергией (1.2.5) (п/п. 1.2.5)

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \Phi(r). \quad (6.1.9)$$

Итак, несмотря на то, что все четыре динамические переменные (6.1.5), (6.1.9) «состоят» из координат и проекций импульса частицы, меняющихся с течением времени в соответствии с уравнениями движения классической механики, сами эти величины остаются постоянными.

## Вопросы для самопроверки

6.1.1. Почему центральность силы, действующей на материальную точку, является обязательным условием сохранения всех трёх проекций вектора момента импульса?

6.1.2. Необходимо ли условие центральности силы для сохранения энергии материальной точки?

## 6.2. Оператор момента импульса

### 6.2.1. Коммутационные соотношения между операторами проекций момента импульса

В квантовой механике проекции вектора момента импульса представляют операторы. Соответствующие выражения можно получить, используя принцип соответствия Н. Бора (п/п. 3.4.1), т.е. заменяя в соответствующих классических соотношениях (6.1.5) координаты и импульсы их операторами:

$$\hat{M}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y; \quad \hat{M}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z; \quad \hat{M}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \quad (6.2.1)$$

Операторы (6.2.1), разумеется, *самосопряжённые*. Это вытекает из *следствия 5.2.1.4 теоремы 5.2.1* (п/п. 5.2.1), поскольку выражения (6.2.1) представляют собой действительные функции

(6.1.5) самосопряжённых операторов координат и проекций импульса.

Самосопряжённость операторов (6.2.1) можно, конечно, доказать и непосредственно, используя теоремы о произведениях операторов из п. 5.1 и 5.2. Докажем, например, что самосопряжённым является оператор  $\hat{M}_z$ . Используя формулу (5.2.1) для вычисления оператора, сопряжённого произведению операторов, запишем:

$$\hat{M}_z^+ = (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)^+ = (\hat{x}\hat{p}_y)^+ - (\hat{y}\hat{p}_x)^+ = \hat{p}_y^+ \hat{x}^+ - \hat{p}_x^+ \hat{y}^+.$$

Учтём, что операторы координат и импульсов — самосопряжённые:

$$\hat{M}_z^+ = \hat{p}_y \hat{x} - \hat{p}_x \hat{y}.$$

А теперь воспользуемся тем, что операторы «разноимённых» координат и импульсов коммутируют (5.1.22). Следовательно,

$$\hat{M}_z^+ = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \hat{M}_z.$$

**Задача 6.2.1.** Покажите аналогичным образом, что операторы  $\hat{M}_x$  и  $\hat{M}_y$  — самосопряжённые.

Между тем, операторы разных проекций момента импульса *не коммутируют* друг с другом.

**Теорема 6.2.1.** Имеют место следующие коммутационные соотношения между операторами проекций момента импульса:

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = i\hbar \hat{M}_z; \quad [\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hbar \hat{M}_x; \quad [\hat{M}_z, \hat{M}_x] = i\hbar \hat{M}_y. \quad (6.2.2)$$

*Доказательство.* Выведем первое из соотношений (6.2.2). Для этого вычислим каждое из слагаемых коммутатора (5.1.15) операторов  $\hat{M}_x$  и  $\hat{M}_y$  отдельно, перемножая операторы координат и проекций импульса строго в том порядке, в котором они записаны в исходных выражениях (6.2.1):

$$\begin{aligned} \hat{M}_x \hat{M}_y &= (\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y)(\hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z) = \hat{y} \hat{p}_z \hat{z} \hat{p}_x - \hat{y} \hat{p}_z \hat{x} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y \hat{z} \hat{p}_x + \hat{z} \hat{p}_y \hat{x} \hat{p}_z; \\ \hat{M}_y \hat{M}_x &= (\hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z)(\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y) = \hat{z} \hat{p}_x \hat{y} \hat{p}_z - \hat{x} \hat{p}_z \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_x \hat{z} \hat{p}_y + \hat{x} \hat{p}_z \hat{z} \hat{p}_y. \end{aligned}$$

Теперь вычтем почленно полученные выражения друг из друга и учтём коммутационные соотношения между операторами координат и проекций импульса. Заметим, что во втором и третьем слагаемых обоих выражений все операторы – сомножители коммутируют между собой, т.е. эти произведения операторов не зависят от порядка сомножителей. Но рассматриваемые слагаемые в первом и втором выражении отличаются только порядком

сомножителей. Поэтому при вычитании второго выражения из первого эти слагаемые взаимно уничтожатся, и мы получим:

$$\hat{M}_x \hat{M}_y - \hat{M}_y \hat{M}_x = \hat{y} \hat{p}_z \hat{z} \hat{p}_x + \hat{z} \hat{p}_y \hat{x} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_x \hat{y} \hat{p}_z - \hat{x} \hat{p}_z \hat{z} \hat{p}_y$$

Поскольку в последнем соотношении операторы  $\hat{z}$  и  $\hat{p}_z$  не коммутируют, а остальные операторы коммутируют и с ними, и между собой, то это соотношение можно переписать в следующем виде:

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = \hat{p}_z \hat{z} (\hat{y} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_y) + \hat{z} \hat{p}_z (\hat{p}_y \hat{x} - \hat{p}_x \hat{y}) = (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) (\hat{z} \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{z}).$$

Но первый из сомножителей в правой части полученного выражения есть  $\hat{M}_z$  (6.2.1), а второй представляет собой коммутатор, равный  $i\hbar \hat{1}$  (5.1.24). Таким образом, с учётом определения единичного оператора (5.1.2) правая часть этого выражения равна  $i\hbar \hat{M}_z$ , что и требовалось показать.

Остальные коммутационные соотношения выводятся аналогично.

**Задача 6.2.2.** Выведите аналогичным образом два другие коммутационные соотношения (6.2.2).

Рассмотрим оператор квадрата момента импульса

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2. \quad (6.2.3)$$

Соответствующая ему динамическая переменная (6.1.8) определяет величину квадрата модуля вектора момента импульса.

Оказывается, что оператор (6.2.3) *коммутирует* с оператором любой проекции момента импульса.

### 6.2.2. Коммутационные соотношения между операторами квадрата и проекций момента импульса

**Теорема 6.2.2.** Оператор  $\hat{M}^2$  попарно коммутирует с операторами проекций момента импульса:

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_x] = [\hat{M}^2, \hat{M}_y] = [\hat{M}^2, \hat{M}_z] = \hat{0}. \quad (6.2.4)$$

*Доказательство.* Выполним доказательство последнего из трёх коммутационных соотношений (6.2.4).

Подставляя в (6.2.4) выражение (6.2.3), запишем:

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_z] = [\hat{M}_x^2, \hat{M}_z] + [\hat{M}_y^2, \hat{M}_z] + [\hat{M}_z^2, \hat{M}_z]. \quad (6.2.5)$$

Поскольку любой оператор коммутирует сам с собой и с любой своей степенью (см. *примечание 3 к определению №7* и *определение № 8* из п/п. 5.1.1), последний из трёх коммутаторов в правой части равенства (6.2.5) есть нулевой оператор.



Первый коммутатор в правой части (6.2.5) преобразуем, используя коммутационные соотношения между операторами проекций момента импульса (6.2.2):

$$\begin{aligned}\hat{M}_x^2 \hat{M}_z &= \hat{M}_x (\hat{M}_x \hat{M}_z) = \hat{M}_x (\hat{M}_z \hat{M}_x - i\hbar \hat{M}_y) = \\ &= (\hat{M}_x \hat{M}_z) \hat{M}_x - i\hbar \hat{M}_x \hat{M}_y = (\hat{M}_z \hat{M}_x - i\hbar \hat{M}_y) \hat{M}_x - i\hbar \hat{M}_x \hat{M}_y = \\ &= \hat{M}_z \hat{M}_x^2 - i\hbar (\hat{M}_y \hat{M}_x + \hat{M}_x \hat{M}_y),\end{aligned}$$

т.е.

$$[\hat{M}_x^2, \hat{M}_z] = -i\hbar (\hat{M}_y \hat{M}_x + \hat{M}_x \hat{M}_y). \quad (6.2.6)$$

Аналогичным образом преобразуем и второй коммутатор. Получим:

$$[\hat{M}_y^2, \hat{M}_z] = i\hbar (\hat{M}_x \hat{M}_y + \hat{M}_y \hat{M}_x). \quad (6.2.7)$$

Складывая (6.2.6) и (6.2.7), получим искомое равенство.

Аналогичным образом выводятся и остальные два коммутационные соотношения (6.2.4).

**Задача 6.2.3.** Выведите аналогичным образом первое и второе коммутационные соотношения (6.2.4).

### 6.2.3. Сохранение момента импульса микрочастицы в центральном поле

Из п/п. 5.5.2 следует, что поскольку операторы проекций момента импульса не коммутируют, то они, как правило, не обладают общими собственными функциями. Следовательно, сами проекции момента импульса, вообще говоря, *не имеют одновременно определённых значений* (хотя отдельные исключения этой теоремой не запрещаются).

Тот же вывод следует из теоремы Гайзенберга (п/п. 5.5.1). С учётом полученных коммутационных соотношений (6.2.2) имеют место следующие соотношения неопределённостей (5.3.8) для проекций момента импульса:

$$\begin{aligned}\Delta M_{x\,rms} \Delta M_{y\,rms} &\geq \hbar |\overline{M_z}|; \\ \Delta M_{y\,rms} \Delta M_{z\,rms} &\geq \hbar |\overline{M_x}|; \\ \Delta M_{x\,rms} \Delta M_{z\,rms} &\geq \hbar |\overline{M_y}|.\end{aligned}\tag{6.2.8}$$

Соотношения (6.2.8) означают, что никакие две проекции момента импульса не могут одновременно иметь определённые значения, за исключением случая, когда в данном состоянии микрочастицы, находящейся в центральном поле, среднее значение третьей проекции момента импульса равно нулю.

Напротив, из коммутационных соотношений (6.2.5) и *теоремы 5.4.1* о коммутирующих самосопряжённых операторах следует, что операторы квадрата момента импульса (6.2.3) и любой, но только

какой-либо одной из его проекций обладают общей полной системой собственных функций.

Это означает, что квадрат (или абсолютная величина) вектора момента импульса и одна из его проекций (любая из трёх, т.к. осям координат можно присвоить обозначения  $x, y, z$  в произвольном порядке) всегда имеют одновременно определённые значения. Однако две другие проекции при этом, вообще говоря, не имеют определённых значений.

Например, у операторов  $\hat{M}^2$  и  $\hat{M}_z$  имеется общая система собственных функций  $\psi_{M^2, M_z}$ :

$$\hat{M}^2 \psi_{M^2, M_z} = M^2 \psi_{M^2, M_z}; \quad (6.2.9)$$

$$\hat{M}_z \psi_{M^2, M_z} = M_z \psi_{M^2, M_z}. \quad (6.2.10)$$

Следовательно, во всех состояниях микрочастицы, которые описывают волновые функции  $\psi_{M^2, M_z}$ , динамические переменные  $M^2$  и  $M_z$  имеют одновременно определённые значения.

Однако функции  $\psi_{M^2, M_z}$  не являются собственными функциями операторов  $\hat{M}_x$  и  $\hat{M}_y$ , и в рассматриваемых состояниях микрочастицы динамические переменные  $M_x$  и  $M_y$  суть случайные величины.

Рассмотренная картина сильно отличается от классической. Получается, что квантовый «вектор» момента импульса, имея

определённые длину и проекцию на любую из трёх координатных осей, не имеет определённых проекций на две другие оси координат. Это означает, что рассматриваемый вектор не может иметь определённого направления в пространстве, т.е. это направление случайно. Такое поведение момента импульса, конечно, является сугубо квантовым эффектом, необъяснимым с позиций классической физики.

### **Вопросы для самопроверки**

6.2.1. Что следует из того факта, что операторы проекций момента импульса не коммутируют друг с другом?

6.2.2. Что следует из того факта, что операторы проекций момента импульса коммутируют с оператором квадрата момента импульса?

6.2.3. Почему не остаётся справедливым классический закон сохранения импульса для микрочастицы в центральном поле?

6.2.4. Как следует корректно сформулировать закон сохранения момента импульса микрочастицы с учётом требований квантовой механики?

6.2.5. Остаётся ли справедливым с учётом требований квантовой механики закон сохранения энергии микрочастицы в центральном поле?

### 6.3. Собственные функции и собственные значения оператора момента импульса

#### 6.3.1. Операторы квадрата и проекций момента импульса в декартовых и сферических координатах

Общие собственные функции и собственные значения операторов квадрата  $\hat{M}^2$  и одной из проекций  $\hat{M}_z$  момента импульса получим, найдя нетривиальные решения уравнений (6.2.9), (6.2.10). Проще всего это сделать, используя координатное представление рассматриваемых операторов.

Подставим в формулы (6.2.1) выражения для операторов координат (3.3.1) и импульсов (3.2.39):

$$\begin{aligned}\hat{M}_x &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right); \\ \hat{M}_y &= -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right); \\ \hat{M}_z &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).\end{aligned}\tag{6.3.1}$$

Заметим теперь, что положение частицы в пространстве по отношению к точечному источнику центрального поля естественно описывать, используя не декартовы, а сферические координаты  $r(r, \vartheta, \varphi)$ . Перейдём в формулах (6.3.1) от декартовых к сферическим координатам, используя известное преобразование:

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi; \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi; \quad z = r \cos \vartheta. \quad (6.3.2)$$

После весьма громоздких выкладок, которые здесь нет смысла воспроизводить, получим выражения для операторов проекций момента импульса в сферических координатах:

$$\begin{aligned} \hat{M}_x &= i\hbar \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg} \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right); \\ \hat{M}_y &= i\hbar \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \operatorname{ctg} \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right); \end{aligned} \quad (6.3.3)$$

$$\hat{M}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (6.3.4)$$

Последнее из этих равенств легко проверить, действуя оператором (6.3.4) на любую волновую функцию микрочастицы (переменную  $t$  для экономии места опускаем):

$$\begin{aligned} \hat{M}_z \psi(x, y, z) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r \sin \vartheta \cos \varphi, r \sin \vartheta \sin \varphi, r \cos \vartheta) = \\ &= -i\hbar \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} \right) = \\ &= -i\hbar \left( -\frac{\partial \psi}{\partial x} r \sin \vartheta \sin \varphi + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \sin \vartheta \cos \varphi \right) = \\ &= -i\hbar \left( x \frac{\partial \psi}{\partial y} - y \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi. \end{aligned}$$

Сложив квадраты операторов проекций момента импульса (6.3.3), (6.3.4), получим следующее выражение для оператора квадрата момента в сферических координатах:

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \varphi}. \quad (6.3.5)$$

Здесь

$$\Delta_{\vartheta, \varphi} \equiv \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (6.3.6)$$

— угловая часть оператора Лапласа, записанного в сферических координатах:

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta, \varphi}; \quad (6.3.7)$$

$$\Delta_r \equiv \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \quad (6.3.8)$$

— радиальная часть оператора Лапласа.

### 6.3.2. Собственные значения операторов квадрата и проекции момента импульса

Из математики известно, что уравнения на собственные функции и собственные значения (6.2.9), (6.2.10) рассматриваемых операторов (6.3.4), (6.3.5)

$$-\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \varphi} \psi_{M^2, M_z}(\vartheta, \varphi) = M^2 \psi_{M^2, M_z}(\vartheta, \varphi); \quad (6.3.9)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{M^2, M_z}(\vartheta, \varphi) = M_z \psi_{M^2, M_z}(\vartheta, \varphi) \quad (6.3.10)$$

имеют нетривиальные, непрерывные, конечные и однозначные решения только для собственных значений, образующих следующий дискретный набор:

$$M^2 = \hbar^2 l(l+1); \quad l = 0, 1, 2, \dots; \quad (6.3.11)$$

$$M_z = \hbar m_l; \quad m_l = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l. \quad (6.3.12)$$

Неотрицательное целое число  $l$ , нумерующее собственные значения квадрата момента импульса, называется *азимутальным квантовым числом*. Его значения неограниченны. *Магнитное квантовое число*  $m_l$ , напротив, принимает положительные и отрицательные значения, симметричные относительно нуля и ограниченные по модулю значением азимутального квантового числа  $l$ . Это и естественно: максимальное значение проекции



вектора не может быть больше модуля вектора. Всего различных значений  $m_l$  при данном  $l$ , как видно,  $2l + 1$ .

Таким образом, квантуется (т.е. принимает дискретный набор значений) как абсолютная величина (длина) вектора момента импульса, так, при данной его длине, и величина проекции этого вектора на произвольно заданную ось — а это значит, что имеется конечное, равное  $2l + 1$ , число возможных ориентаций вектора момента импульса относительно этой оси. При этом, поскольку две другие проекции вектора остаются неопределёнными, неопределённой является и ориентация вектора в пространстве. В частности, если  $|M_z| = \hbar l$ , это вовсе не значит, что вектор  $\mathbf{M}$  параллелен оси  $z$ , т.к. при  $l > 1$  максимальное по модулю значение  $|M_z|_{\max} = \hbar l$  меньше  $|\mathbf{M}| = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ .

То обстоятельство, что возможные значения квадрата и проекции момента импульса микрочастицы (6.3.11), (6.3.12) совершенно не зависят ни от её массы, ни от силового поля, в котором частица находится, т.е. являются универсальными величинами, не может не вызывать удивления. Однако сравнение обсуждаемых теоретических выводов с данными измерений убедительно показывает, что природа устроена действительно так.

### 6.3.3. Собственные функции операторов квадрата и проекции момента импульса в сферических координатах

Общими собственными функциями операторов квадрата  $\hat{M}^2$  и проекции  $\hat{M}_z$  момента импульса являются так называемые сферические (шаровые) функции:

$$\psi_{M^2, M_z}(\vartheta, \varphi) = Y_{l, m_l}(\vartheta, \varphi) = C_l^{|m_l|} P_l^{|m_l|}(\cos \vartheta) \exp(im_l \varphi), \quad (6.3.13)$$

где  $P_l^{|m_l|}(x)$  — известная в математической физике специальная функция — присоединённый полином Лежандра, а  $C_l^{|m_l|}$  — нормировочная постоянная, которая может быть подсчитана из условия нормировки собственной функции:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi |Y_{l, m}(\vartheta, \varphi)|^2 \sin \vartheta d\vartheta = 1. \quad (6.3.14)$$

В том, что зависимость рассматриваемой функции от угла  $\varphi$  действительно имеет указанный вид, убедиться несложно. Попутно получим и записанную выше формулу для подсчёта собственных значений оператора  $\hat{M}_z$ . В самом деле: будем искать совместное решение уравнений на собственные функции и собственные значения операторов  $\hat{M}^2$  и  $\hat{M}_z$  в виде

$$\psi_{M^2, M_z}(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi).$$

Тогда из уравнения на собственные функции и собственные значения оператора проекции момента импульса (6.3.10) следует, что

$$-i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = M_z \Phi.$$

Решение этого уравнения:

$$\Phi(\varphi) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} M_z \varphi\right).$$

Из условия однозначности волновой функции очевидно, что полученное решение должно удовлетворять условию  $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$ . Отсюда следует, что

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} M_z 2\pi\right) = 1,$$

а значит,

$$M_z = \hbar m_l,$$

где  $m_l$  — целое число (положительное, отрицательное или нуль). Именно эти соотношения для  $\Phi(\varphi)$  (6.3.13) и  $M_z$  (6.3.12) были выписаны выше.

Более сложные выкладки привели бы нас и к выводу приведенных выше выражений для функции  $\Theta(\vartheta)$  (6.3.13) и подсчёта собственных значений оператора  $\hat{M}^2$  (6.3.11).

Легко получить вид функции (6.3.13) для случая  $l=0$ ,  $m_l=0$ . С учётом условия нормировки (6.3.14)

$$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}. \quad (6.3.15)$$

В состоянии, описываемом волновой функцией (6.3.15), как ясно из (6.3.11), (6.3.12),  $M^2=0$  и  $M_z=0$ .

Нетрудно проверить, что волновая функция (6.3.15), будучи общей собственной функцией операторов  $\hat{M}^2$  и  $\hat{M}_z$  и принадлежа их собственным значениям  $M^2=0$  и  $M_z=0$ , является вместе с тем собственной функцией операторов и двух других проекций момента импульса  $\hat{M}_x$  и  $\hat{M}_y$ , принадлежа также нулевым собственным значениям этих операторов  $M_x=M_y=0$ . С физической точки зрения это вполне понятно: если в рассматриваемом состоянии абсолютная величина момента импульса имеет определённое значение, равное нулю, то и все три его проекции также должны иметь определённые значения, равные

нулю. С другой же стороны, рассматриваемая ситуация является примером, когда три *некоммутирующих* оператора (6.2.2) имеют *общую собственную функцию*, а представляемые ими динамические переменные в состоянии, описываемом этой волновой функцией, имеют *одновременно определённые значения*.

Нетрудно убедиться, что здесь нет никакого противоречия ни с теоремой о собственных функциях коммутирующих операторов (п/п. 5.4.1), ни с соотношением неопределённостей Гайзенберга (5.3.8) (п/п. 5.3.2) и вытекающими отсюда соотношениями (6.2.8) — см. обсуждение в п. 5.5.

### **Вопросы для самопроверки**

6.3.1. Как получены выражения для операторов квадрата момента импульса и его проекций в сферических координатах? Какой из операторов проекций момента импульса коммутирует с оператором квадрата момента? Почему именно этот?

6.3.2. Каковы собственные значения оператора квадрата момента импульса и его проекции на полярную ось? Что такое азимутальное и магнитное квантовые числа? Что можно сказать о направлении вектора момента импульса при данной его абсолютной величине?

6.3.3. Через какие известные специальные функции выражаются общие собственные функции операторов квадрата и проекции момента импульса?

## 6.4. Стационарные состояния микрочастицы в поле центральной силы

### 6.4.1. Интегралы движения

Если потенциальная энергия частицы, находящейся в поле центральной силы, не зависит явно от времени, то частица находится в стационарном состоянии с определённой энергией  $E$  (см. п/п. 2.3.2). Пространственная зависимость волновой функции, описывающей это состояние, описывается функцией  $u(x, y, z)$ , которая является решением стационарного уравнения Шрёдингера. Это уравнение можно записать в виде уравнения на собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона микрочастицы (п/п. 3.4.4) в центральном поле:

$$\hat{H}u = Eu; \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \Phi(r)\hat{1}, \quad (6.4.1)$$

где

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

— оператор Лапласа.

Поскольку потенциальная энергия зависит не от трёх декартовых координат, а от «радиальной» переменной  $r$ , для вычисления волновой функции удобно перейти от декартовой к сферической системе координат  $r, \vartheta, \varphi$ :

$$u(x, y, z) = u(r, \vartheta, \varphi). \quad (6.4.2)$$

При этом оператор Лапласа распадётся на радиальную и угловую части (6.3.7), (6.3.8), а оператор Гамильтона (6.4.1) приобретёт вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta, \varphi} \right) + \Phi(r). \quad (6.4.3)$$

Нетрудно убедиться, что оператор Гамильтона микрочастицы в центральном поле коммутирует с операторами квадрата и проекции момента импульса:

$$[\hat{H}, \hat{M}^2] = \hat{0}; \quad [\hat{H}, \hat{M}_z] = \hat{0}. \quad (6.4.4)$$

Это означает (п/п. 5.4.1), что в стационарных состояниях микрочастицы, находящейся в центральном поле, *одновременно* с энергией  $E$  имеют *определённые значения* квадрат (или абсолютная величина)  $M^2$  и проекция на ось  $z$   $M_z$  (направление которой, разумеется, может быть выбрано произвольно) момента импульса частицы.

Естественно, перечисленные величины не зависят от времени, т.е. *сохраняются*. По аналогии с классической механикой можно сказать, что три указанные физические величины являются *интегралами движения*.

Напомним, однако, что в классической механике интегралами движения являются все три проекции вектора момента импульса — и, как следствие, его квадрат или модуль. Как видим, в действительности (т.е. в соответствии с квантовой механикой) у микрочастицы на один интеграл движения меньше.

#### **6.4.2. Решение стационарного уравнения Шрёдингера методом разделения переменных**

Для вычисления стационарной волновой функции микрочастицы в центральном поле используем (точнее, попробуем использовать!) метод разделения переменных, разделив в уравнении (6.4.1) – (6.4.3) радиальную и угловые переменные:

$$u(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi). \quad (6.4.5)$$

Подставив это произведение в уравнение Шрёдингера, записав в нём оператор Лапласа как сумму радиальной и угловой частей (6.3.7)

$$\Delta \equiv \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta, \varphi},$$



а затем разделив полученное соотношение почленно на  $RY$ , получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta_r R}{R} - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\Delta_{\vartheta, \varphi} Y}{Y} = E - \Phi(r)$$

или

$$-2mr^2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta_r R}{R} + \Phi(r) - E \right) = -\hbar^2 \frac{\Delta_{\vartheta, \varphi} Y}{Y}. \quad (6.4.6)$$

Левая часть равенства (6.4.6) зависит только от радиальной переменной  $r$ , а правая — только от угловых переменных  $\vartheta, \varphi$ . Поскольку эти переменные независимы, то равенство может выполняться, только если каждое из этих выражений равно одной и той же константе:

$$-2mr^2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta_r R}{R} + \Phi(r) - E \right) = -\hbar^2 \frac{\Delta_{\vartheta, \varphi} Y}{Y} = C. \quad (6.4.7)$$

В результате из (6.4.7) получаем два уравнения относительно неизвестных функций  $Y(\vartheta, \varphi)$  и  $R(r)$ . Первое из них, «угловое», выглядит следующим образом:

$$-\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \varphi} Y = CY. \quad (6.4.8)$$

Но оператор в левой части уравнения (6.4.8) равен  $\hat{M}^2$  (6.3.5). Следовательно, данное соотношение есть уже знакомое нам уравнение на собственные функции и собственные значения оператора момента импульса (6.2.9), (6.3.9). Собственные значения этого уравнения (6.3.11)

$$C = M^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad (6.4.9)$$

а собственные функции, принадлежащие этим собственным значениям — сферические функции (6.3.13)  $Y_{l, m_l}(\vartheta, \varphi)$ .

Второе уравнение (6.4.7), «радиальное», является обыкновенным дифференциальным уравнением относительно радиального сомножителя  $R(r)$  волновой функции частицы (6.4.5) и имеет следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta_r R}{R} + \Phi(r) - E = -\frac{C}{2mr^2},$$

или

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta_r R}{R} + \left( \Phi(r) + \frac{C}{2mr^2} \right) = E, \quad (6.4.10)$$

причём  $C = M^2$  (6.4.9).

В левой части уравнения (6.4.10) (в скобках) записано выражение, которое представляет собой сумму потенциальной энергии частицы и *центробежной энергии*. В классической механике последняя есть просто вклад в кинетическую энергию частицы от вращения (закручивания) относительно центра поля. Назовём рассматриваемую сумму *эффективной потенциальной энергией* частицы в центральном поле:

$$\Phi_{eff}(r, M^2) \equiv \Phi(r) + \frac{M^2}{2mr^2}. \quad (6.4.11)$$

С учётом данного обозначения «радиальное» уравнение (6.4.10) примет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r R + \Phi_{eff}(r, M^2) R = ER, \quad (6.4.12)$$

где в соответствии с (6.3.8)

$$\Delta_r \equiv \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr}. \quad (6.4.13)$$

Таким образом, применив метод разделения переменных, мы получили из исходного уравнения с частными производными два дифференциальных уравнения: одно, «угловое», решение которого

уже известно, и другое, «радиальное» (6.4.12) — обыкновенное дифференциальное уравнение.

### 6.4.3. Радиальное уравнение

Преобразуем уравнение (6.4.12) относительно радиальной функции  $R(r)$  к более удобному виду. Для этого заменим функцию  $R(r)$  другой функцией  $\chi(r) \equiv r R(r)$ , так что

$$R(r) \equiv \frac{\chi(r)}{r}. \quad (6.4.14)$$

Заметим, что с учётом (6.4.13)

$$\Delta_r R \equiv \Delta_r \frac{\chi}{r} = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \frac{\chi}{r} = \frac{1}{r} \frac{d^2 \chi}{dr^2}.$$

После рассмотренной замены дифференциальное уравнение (6.4.12) приобретёт следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + \Phi_{eff}(r, \mathbf{M}^2) \chi = E \chi, \quad (6.4.15)$$

где в соответствии с (6.4.9), (6.4.11)

$$\Phi_{eff}(r, \mathbf{M}^2) \equiv \Phi(r) + \frac{\mathbf{M}^2}{2mr^2} = \Phi(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}. \quad (6.4.16)$$

Соотношение (6.4.15), которое мы будем называть *радиальным уравнением*, имеет вид обычного одномерного стационарного уравнения Шрёдингера (2.3.27). Однако эти уравнения не идентичны. Первое отличие состоит в том, что в уравнении Шрёдингера фигурирует «настоящая» потенциальная энергия частицы  $\Phi(x)$ , а в радиальном уравнении — эффективная  $\Phi_{eff}(r, \mathbf{M}^2)$  (6.4.11). Второе отличие вызвано тем, что  $r$  — не «настоящая», т.е. декартова, а *обобщённая* координата. В частности, если декартова координата  $x$  изменяется в пределах  $-\infty < x < \infty$ , то область изменения радиальной координаты  $0 \leq r < \infty$ .

Поскольку при  $r = 0$  радиальная функция  $R(0)$  (6.4.14) должна быть конечной, чтобы конечной при этом осталась и волновая функция частицы  $u(x, y, z)$  (6.4.5), функция  $\chi(r)$  должна быстро стремиться к нулю при  $r \rightarrow 0$ :

$$\chi(0) = 0; \quad \lim_{r \rightarrow 0} \left| \frac{\chi(r)}{r} \right| < \infty. \quad (6.4.17)$$

Соотношение (6.4.17) является обязательным граничным условием для решений дифференциального уравнения (6.4.15) относительно  $\chi(r)$ .

В самом деле: рассматривая уравнение (6.4.15) *формально* как обычное одномерное уравнение Шрёдингера, следовало бы обеспечить невозможность проникновения микрочастицы в область  $r < 0$ . Это означает, что решение такого уравнения должно удовлетворять условию  $\chi(r < 0) \equiv 0$ . Но тогда из условия непрерывности волновой функции при  $r = 0$  получим граничное условие  $\chi(0) = 0$ .

#### 6.4.4. Характер решений радиального уравнения Шрёдингера

Если эффективный потенциал  $\Phi(r)$  описывает *притяжение* между частицей и источником поля, возможно образование *связанных состояний*. Разумеется, для этого притягивательным должен быть прежде всего сам «истинный» потенциал взаимодействия  $\Phi(r)$ , поскольку центробежная энергия в эффективном потенциале  $\Phi_{eff}(r, M^2)$  (6.4.16), где  $M^2 = \hbar^2 l(l+1)$ , лишь ослабляет связь и, в принципе, при достаточно больших азимутальных (вращательных) квантовых числах  $l$  может её разорвать.

При этом нетривиальные решения радиального уравнения (6.4.15) имеют место только при отдельных значениях (уровнях) энергии  $E_{l,\nu}$ , которые можно перенумеровать целым числом  $\nu = 0, 1, 2, \dots$ . Оно называется колебательным (vibration) или радиальным квантовым числом. Поскольку квантовое число  $l$  входит в

уравнение (6.4.15) в качестве параметра, то от него зависят и значения уровней энергии. Теми же числами нумеруются и волновые функции  $\chi_{l,v}(r)$ , «принадлежащие» этим уровням энергии. Таким образом, в случае связанных состояний имеет место эффект «квантования» энергии (и набора состояний) системы частиц.

Как всегда в подобных случаях, условие конечности решений рассматриваемого уравнения приводит к тому, что

$$\chi_{l,v}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0. \quad (6.4.18)$$

Данное условие показывает, что вероятность обнаружить частицу на большом расстоянии от центра силы быстро уменьшается по мере увеличения расстояния. Это в грубых чертах соответствует «финитному» характеру относительного движения частиц в классической механике.

Следует отметить, что решение линейного однородного дифференциального уравнения второго порядка (6.4.15) при «нулевых» граничных условиях (6.4.17) и (6.4.18) представляет собой задачу Штурма – Лиувилля (см. п/п. 2.3.7) с дискретным спектром собственных значений параметра  $E$ . Формально это и является причиной квантования энергии.

В рассматриваемом случае вид волновой функции (6.4.5) (т.е. характер зависимости её от переменных), описывающей состояние относительного колебательно – вращательного «движения» двух

частиц, находящихся в связанном состоянии, зависит от трёх квантовых чисел:

$$u_{l,m_l,v}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{\chi_{l,v}(r)}{r} Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi). \quad (6.4.19)$$

Волновая функция, описывающая любое связанное состояние микрочастицы, вследствие упомянутого выше поведения «на бесконечности» имеет конечную норму. Поэтому всегда можно подобрать нормировочный множитель так, чтобы

$$\begin{aligned} \iiint |u_{l,m_l,v}(x, y, z)|^2 dx dy dz = \\ = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin(\vartheta) d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi |u_{l,m_l,v}(r, \vartheta, \varphi)|^2 = 1. \end{aligned} \quad (6.4.20)$$

Поскольку вследствие условия нормировки сферической функции — углового сомножителя волновой функции (6.3.14) — интеграл от неё по угловым переменным равен единице, из (6.4.20) следует условие нормировки для функции  $\chi_{l,v}(r)$ :

$$\int_0^\infty |\chi_{l,v}(r)|^2 dr = 1. \quad (6.4.21)$$

Указанное выше предельное поведение подынтегральной функции (6.4.18) в этом выражении является необходимым, хотя и



недостаточным, условием сходимости данного несобственного интеграла на верхнем пределе.

В тех случаях, когда при данной энергии относительного «движения» частиц  $E$  эффективная потенциальная энергия  $\Phi(r)$  не приводит к образованию связанного состояния, имеют место *состояния рассеяния* частиц. При этом условие сходимости нормировочного интеграла от волновой функции (6.4.21) не выполняется, т.к. конфигурации, соответствующие большим расстояниям между частицами, обладают подавляюще большой вероятностью. Это соответствует инфинитному характеру относительного движения частиц в классической механике.

Поскольку в данном случае уровни энергии расположены непрерывно и их невозможно перенумеровать, вместо колебательного квантового числа  $\nu$  для классификации состояний системы (6.4.19) используют сами значения энергии:

$$u_{l,m_l,E}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{\chi_{l,E}(r)}{r} Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi). \quad (6.4.22)$$

#### 6.4.5. Вырождение энергетических уровней

Мы видели, что значение уровня энергии  $E_{l,\nu}$  связанного состояния микрочастицы определяется двумя квантовыми числами — колебательным (радиальным)  $\nu$  и азимутальным  $l$ , а вид волновой функции определяется, сверх того, ещё и магнитным квантовым числом  $m_l$ . Следовательно, одному и тому же

энергетическому уровню  $E_{l,v}$  «принадлежат», вообще говоря, несколько — а именно,

$$g_{l,v} = 2l + 1 \quad (6.4.23)$$

различных волновых функций  $u_{l,m_l,v}(r, \vartheta, \varphi)$ , отличающихся значением магнитного квантового числа  $m_l$ .

Целое число  $g_{l,v}$  называется *степенью (кратностью) вырождения* или *статистическим весом* энергетического уровня.

По той же причине вырожденными являются и значения энергии  $E$  микрочастицы, находящейся в состоянии рассеяния, поскольку каждому такому значению энергии отвечает

$$g_{l,E} = 2l + 1 \quad (6.4.24)$$

различных волновых функций  $u_{l,m_l,E}(r, \vartheta, \varphi)$  (6.4.22).

Явление вырождения энергетических уровней частицы, находящейся в связанном состоянии с источником поля центральной силы (или двух частиц, взаимодействующих центральной силой), объясняется следующей причиной. Энергия частицы, находящейся в изотропном пространстве (когда все пространственные направления физически равноценны — а именно это и имеет место в центральном поле), не может зависеть от значения магнитного квантового числа, которое определяет величину проекции  $M_z$  вектора момента импульса на

координатную ось  $z$ . В самом деле: ведь направление этой оси, как и любой оси координат, можно выбрать совершенно произвольно. Ясно, что от этого выбора будет зависеть величина  $M_z$ . Однако такой выбор не должен влиять на значение энергии.

Вместе с тем состояния частицы, отвечающие разным значениям  $M_z$  при заданной абсолютной величине момента импульса  $|\mathbf{M}| = \sqrt{\mathbf{M}^2}$ , разумеется, различны, и эти различия чётко фиксируются экспериментом. Число таких состояний и есть кратность вырождения или статистический вес энергетического уровня.

Невырожденными являются только уровни энергии с нулевым моментом импульса  $\mathbf{M}^2 = 0$ ,  $l = 0$ : при этом, как видно из (6.4.23), (6.4.24)  $g_{0,v} = g_{0,E} = 1$ .

### Вопросы для самопроверки

6.4.1. Какие динамические переменные одновременно имеют определённые значения. т.е. являются интегралами движения, в задаче о состояниях микрочастицы в поле центральной силы?

6.4.2. Какие переменные разделяются при решении задачи о состояниях микрочастицы в поле центральной силы? Почему их удаётся разделить?

6.4.3. Какие функции являются решением углового уравнения?

6.4.4. Что представляет собой эффективная потенциальная энергия микрочастицы, фигурирующая в радиальном уравнении?

6.4.5. Буквально ли совпадает радиальное уравнение с уравнением Шрёдингера для микрочастицы с одной степенью свободы?

6.4.5. Что является причиной вырождения энергетических уровней микрочастицы в поле центральной силы? Есть ли среди них невырожденные уровни?

## **7. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ ДВУХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ МИКРОЧАСТИЦ**

### ***7.1. Переносное и относительное движение двух частиц***

#### **7.1.1. Система многих микрочастиц**

В предыдущих главах данного пособия мы рассматривали приложения квантовой теории в основном на примерах микросистем, состоящих из одной микрочастицы, находящейся в поле той или иной силы. В настоящей главе мы изучим некоторые микросистемы, состоящие из двух микрочастиц. Однако вначале полезно проанализировать основные особенности задач о микросистемах, состоящих из любого числа  $N > 1$  микрочастиц.

Волновая функция системы многих частиц обсуждалась в п/п. 2.2.2, а уравнение Шрёдингера (2.2.6), решением которого является эта функция, было записано в п/п. 2.2.3. Примем, что потенциальная энергия рассматриваемой системы частиц не зависит от времени. Тогда эта система находится в стационарном состоянии с определённой энергией  $E$ , и её волновая функция подсчитывается по формуле

$$\psi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (7.1.1)$$

Пространственный множитель волновой функции (7.1.1) определяется стационарным уравнением Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \Delta_i u + \Phi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) u = Eu, \quad (7.1.2)$$

где (2.2.7)

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}.$$

В общем случае потенциальная энергия в (7.1.2) складывается из потенциальной энергии отдельных частиц в поле *внешних сил*, которая зависит от их положений в пространстве по отношению к источнику поля (2.2.8),

$$\Phi^{(e)}(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N \Phi_i^{(e)}(t, \mathbf{r}_i) \quad (7.1.3)$$

и потенциальной энергии *сил взаимодействия частиц* друг с другом  $\Phi^{(i)}$ , которая определяется их взаимным расположением (2.2.9).

Рассмотрим случай, когда *взаимодействие отсутствует*, и

$$\Phi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \Phi^{(e)}.$$

Уравнение (7.1.2) с учётом (7.1.2), (7.1.3) без труда решается методом разделения переменных:

$$u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N u^{(i)}(\mathbf{r}_i). \quad (7.1.4)$$

Каждый из сомножителей в правой части произведения (7.1.4) — это волновая функция одной из частиц, находящейся в поле действующей на неё внешней силы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta u^{(i)} + \Phi_i^{(e)}(t, \mathbf{r}) u^{(i)}(\mathbf{r}) = E^{(i)} u^{(i)}(\mathbf{r}), \quad 1 \leq i \leq N. \quad (7.1.5)$$

[Индекс при переменной, от которой зависит одночастичная волновая функция  $u^{(i)}(\mathbf{r})$ , в уравнении (7.1.5) опущен: этот индекс нужен только в записи многочастичной волновой функции (7.1.4), чтобы отличать разные, но однотипные переменные, от которых она зависит]. При этом энергия микросистемы складывается из энергий отдельных микрочастиц:

$$E = \sum_{i=1}^N E^{(i)}. \quad (7.1.6)$$

Соотношение (7.1.4) имеет вполне очевидный вероятностный смысл. Квадрат модуля волновой функции (7.1.4) равен плотности вероятности

$$P(r_1, r_2, \dots, r_N) = |u(r_1, r_2, \dots, r_N)|^2 \quad (7.1.7)$$

случайного события, состоящего в том, что частица 1 находится в точке  $r_1$ , частица 2 — в точке  $r_2, \dots$ , частица  $N$  — в точке  $r_N$ . Но поскольку частицы не взаимодействуют, то их динамические состояния взаимно *независимы*. Поэтому рассматриваемое «сложное» случайное событие «состоит» из  $N$  *независимых элементарных случайных событий*, и по известному закону теории вероятности вероятность (плотность вероятности) такого сложного события равна *произведению вероятностей* (плотностей вероятностей) составляющих элементарных событий. Но именно это и следует из соотношений (7.1.4), (7.1.7):

$$P(r_1, r_2, \dots, r_N) = \prod_{i=1}^N P^{(i)}(r_i), \quad (7.1.8)$$

где

$$P^{(i)}(r) = |u^{(i)}(r)|^2. \quad (7.1.9)$$



Можно заметить, что если частицы, входящие в состав микросистемы, одинаковы (точнее, *тождественны*), то выражение (7.1.4) оказывается неоднозначным. В самом деле: произведение в правой части (7.1.4) будет зависеть от того, как пронумерованы частицы. Но если частицы неразличимы, то их нельзя и «снабдить» номерами. Это противоречие снимается в квантовой теории систем тождественных частиц.

При наличии взаимодействия между частицами (2.2.9), потенциальная энергия которого  $\Phi^{(i)}(r_{12}, r_{13}, \dots, r_{N-1, N})$  зависит не от положений, а от взаимного расположения частиц (2.2.10)

$$r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| \equiv |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|, \quad (7.1.10)$$

динамические состояния частиц оказываются взаимосвязанными, а их положения в пространстве (и другие динамические характеристики) — взаимозависимыми. Поэтому соотношение (7.1.9) уже не имеет места, а энергия системы (7.1.6) не складывается из энергий отдельных частиц. Разумеется, в этом общем случае уравнение Шрёдингера (7.1.2) уже не удастся решить методом разделения переменных (7.1.4). Поэтому мы оказываемся перед необходимостью решать «в лоб» уравнение с частными производными второго порядка, содержащего  $3N$  независимых переменных.

Даже численное решение такого уравнения с применением суперкомпьютеров является непреодолимой проблемой, не говоря уже о возможностях его аналитического решения.

Не следует, однако, думать, что многочастичные задачи в квантовой механике не решаются. Существует целая область квантовой механики, в которой проводятся расчёты волновых функций и энергетических уровней многоэлектронных атомов, простых и даже сложных молекул, сил межмолекулярного взаимодействия — квантовая химия. Однако многочастичные уравнения Шрёдингера решаются там не «в лоб», а в преобразованном виде с помощью особой итерационной процедуры, которая называется вариационным методом Хартри – Фока – Рутана.

### **7.1.2. Координаты центра масс и относительного расположения двух частиц**

В настоящей главе мы, наконец, получаем возможность, базируясь на развитом в предыдущих главах теоретическом аппарате, рассмотреть две реальные задачи квантовой механики, результаты решения которых могут быть непосредственно сопоставлены с экспериментальными данными. Одна из них — это задача о характере колебательно – вращательного энергетического спектра двухатомной молекулы. Вторая — о стационарных связанных состояниях электрона и атомного ядра, которые образуют атом водорода или изотопа водорода (дейтерия, трития), а

также одноэлектронные положительные ионы: однократно заряженный ион гелия, двукратно заряженный ион лития и т.д.

В обеих этих задачах участвуют *две микрочастицы*, связанные *центральной силой* взаимодействия. В задаче об атоме водорода и водородоподобных ионах это — точечные противоположно заряженные микрочастицы, которые взаимодействуют по закону Кулона. В задаче о двухатомной молекуле это — два атомных ядра, которые объединены силой химической связи.

Стационарные состояния системы двух взаимодействующих микрочастиц описываются волновыми функциями  $u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , зависящими от шести переменных — координат  $\mathbf{r}_1(x_1, y_1, z_1)$  и  $\mathbf{r}_2(x_2, y_2, z_2)$ .

Соответствующее стационарное уравнение Шрёдингера (7.1.2) ( $N=2$ ) является уравнением с частными производными второго порядка с шестью переменными:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 u - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 u + \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)u = Eu, \quad (7.1.11)$$

где

$$\Delta_i \equiv \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}; \quad i = 1, 2,$$

а потенциальная энергия  $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  зависит от положений в пространстве каждой частицы.

Решение этой задачи существенно упростится, если отсутствует внешнее силовое поле, а потенциальная энергия  $\Phi$  описывает только *взаимодействие* между частицами. В этом случае она зависит не от *положения каждой из частиц* в пространстве, а от их *взаимного расположения* (7.1.10).

Очевидно, что если внутренняя структура взаимодействующих микрочастиц не меняется с течением времени, то и потенциальная энергия взаимодействия микрочастиц явно не зависит от времени, т.е.  $\partial\Phi/\partial t = 0$ , и такая система действительно находится в стационарном состоянии.

Относительное расположение частиц определяется радиус – вектором

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad (7.1.12)$$

соединяющим их центры. Декартовы координаты этого вектора обозначим

$$x = x_2 - x_1; \quad y = y_2 - y_1; \quad z = z_2 - z_1.$$

Поэтому, как и указывалось в п/п. 7.1.1 — см. (7.1.10)

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = \Phi(\mathbf{r}) = \Phi(x, y, z). \quad (7.1.13)$$

В рассматриваемом случае в уравнении Шрёдингера удобно перейти от шести декартовых координат двух частиц к шести же

обобщённым координатам, учитывающим как взаимное расположение частиц, так и положение этой системы в пространстве как целого. Три из них мы уже ввели: это  $\mathbf{r}(x, y, z)$ . Ещё три — координаты центра масс системы  $\mathbf{R}(X, Y, Z)$ :

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}. \quad (7.1.14)$$

При этом, как следует из (7.1.12), (7.1.14), декартовы координаты частиц следующим образом выражаются через введенные выше обобщённые координаты:

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} - \frac{m_2 \mathbf{r}}{m_1 + m_2}; \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} + \frac{m_1 \mathbf{r}}{m_1 + m_2}.$$

После преобразований по замене переменных в уравнении Шрёдингера с использованием полученных формул оно примет следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta^{(cm)} u - \frac{\hbar^2}{2m_{12}} \Delta u + \Phi(\mathbf{r})u = Eu, \quad (7.1.15)$$

где

$$\Delta^{(cm)} \equiv \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}$$

и

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

— операторы Лапласа, выполняющие дифференцирование по координатам центра масс и относительного положения (взаимного расположения) частиц;

$$m_{12} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (7.1.16)$$

— *приведенная масса* частиц.

### **7.1.3. Разделение переменных в стационарном уравнении Шрёдингера**

Уравнение (7.1.15) будем решать методом разделения переменных, представив искомую волновую функцию в виде произведения двух функций, одна из которых зависит от координат центра масс (7.1.14), а другая — от координат, описывающих относительное положение частиц (7.1.12):

$$u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = u^{(cm)}(\mathbf{R})u^{(rel)}(\mathbf{r}). \quad (7.1.17)$$

Подставляя это произведение в уравнение (7.1.15), после обычных для метода разделения переменных преобразований получим следующее соотношение:

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{\Delta^{(cm)} u^{(cm)}}{u^{(cm)}} = E - \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_{12}} \frac{\Delta u^{(rel)}}{u^{(rel)}} + \Phi(\mathbf{r}) \right]. \quad (7.1.18)$$

Поскольку левая часть соотношения (7.1.18) зависит только от координат центра масс, а правая — только от координат, описывающих относительное положение частиц, то обе они порознь равны одной и той же константе, не зависящей ни от тех, ни от других переменных. Обозначим эту константу  $E^{(cm)}$ .

Одно из двух полученных в результате уравнений,

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta^{(cm)} u^{(cm)} = E^{(cm)} u^{(cm)}, \quad (7.1.19)$$

описывает состояния *свободной* «частицы» с массой  $m_1 + m_2$ , равной суммарной массе системы. Решением этого уравнения, имеющим физический смысл, является собственная функция оператора импульса (3.2.33)

$$u^{(cm)}(\mathbf{R}) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot \mathbf{R}\right). \quad (7.1.20)$$

Волновая функция (7.1.20) описывает «равномерное прямолинейное движение» центра масс системы, в котором как бы сосредоточена вся её масса  $m_1 + m_2$ , с постоянным (по величине и направлению) импульсом  $\mathbf{P}$  и кинетической энергией

$$E^{(cm)} = \frac{\mathbf{P}^2}{2(m_1 + m_2)}. \quad (7.1.21)$$

Второе уравнение описывает состояния относительного «движения» двух взаимодействующих частиц в инерциальной системе координат центра масс, начало которой движется с постоянной скоростью  $d\mathbf{R}/dt = \mathbf{P}/(m_1 + m_2)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{12}}\Delta u^{(rel)} + \Phi(\mathbf{r})u^{(rel)} = (E - E^{(cm)})u^{(rel)}. \quad (7.1.22)$$

Энергия относительного «движения» частиц равна разности «полной» энергии системы и кинетической энергии её центра масс:

$$E^{(rel)} = E - E^{(cm)}. \quad (7.1.23)$$

Уравнение (7.1.22) формально в точности совпадает с уравнением Шрёдингера для частицы массы  $m$ , находящейся в поле силы с потенциалом  $\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(x, y, z)$ .

Следует, разумеется, иметь в виду, что как обобщённые координаты  $\mathbf{R}$  и  $\mathbf{r}$  не соответствуют положениям в трёхмерном



пространстве никаких реальных объектов, так и массы  $(m_1 + m_2)$  и  $m$  принадлежат «фиктивным» частицам, «сконструированным» нами из реальных частиц в процессе математического решения рассматриваемой задачи.

Заметим, что представление движения механической системы как «суммы» равномерного «переносного» движения её центра масс и относительного движения частей системы в неподвижной системе координат центра масс, разумеется, следует из уравнений движения классической механики и широко используется во всевозможных приложениях.

Понятно, что наибольший интерес представляет решение «нетривиальной» части рассматриваемой задачи о состояниях двух взаимодействующих частиц — а именно об их относительном «движении» под влиянием сил взаимодействия. Поскольку именно этим мы и будем в дальнейшем заниматься, для упрощения обозначений избавимся в используемых соотношениях от индексов, указывающих на относительный характер вычисляемых волновых функций и энергетических уровней. Таким образом, будем использовать обозначения

$$u(\mathbf{r}) \equiv u^{(rel)}(\mathbf{r}); \quad E \equiv E^{(rel)} \quad (7.1.24)$$

и записывать уравнение Шрёдингера, описывающее состояния относительного «движения» частиц, в виде «обычного» соотношения

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{12}}\Delta u + \Phi(\mathbf{r})u = Eu. \quad (7.1.25)$$

Дальнейшие упрощения задачи последуют, если сила взаимодействия частиц является *центральной*.

#### 7.1.4. Центральная сила взаимодействия микрочастиц

Фактически, как уже указывалось в п/п. 7.1.1, взаимное расположение двух материальных точек, от которого зависит потенциальная энергия их взаимодействия, определяется не вектором  $\mathbf{r}$  (7.1.12) с проекциями

$$x = x_2 - x_1; \quad y = y_2 - y_1; \quad z = z_2 - z_1. \quad (7.1.26)$$

а его модулем, т.е. *расстоянием*  $r$  между частицами

$$r = |\mathbf{r}| = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2} = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

Поскольку потенциальная энергия взаимодействия двух частиц  $\Phi(r)$  зависит только от расстояния  $r$  между ними, то сила взаимодействия  $\mathbf{F}$  является *центральной*, т.е. направленной вдоль вектора  $\mathbf{r}$ , соединяющего центры частиц (ср. с материалом, изложенным в п/п. 6.1.1). Сила, действующая на вторую частицу со стороны первой,

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{21} = -\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}_2} = -\frac{d\Phi}{dr} \frac{\partial r}{\partial \mathbf{r}_2} = -\frac{d\Phi}{dr} \frac{\partial r}{\partial r} = -\frac{d\Phi}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad (7.1.27)$$

действительно коллинеарна вектору  $\mathbf{r}$  [ср. с (6.1.2)] и, согласно третьему закону Ньютона, противоположна силе, действующей на первую частицу со стороны второй

$$\mathbf{F}_{12} = -\mathbf{F}_{21} = -\mathbf{F}.$$

Примером центральной силы является кулоновская сила взаимодействия двух точечных электрически заряженных частиц (6.1.3). Одним из простейших примеров системы двух микрочастиц, которые взаимодействуют по закону Кулона, служит *атом водорода*, состоящий из отрицательно заряженного электрона и положительно заряженного ядра — протона.

Системами двух частиц, взаимодействующих центральной силой, являются *двухатомные молекулы* — молекула водорода  $\text{H}_2$ , гидроксила  $\text{OH}$  и т.п. Практически невесомое электронное «облако», окружающее ядра двух атомов  $A$  и  $B$ , из которых состоит двухатомная молекула, обеспечивает *химическую связь* между атомами. Сила химической связи, «стягивающая» атомы, действует по прямой линии, соединяющей ядра атомов.

Если сила взаимодействия частиц *центрально*, то уравнение Шрёдингера (7.1.25), описывающее стационарные состояния относительного «движения» двух частиц, примет в точности такой

же вид, как в уже рассмотренной ранее задаче о состояниях одной частицы в центральном поле (6.4.1) – (6.4.3):

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{12}}\Delta u + \Phi(r)u = Eu. \quad (7.1.28)$$

Поэтому все результаты решения данной задачи (п. 6.4) без каких-либо изменений переносятся на рассматриваемый случай двух частиц.

### **Вопросы для самопроверки**

7.1.1. Почему только для замкнутой (изолированной) микросистемы при решении уравнения Шрёдингера удаётся разделить координаты центра масс и относительного расположения частиц?

7.1.2. Какое состояние замкнутой системы описывает волновая функция подсистемы координат центра масс? Почему решение уравнения Шрёдингера для этой подсистемы имеет вид волновой функции свободной частицы? Какова масса этой «частицы»?

7.1.3. Какие обобщённые координаты описывают относительное расположение двух частиц? Как выглядит уравнение Шрёдингера для соответствующей волновой функции? С уравнением Шрёдингера какой более простой системы оно формально совпадает? Что такое приведенная масса двух частиц?

7.1.4. К каким дальнейшим упрощениям решения задачи о двух частицах приводит условие, что сила взаимодействия между ними

центрально? Решение какой более простой задачи можно для этого использовать и с каким видоизменением?

## **7.2. Двухатомная молекула**

### **7.2.1. Эффективная потенциальная энергия межатомного взаимодействия в молекуле**

Рассмотрим двухатомную молекулу, которая представляет собой два атома, объединённые (т.е. удерживаемые друг возле друга) силой химической связи. Массы атомов  $m_1$  и  $m_2$  практически совпадают с массами атомных ядер, а суммарная масса электронов составляет менее 0,05% массы молекулы.

Химическая связь между атомами образуется электронами, которые, концентрируясь между ядрами, не только экранируют их кулоновское отталкивание, но и «стягивают» ядра друг с другом. Химическая связь подобна пружине, соединяющей ядра атомов. Если пружину сжимать, то придётся преодолевать силу упругости пружины. При достаточно сильном сжатии витки пружины начинают соприкасаться, и увеличение сжимающей силы уже не приводит к дальнейшему сокращению пружины. Если пружину растягивать, то упругая сила, напротив, будет сопротивляться растяжению. Однако при значительном растяжении наступит пластическая деформация, возвращающая сила начнёт ослабевать, и в конечном счёте пружина разорвётся.

Примерно такую картину отображает график зависимости силы химической связи  $\Phi(r)$  от расстояния  $r$  между ядрами [см. п/п. 2.3.4 и формулы (2.3.29)]. Он представляет собой кривую, имеющую минимум при *равновесном расстоянии* между атомами  $r = r_e$ . По мере уменьшения расстояния,  $r < r_e$ , быстро нарастает *сила отталкивания* между атомами, и при  $r \rightarrow 0$  потенциальная энергия стремится к бесконечности. Напротив, при  $r > r_e$  возникает сила притяжения, препятствующая удалению атомов друг от друга. С ростом межатомного расстояния эта сила вначале возрастает, но потом начинает ослабевать и при  $r \rightarrow \infty$  обращается в нуль, т.е. химическая связь между атомами «рвётся». Соответственно  $\Phi(r)$  при  $r > r_e$  возрастает, но при  $r \rightarrow \infty$  стремится к константе  $\Phi(\infty) = \Phi_0$ . Разность потенциальных энергий  $\Phi(\infty) - \Phi(r_e)$  равна работе, которую необходимо затратить, чтобы разорвать химическую связь. Эта величина называется *энергией диссоциации* молекулы:

$$D_e = \Phi(\infty) - \Phi(r_e) = \Phi_0 - \Phi(r_e). \quad (7.2.1)$$

Значение постоянной  $\Phi_0$  — потенциальную энергию невзаимодействующих атомов — можно выбрать произвольно, рассматривая эту величину как начало отсчёта потенциальной энергии силы химической связи.

Равновесное расстояние между атомами в двухатомных молекулах имеет порядок десятых долей нанометра ( $1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м}$ );

энергия диссоциации — нескольких электрон – вольт (1 эВ =  $1.609915 \cdot 10^{-19}$  Дж).

Вид кривой, изображающей зависимость эффективной потенциальной энергии (6.4.16)

$$\Phi_{eff}(r, M^2) \equiv \Phi(r) + \frac{M^2}{2mr^2} = \Phi(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}. \quad (7.2.2)$$

от расстояния между атомами, определяется тем, что на больших межатомных расстояниях  $|\Phi(r)|$  быстрее убывает (обычно  $\sim r^{-6}$ ), чем центробежная энергия ( $\sim r^{-2}$ ), а на малых, наоборот, быстрее возрастает. Поэтому при не очень больших значениях квадрата момента импульса минимум на эффективной потенциальной кривой смещается в сторону больших расстояний, а при ещё большем расстоянии возникает максимум:

$$\begin{aligned} r_e &\leq r_{\min}(l) < r_{\max}(l) < \infty; \\ \Phi_0 - D_e &\leq \Phi_{\min}(l) \equiv \Phi_{eff}(r_{\min}, M^2) < \Phi_0; \\ \Phi_{\max}(l) &\equiv \Phi_{eff}(r_{\max}, M^2) > \Phi_0; \\ \Phi_{\max}(l) - \Phi_{\min}(l) &\leq D_e. \end{aligned} \quad (7.2.3)$$

По мере роста  $M^2 = \hbar^2 l(l+1)$   $r_{\max}(l)$  уменьшается,  $r_{\min}(l)$  увеличивается, «глубина ямы» на эффективной потенциальной кривой  $\Phi_{\max}(l) - \Phi_{\min}(l)$  уменьшается. Эта картина соответствует

тому, что центробежная сила, возрастающая по мере увеличения момента импульса, «пытается» разорвать химическую связь, и её прочность уменьшается. Когда азимутальное (вращательное) квантовое число достигает некоторого критического значения  $l_{cr}$ , максимум и минимум «сливаются», разность  $\Phi_{\max}(l) - \Phi_{\min}(l)$  обращается в нуль, и на кривой  $\Phi_{eff}(r, M_{cr}^2)$  в точке  $r_{\max}(l_{cr}) = r_{\min}(l_{cr}) = r_{cr}$  образуется перегиб с горизонтальной касательной. Это означает, что при  $M_{cr}^2 = \hbar^2 l_{cr}(l_{cr} + 1)$  центробежная сила разрывает химическую связь, и атомы становятся свободными.

При  $l > l_{cr}$  экстремумов на эффективной потенциальной кривой уже нет, а есть лишь точка перегиба.

Интересно отметить, что система кривых  $\Phi_{eff}(r, M^2)$  выглядит так же, как изотермы  $p(v, T)$  уравнения состояния Ван дер Ваальса при докритических, критической и сверхкритических температурах.

### **7.2.2. Колебательно – вращательные энергетические уровни и радиальные волновые функции молекулы**

Рассмотрим теперь характер решений одномерного уравнения (6.4.15), (6.4.16), которое определяет радиальную часть волновой функции  $\chi_{l,v}(r)$ , описывающей стационарные состояния



относительного «движения» атомов в двухатомной молекуле (см. п/пп. 6.4.3 и 6.4.4).

Если  $l = 0$  и  $M^2 = 0$ , т.е. молекула не вращается,  $\Phi_{eff}(r, 0) = \Phi(r)$ . В этом случае связанные состояния атомов реализуются при энергиях  $\Phi_0 - D_e < E_{0,v} < \Phi_0$ ;  $0 \leq v \leq v_{\max}$ , где  $v_{\max}$  — максимальное значение колебательного квантового числа невращающейся молекулы. Волновая функция  $\chi_{0,v}(r)$  осциллирует, имеет  $v$  узлов (нулей) и быстро обращается в нуль при  $r \rightarrow 0$  и  $r \rightarrow \infty$ .

Разумеется, количество и расположение энергетических уровней  $E_{0,v}$ , а также принадлежащие им функции  $\chi_{0,v}(r)$  определяются конкретным видом потенциальной энергии силы химической связи  $\Phi(r)$ . В общем картина расположения уровней энергии  $E_{0,v}$  аналогична той, которая была получена при решении задачи 2.3.3 о гармоническом осцилляторе (см. также обсуждение в п/пп. 2.3.4, 2.3.5).

*Основной* (наинизший) энергетический уровень  $E_{0,0}$  располагается выше минимума  $\Phi(r_e) = \Phi_0 - D_e$  потенциальной кривой  $\Phi(r)$  на величину, равную энергии нулевых колебаний. Квант колебательной энергии

$$\Delta E_{0,v} = E_{0,v+1} - E_{0,v}, \quad (7.2.4)$$

в отличие от гармонического осциллятора, не постоянен, а уменьшается по мере увеличения колебательного квантового числа  $\nu$  (т.е. номера колебательного уровня) и «почти» обращается в нуль, когда  $\nu$  достигает максимального значения  $\nu_{\max}$ .

При  $0 < l < l_{cr}$  уровни энергии, соответствующие связанным состояниям атомов в молекуле, с точки зрения классической механики могли бы располагаться в «потенциальной яме»  $\Phi_{\min}(l) < E < \Phi_{\max}(l)$ .

Однако в действительности при  $\Phi_0 \leq E < \Phi_{\max}(l)$  состояния не являются связанными, поскольку вследствие *туннельного эффекта* имеется конечная вероятность перехода атомов из области межатомных расстояний внутри «ямы» в область больших межатомных расстояний за центробежным «барьером», т.е. диссоциация молекулы. Поэтому связанными являются только состояния с энергиями из интервала  $\Phi_{\min}(l) < E < \Phi_0$ .

*Предельным* с точки зрения возможности образования «стабильных» связанных состояний, которые не подвержены самопроизвольному распаду за счёт туннельного эффекта, является такое значение азимутального квантового числа  $l_{\lim}$  и, соответственно, квадрата момента импульса молекулы  $M_{\lim}^2 = \hbar^2 l_{\lim}(l_{\lim} + 1)$ , при котором эффективная потенциальная кривая лежит целиком выше диссоциационного предела энергии молекулы:  $\Phi_{\text{eff}}(r, M_{\lim}^2) \geq \Phi_0$ . При  $l \geq l_{\lim}$  «стабильно» связанные состояния невозможны.

При  $0 < l < l_{\text{lim}}$  уровни энергии, соответствующие связанным состояниям атомов в молекуле, располагаются в «потенциальной яме»  $\Phi_{\text{min}}(l) < E_{l,v} < \Phi_0$ . Поскольку, очевидно, глубина этой «ямы» меньше энергии диссоциации молекулы  $D_e$ , то и количество «колебательных» уровней энергии  $E_{l,v}$ , которые «умещаются» в «яме» при данном  $l > 0$ , меньше, чем при  $l = 0$ :

$$0 \leq v \leq v_m(l), \quad (7.2.5)$$

причём максимально возможное при данном  $l$  значение колебательного квантового числа  $v_m(l)$  находится в пределах

$$0 \leq v_m(l) \leq v_{\text{max}}; \quad v_m(0) = v_{\text{max}}; \quad v_m(l_{\text{lim}}) = 0. \quad (7.2.6)$$

Колебательное квантовое число  $v$  в пределах (7.2.6) принимает целочисленные значения  $v = 0, 1, 2, \dots$

Значения вращательного квантового числа  $l$  для *гетероядерных* двухатомных молекул (т.е. молекул, в состав которых входят атомы *разных* химических элементов или разных изотопов одного и того же химического элемента) также могут принимать все целочисленные значения  $l = 0, 1, 2, \dots$

Однако если молекула является *гомоядерной*, т.е. ядра атомов, из которых она состоит, идентичны, то имеется две различных модификации таких молекул. У одной из них вращательное квантовое число может принимать только чётные значения  $l = 0, 2,$

4,..., а у другой — только нечётные:  $l = 1, 3, 5, \dots$ . Например, молекулярный водород  $\text{H}_2$ , вообще говоря, представляет собой смесь *параводорода* и *ортоводорода*. У молекул параводорода вращательное квантовое число принимает только чётные, а у молекул ортоводорода — только нечётные значения.

Причина рассмотренного эффекта — чисто квантовая (т.е. необъяснимая с позиций классической физики) и связана с закономерностями поведения *систем тождественных частиц* (в данном случае — двух тождественных ядер, входящих в состав гомоядерной молекулы).

В зависимости от глубины и ширины потенциальной кривой  $\Phi(r)$ , а также от приведенной массы атомов  $m_{12}$  максимальное количество колебательных уровней у разных двухатомных молекул меняется в пределах порядка величины  $\nu_{\max} \sim 10 - 100$ , а предельное вращательное квантовое число имеет порядок  $l_{\lim} \sim 10^3 - 10^4$ .

*Статистический вес* (степень, кратность вырождения) колебательно – вращательного уровня энергии двухатомной молекулы  $E_{l,v}$  определяется общей формулой (6.4.23) (см. обсуждение в п/п. 6.4.5):

$$g_{l,v} = 2l + 1.$$

Радиальную волновую функцию  $\chi_{l,v}(r)$ , описывающую любое состояние двухатомной молекулы, можно нормировать на 1 (6.4.21).

### 7.2.3. Модель «гармонический осциллятор – жёсткий ротатор» для приближённого описания колебательно – вращательных состояний двухатомной молекулы

Явную зависимость колебательно – вращательных энергетических уровней двухатомной молекулы от колебательного и вращательного квантовых чисел можно найти в случае, когда колебания атомов относительно положения равновесия являются *малыми*, т.е. смещения атомов  $|r - r_e|$  относительно положения равновесия  $r_e$  удовлетворяют неравенству

$$|r - r_e|/r_e \ll 1. \quad (7.2.7)$$

В этих условиях потенциальную энергию силы химической связи можно разложить в ряд Тейлора относительно точки равновесия  $r_e$  и ограничиться двумя первыми членами разложения:

$$\Phi(r) \approx \Phi_0 - D_e + \frac{1}{2}k_e(r - r_e)^2 \quad (7.2.8)$$

[ср. с (2.3.29), (2.3.30) из п/п. 2.3.4]. В (7.2.8)  $k_e$  — вторая производная от потенциала по межатомному расстоянию в точке

минимума потенциала. При этом колебания атомов окажутся гармоническими, как у *гармонического осциллятора* (см. решение задачи 2.3.3). Кроме того, если колебания малы (7.2.7), то можно приближённо принять, что центробежная энергия не зависит от межатомного расстояния:

$$\frac{M^2}{2m_{12}r^2} \approx \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_{12}r_e^2} \equiv B_e l(l+1), \quad (7.2.9)$$

где

$$B_e = \hbar^2 / 2m_{12}r_e^2 \quad (7.2.10)$$

— так называемая *вращательная постоянная* молекулы. Приближение (7.2.9) соответствует тому, что вращение молекулы происходит с постоянным моментом инерции

$$I = m_{12}r_e^2,$$

т.е. она является *жёстким ротатором*.

Обозначив  $x = r - r_e$ , запишем уравнение относительно функции  $\chi_{l,v}(r)$  (6.4.15), (6.4.16) с учётом (7.2.9) и после простых преобразований приведём его к следующему виду:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m_{12}} \frac{d^2 \chi_{l,v}}{dx^2} + \left( \Phi_0 - D_e + \frac{1}{2} k_e x^2 \right) \chi_{l,v} = \\
& = [E_{l,v} - B_e l(l+1)] \chi_{l,v}.
\end{aligned} \tag{7.2.11}$$

Соотношение (7.2.11) — такое же стационарное уравнение Шрёдингера, что и в задаче о гармоническом осцилляторе. Его нетривиальные решения:

$$\chi_{l,v}(r_e + x) = u_v^{(go)}(x); \tag{7.2.12}$$

$$E_{l,v} - B_e l(l+1) = E_v^{(go)} = \Phi_0 - D_e + \omega_e \left( v + \frac{1}{2} \right), \tag{7.2.13}$$

где

$$\omega_e \equiv \hbar \omega = \hbar \sqrt{k_e / m} \tag{7.2.14}$$

— *колебательная постоянная* молекулы.

Таким образом, уровни энергии молекулы в приближении модели «гармонический осциллятор – жёсткий ротатор» зависят от колебательного  $v$  и вращательного  $l$  квантовых чисел следующим достаточно простым образом:

$$E_{l,v} = \Phi_0 - D_e + \omega_e \left( v + \frac{1}{2} \right) + B_e l(l+1). \tag{7.2.15}$$

Из (7.2.15) видно, что в рассматриваемом приближении энергия молекулы является суммой двух *независимых* вкладов: колебаний атомов друг относительно друга и вращения молекулы как целого.

Разумеется, если колебательное и вращательное движения сильно возбуждены, т.е. колебательное и вращательное квантовые числа приближаются к предельным значениям, то положенное в основу данной модели неравенство (7.2.7) перестаёт выполняться, и модель становится неадекватной.

Колебательную  $\omega_e$  и вращательную  $B_e$  постоянные двухатомной молекулы, определяющие её колебательно – вращательные энергетические уровни (7.2.15), можно измерить, исследуя спектры возбуждения или поглощения электромагнитного излучения, обусловленные переходами молекулы из одних колебательно – вращательных состояний в другие. Поскольку при изменении энергии молекулы на величину  $\Delta E$  излучается ( $\Delta E < 0$ ) или поглощается ( $\Delta E > 0$ ) порция (квант) электромагнитного поля с частотой  $\nu = |\Delta E| / 2\pi\hbar$  или длиной волны  $\lambda = 2\pi\hbar c / |\Delta E|$  ( $c$  — скорость света), то в спектроскопии принято измерять энергии молекулярных систем в обратных длинах волн:  $|\Delta E| / 2\pi\hbar c = 1 / \lambda$ . Соответствующие единицы измерения (разумеется, внесистемные) — обратные метры ( $\text{м}^{-1}$ ) или обратные сантиметры ( $\text{см}^{-1}$ ). Эти единицы переводятся в обычные единицы измерения энергии следующим образом:

$$1 \text{ см}^{-1} = 1,9864475(12) \cdot 10^{-23} \text{ Дж} = 1,23984244(37) \cdot 10^{-4} \text{ эВ}.$$



Цифры в скобках показывают неопределённость двух последних значащих цифр.

В указанных единицах значения вращательных постоянных различных двухатомных молекул колеблются в диапазоне  $B_e \sim 10^{-1} - 10 \text{ см}^{-1}$ , а интервал возможных значений колебательных постоянных  $\omega_e \sim 10^2 - 10^3 \text{ см}^{-1}$ . Это означает, что излучение (поглощение) электромагнитных волн за счёт вращательных переходов молекул происходит в сантиметровом и миллиметровом диапазоне длин волн (ультракороткие радиоволны), а за счёт колебательных переходов — в микрометровом диапазоне, что соответствует инфракрасному излучению. Заметим, что энергии диссоциации молекул, выраженные в тех же единицах, находятся в пределах  $D_e \sim 10^4 - 10^5 \text{ см}^{-1}$ , что отвечает диапазону видимого света и ближнего ультрафиолета.

### Вопросы для самопроверки

7.2.1. Как выглядит график потенциальной энергии силы химической связи между атомами в двухатомной молекуле? Покажите на нём области действия сил межатомного притяжения и отталкивания, равновесное расстояние между атомами и энергию диссоциации молекулы.

7.2.2. Как изменяется вид эффективной потенциальной энергии взаимодействия атомов в молекуле при изменении вращательного (азимутального) квантового числа? Каков её вид при достижении

вращательным квантовым числом значений, соответствующих состояниям предельной устойчивости молекулы в классическом и квантовом случаях?

7.2.3. Изобразите качественно относительное расположение колебательных уровней энергии молекулы в фиксированном вращательном состоянии и опишите характер колебательно – вращательного энергетического спектра двухатомной молекулы.

7.2.4. Изобразите качественно первые две – три радиальные волновые функции для фиксированного вращательного состояния молекулы.

7.2.5. При каком условии для описания колебательно – вращательного спектра молекулы можно воспользоваться моделью «гармонический осциллятор – жёсткий ротатор»?

7.2.6. Как по порядку величины отличаются кванты колебательной и вращательной энергии двухатомной молекулы?

### **7.3. Атом водорода и водородоподобные ионы**

#### **7.3.1. Состояния относительного «движения» электрона и ядра**

*Атом водорода* состоит из двух частиц: ядра — *протона* массой  $m_p$  и зарядом  $q_p = +e$  и электрона массой  $m_e$  и зарядом  $q_e = -e$ . Здесь

$$e = 1,60217733(49) \cdot 10^{-19} \text{ Кл} = 4,80324 \cdot 10^{-10} \text{ СГСЕ};$$

$$m_e = 9,1093897(54) \cdot 10^{-31} \text{ г}.$$

Масса электрона очень мала по сравнению с массой протона:

$$m_p/m_e = 1836,152.$$

У водорода (*протия*) имеются два *изотона*: стабильный *дейтерий*, ядро которого, помимо протона, содержит нейтрон и примерно вдвое тяжелее протона, и радиоактивный *третий*, ядро которого состоит из протона и двух нейтронов.

Ядра (nucleas) других химических элементов содержат  $Z > 1$  протонов и некоторое количество нейтронов (равное, несколько большее или меньшее  $Z$ ). Масса ядра —  $m_n$ , заряд —  $q_n = +Ze$ . У ядра водорода и его изотопов  $Z = 1$ . В состав водородоподобного иона входит ядро с  $Z > 1$  и один электрон. Наиболее лёгкими водородоподобными ионами являются однократно заряженный ион гелия  $\text{He}^+$  ( $Z = 2$ ) и двукратно заряженный ион лития  $\text{Li}^{++}$  ( $Z = 3$ ).

Взаимодействие электрона с ядром, как и любых точечных заряженных частиц, описывается законом Кулона (6.1.3). Потенциальная энергия взаимодействия обратно пропорциональна расстоянию  $r$  между электроном и ядром и пропорциональна произведению их зарядов:

$$\Phi(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r} + \Phi_0 \text{ (CGSE)} \\ -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \Phi_0 \text{ (CI)} \end{cases} \quad (7.3.1)$$

В (7.3.1)  $\Phi_0$  — произвольная постоянная, равная суммарной энергии неподвижных электрона и ядра, которые удалены друг от друга на бесконечное расстояние. В дальнейшем будем пользоваться системой единиц CGSE.

Как понятно из сказанного выше, атом водорода или водородоподобный ион представляют собой систему двух микрочастиц, взаимодействующих центральной силой и находящихся в связанном состоянии друг с другом. Задача о вычислении волновых функций (6.4.19)

$$u_{l,m_l,v}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{\chi_{l,v}(r)}{r} Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi). \quad (7.3.2)$$

описывающих стационарные состояния относительного «движения» двух рассматриваемых частиц, и соответствующих уровней энергии, решается так же, как и для любых двух частиц, взаимодействующих центральной силой (см. п/пп. 6.4.3, 6.4.4).

Специфической частью данной задачи является решение радиального уравнения Шрёдингера для кулоновского потенциала взаимодействия частиц (6.4.15), (7.1.28):

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{12}} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + \Phi_{eff}(r, l) \chi = E \chi. \quad (7.3.3)$$

В (7.3.3)

$$m_{12} = \frac{m_e m_n}{m_e + m_n} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_n}} \quad (7.3.4)$$

приведенная масса электрона и ядра. Поскольку масса электрона очень мала по сравнению с массой ядра, приведенная масса (7.3.4) практически не отличается от массы электрона. Так,  $m_e/m_p = 5,44617013(11) \cdot 10^{-4}$ , и приведенная масса атома водорода меньше массы электрона всего на 0.05%.

В соответствии с (6.4.16) и (7.3.1) эффективная потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром, определяющая вид решений уравнения (7.3.3), зависит от расстояния  $r$  между ними следующим образом:

$$\Phi_{eff}(r, l) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_{12}r^2} + \Phi_0. \quad (7.3.5)$$

На больших расстояниях электрона от ядра в функции (7.3.5) преобладает медленнее убывающее с ростом  $r$  отрицательное «кулоновское» слагаемое, а на малых (при  $l \neq 0$ ) — быстрее

возрастающая с уменьшением  $r$  положительная центробежная энергия. Поэтому функция (7.3.5) имеет вид потенциальной «ямы». При  $E < \Phi_0$  в этой «яме» располагаются уровни энергии  $E_{l,v}$ , которые отвечают связанным состояниям электрона и ядра (7.3.2). При  $E \geq \Phi_0$  реализуются состояния рассеяния электрона на ядре.

В последующих формулах будут использованы две размерные комбинации, составленные из параметров задачи: характерная длина

$$r^* = \frac{\hbar^2}{m_{12}e^2} \quad (7.3.6)$$

и характерная энергия

$$E^* = \frac{m_{12}e^4}{\hbar^2} = \frac{e^2}{r^*}. \quad (7.3.7)$$

Величины (7.3.6) и (7.3.7) «появляются» в процессе приведения уравнения (7.3.3), (7.3.5) к безразмерному виду и служат естественными масштабами для расстояния электрона от ядра  $r$  и энергии  $E$ .

Если в формулах (7.3.6) и (7.3.7) заменить приведенную массу электрона и ядра (7.3.4) близкой к этой величине массой электрона, получим две универсальные постоянные, которые часто используются в атомной физике как внесистемные единицы измерения расстояний (длин) и энергий. Это — *боровский радиус*

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \quad (7.3.8)$$

и постоянная Хартри

$$\text{Ha} = \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a_0}. \quad (7.3.9)$$

Часто вместо постоянной Хартри (7.3.9) с той же целью пользуются константой Ридберга

$$\text{Ry} = \text{Ha}/2. \quad (7.3.10)$$

Приведём для справок численные значения приведенных универсальных постоянных:

$$\begin{aligned} a_0 &= 0,0529177249(24) \text{ Нм}; \\ \text{Ha} &= 4,3597482(26) \cdot 10^{-18} \text{ Дж} = 27,2113962(80) \text{ эВ}; \\ \text{Ry} &= 13,6056981(40) \text{ эВ}. \end{aligned}$$

С учётом (7.3.4) масштабные величины (7.3.6), (7.3.7) можно выразить через универсальные постоянные (7.3.8) – (7.3.10):

$$r^* = a_0 \left( 1 + \frac{m_e}{m_n} \right); \quad E^* = \frac{\text{Ha}}{1 + \frac{m_e}{m_n}}. \quad (7.3.11)$$

Ниже будут описаны и проанализированы основные результаты, следующие из решения радиального уравнения (7.3.3) с учётом (7.3.4) и (7.3.5). Само решение читателям предлагается выполнить самостоятельно.

**Задача 7.3.1.** Решив радиальное уравнение (7.3.3) – (7.3.5), вычислите энергетические уровни и волновые функции, описывающие связанные состояния электрона и ядра в атоме водорода и водородоподобном ионе.

### 7.3.2. Энергетические уровни

Энергетические уровни  $E_{l,v}$ , которые являются собственными значениями радиального уравнения, следующим образом зависят от азимутального  $l$  и колебательного  $v$  квантовых чисел:

$$E_{l,v} = \Phi_0 - \frac{E^* Z^2}{2(l+v+1)^2}; \quad l = 0, 1, 2, \dots; v = 0, 1, 2, \dots \quad (7.3.12)$$

(Заметим, что в квантовой механике атомов по чисто историческим причинам величину  $v$  принято называть радиальным квантовым



числом и обозначать  $n_r$ . Мы, однако, не будем вводить второе, к тому же громоздкое обозначение для одной и той же величины).

*Статистический вес* или степень (кратность) вырождения  $g_{l,\nu}$  энергетического уровня (7.3.12) в соответствии с (6.4.23) равен  $2l+1$  (см. п/п. 6.4.5). Однако если две частицы, как в рассматриваемом случае, взаимодействуют по закону Кулона (7.3.1), то энергия связанного состояния  $E_{l,\nu}$  (7.3.12) зависит не «по отдельности» от азимутального  $l$  и колебательного (радиального)  $\nu$  квантовых чисел, а *от их суммы*. Поэтому, например, разные состояния атома водорода или водородоподобного иона с  $l = 0, \nu = 2$  (а),  $l = 1, \nu = 1$  (б),  $l = 2, \nu = 0$  (с) обладают одной и той же энергией

$$E_{0,2} = E_{1,1} = E_{2,0} = \Phi_0 - \frac{E^* Z^2}{2 \cdot 3^2}.$$

Эта ситуация известна под названием «случайного» вырождения энергетических уровней атома водорода и водородоподобных ионов.

При наличии случайного вырождения принято для нумерации уровней энергии (7.3.12) использовать не два квантовых числа  $l$  и  $\nu$ , а одно, которое называется *главным квантовым числом*:

$$n = l + \nu + 1. \quad (7.3.13)$$

Очевидно,  $n \geq 1$ .

С учётом (7.3.13) вместо (7.3.12) получим следующее выражение для подсчёта энергетических уровней:

$$E_n = \Phi_0 - \frac{E^* Z^2}{2n^2}; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.3.14)$$

*Основной* (т.е. наинизший) энергетический уровень соответствует значению главного квантового числа  $n = 1$ . Чтобы атом перешёл в первое *возбуждённое* состояние при  $n = 2$ , к нему необходимо подвести *резонансную* энергию

$$E_2 - E_1 = \frac{3}{8} E^* Z^2. \quad (7.3.15)$$

По мере увеличения энергии связь электрона с ядром становится всё более слабой, и при  $n \rightarrow \infty$  происходит отрыв электрона от ядра, т.е. *ионизация*. Энергия  $I$ , которую требуется подвести к атому, находящемуся в основном состоянии, чтобы его ионизовать, называется *энергией (потенциалом) ионизации*. Для рассматриваемой системы

$$I = E_\infty - E_1 = \frac{1}{2} E^* Z^2. \quad (7.3.16)$$

Заметим, что энергия ионизации (7.3.16) атома водорода ( $Z = 1$ ) с учётом (7.3.10), (7.3.11) близка к постоянной Ридберга  $Ry$ :

$$I_H = \frac{Ry}{1 + \frac{m_e}{m_n}}.$$

С учётом приведенных выше численных значений универсальных постоянных  $I_H = 13,5983922(40)$  эВ.

Статистический вес  $g_n$  уровня энергии (7.3.14), заданного главным квантовым числом  $n$  (7.3.13), подсчитывается просто как сумма статистических весов  $g_{l,v} = 2l + 1$  для всевозможных значений квантовых чисел  $l$  и  $v$ , реализующихся при данном  $n$ :  $l = 0, v = n - 1; l = 1, v = n - 2; \dots l = n - 1, v = 0$ :

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2. \quad (7.3.17)$$

### 7.3.3. Волновые функции

Радиальная функция имеет вид

$$\chi_{l,v}(r) = \left( \frac{r}{r^*} \right)^{l+1} e^{-\beta_{l,v} \frac{r}{r^*}} \omega_{l,v} \left( 2\beta_{l,v} \frac{r}{r^*} \right). \quad (7.3.18)$$

Величина  $\beta_{l,v}$  зависит от азимутального  $l$  и колебательного  $v$  квантовых чисел следующим образом [ср. с (7.3.12)]:

$$\beta_{l,v} = \frac{Z}{v+l+1}; \quad l=0, 1, 2, \dots; v=0, 1, 2, \dots \quad (7.3.19)$$

Функция из выражения (7.3.18)

$$\omega_{l,v}(\xi) = \sum_{i=0}^v b_i^{(l,v)} \xi^i, \quad (7.3.20)$$

представляет собой полином степени  $v$  по переменной

$$\xi = 2\beta_{l,v} \frac{r}{r_*}, \quad (7.3.21)$$

в которую входят величины (7.3.6) и (7.3.19). Коэффициенты полинома (7.3.19)  $b_i^{(l,v)}$  связаны рекуррентным соотношением

$$b_{i+1}^{(l,v)} = \begin{cases} \frac{i-v}{(i+1)(2l+2+i)} b_i^{(l,v)}; & 0 \leq i \leq v; \\ 0; & i > v. \end{cases} \quad (7.3.22)$$

и подсчитываются по формулам

$$b_1^{(l,v)} = -\frac{v}{2l+2} b_0;$$

$$b_2^{(l,v)} = -\frac{v-1}{2(2l+3)} b_1^{(l,v)} = \frac{v(v-1)}{2(2l+3)(2l+2)} b_0;$$

$$b_3^{(l,v)} = -\frac{v-2}{2(2l+3)(2l+4)} b_2^{(l,v)} = -\frac{v(v-1)(v-2)}{2(2l+2)(2l+3)(2l+4)} b_0$$

и т.д. Константа  $b_0$  — произвольная постоянная, значение которой можно найти из условия нормировки (6.4.21) радиальной функции (7.3.2)

$$\int_0^{\infty} |\chi_{l,v}(r)|^2 dr = 1. \quad (7.3.23)$$

Квадрат модуля нормированной (7.3.23) радиальной волновой функции  $\chi_{l,v}(r)$  (7.3.18) есть плотность вероятности того, что расстояние между электроном и ядром равно  $r$ . Эта функция позволяет подсчитать различные статистические характеристики рассматриваемого распределения вероятностей — в частности, среднее расстояние электрона от ядра

$$\bar{r}_{l,v} = \int_0^{\infty} |\chi_{l,v}(r)|^2 r dr. \quad (7.3.24)$$

Величину (7.3.24) можно интерпретировать как эффективный радиус атома.

Нормированная волновая функция *основного состояния* атома водорода или водородоподобного иона (7.3.18) [ $l = v = 0$ ,  $\beta_{0,0} = Z$  (7.3.19)] имеет вид

$$\chi_{0,0}(r) = \sqrt{\frac{4Z^3}{r^*}} \left( \frac{r}{r^*} \right) e^{-Z \frac{r}{r^*}}. \quad (7.3.25)$$

Эта функция достаточно быстро, т.е. пропорционально  $r$ , обращается в ноль при  $r \rightarrow 0$  [см. условие (6.4.17) из п/п. 6.4.3)], имеет максимум при расстоянии электрона от ядра

$$r_{\max} = \frac{r^*}{Z} \quad (7.3.26)$$

и экспоненциально быстро стремится к нулю при  $r \rightarrow \infty$  (6.4.18).

Величина (7.3.26) есть наиболее вероятное расстояние электрона от ядра в основном состоянии атома водорода или водородоподобного иона. Среднее расстояние электрона от ядра (7.3.24) в основном состоянии (7.3.25):

$$\bar{r}_{0,0} \equiv \bar{r}_1 = \frac{3}{2Z} r^*. \quad (7.3.27)$$

Интересно отметить, что с точки зрения классической механики устойчивое состояние электрона и ядра, описываемое волновой функцией (7.3.25), невозможно. В самом деле, в основном состоянии рассматриваемой системы  $l = 0$ , т.е. равен нулю момент импульса относительного движения электрона и ядра  $M = \sqrt{\mathbf{M}^2}$ . Иначе говоря, нет вращения электрона вокруг ядра, и в эффективной потенциальной энергии системы (7.3.5) отсутствует

центробежное отталкивание, уравнивающее кулоновское притяжение электрона и ядра. Тогда из (7.3.5) очевидно, что электрон должен просто «упасть» на ядро, а энергия такой системы обратится в  $-\infty$ . То, что в действительности энергия основного состояния системы (7.3.14) конечна,

$$E_1 = \Phi_0 - \frac{E^* Z^2}{2} = \Phi_0 - I$$

[см. (7.3.16)], а рассматриваемое состояние существует и является наиболее устойчивым состоянием рассматриваемой системы, есть квантовый эффект, необъяснимый с позиций классической механики.

Следует отметить, что то же самое касается и всех возбуждённых состояний системы  $\chi_{0,\nu}(r)$  при  $l = 0$  и  $\nu > 0$ .

Волновые функции  $\chi_{0,\nu}(r)$  (7.3.18), как и  $\chi_{0,0}(r)$  (7.3.25), обращаются в ноль при  $r \rightarrow 0$  как  $r^1$  и быстро стремятся к нулю при  $r \rightarrow \infty$ , а при  $0 < r < \infty$  имеют  $\nu$  узлов и  $\nu + 1$  экстремумов (максимумов и минимумов). Таков же характер осцилляций и у функций  $\chi_{l,\nu}(r)$  при  $l > 0$ .

По мере возбуждения атома электрон в среднем оказывается всё дальше от ядра, так что его эффективный размер (7.3.24) быстро растёт. Можно показать, что в состоянии атома с главным квантовым числом  $n$

$$\bar{r}_n \approx \frac{r^*}{Z} n^2. \quad (7.3.28)$$

### 7.3.4. Сравнение теории с экспериментом

Задолго до создания квантовой механики спектроскопические экспериментальные исследования показали, что спектр излучения атомарного водорода представляет собой систему спектральных линий, расположенных в видимом и ультрафиолетовом диапазонах длин волн. В расположении этих спектральных линий были обнаружены «сериальные» закономерности, которые описываются следующей формулой:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (7.3.29)$$

где  $\lambda$  — длина волны спектральной линии,  $R$  — константа [она тоже называется постоянной Ридберга — не путать с универсальной постоянной  $R_y$  (7.3.10)!], а  $m$  и  $n$  — целые числа. Группа спектральных линии, образующих последовательность

$$m = 1; \quad n = 2, 3, 4, \dots$$

известна как «серия Лаймана»; последовательность

$$m = 2; \quad n = 3, 4, 5, \dots$$



называется «серия Бальмера»; последовательность

$$m = 3; \quad n = 4, 5, 6, \dots$$

— «серия Пашена» и т.д.

Указанная закономерность легко объясняется, если принять во внимание, что при изменении энергии атома на величину  $\Delta E$  излучается ( $\Delta E < 0$ ) или поглощается ( $\Delta E > 0$ ) порция (квант) электромагнитного поля с частотой  $\nu = |\Delta E|/h$  или длиной волны  $\lambda = hc/|\Delta E|$  ( $c$  — скорость света). Здесь  $h = 2\pi\hbar$  — «старая» постоянная Планка [см. формулы (1.4.3), (1.4.4) из п/п. 1.4.1].

Развитая выше теория показывает, что при переходе атома водорода из состояния с главным квантовым числом  $n$  в состояние с главным квантовым числом  $m < n$  изменение его энергии (7.3.14) равно

$$\Delta E_{nm} = E_n - E_m = I_H \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

где  $I_H$  — энергия ионизации атома водорода (7.3.16). Такой переход должен сопровождаться излучением кванта света с волновым числом (обратной длиной волны)

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{I_H}{hc} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (7.3.30)$$

Тогда всевозможные переходы атомов водорода из более возбуждённых в менее возбуждённые состояния должны привести к появлению в спектре излучения различных спектральных линий с длинами волн, которые определяются формулой (7.3.30).

Но, как видно из сравнения с экспериментальным соотношением (7.3.29), формула (7.3.30) в точности соответствует эксперименту, а эмпирическая постоянная Ридберга в (7.3.29) выражается через рассчитанную теоретически величину  $I_H$ :

$$R = \frac{I_H}{hc}. \quad (7.3.31)$$

Это свидетельствует о блестящем качественном согласии теории и эксперимента.

Обработка экспериментальных данных о спектре излучения атома водорода по формуле (7.3.29) приводит к следующей оценке величины постоянной Ридберга:

$$R \approx 109680(10) \text{ см}^{-1}$$

(см. обсуждение по поводу спектроскопических единиц измерения в конце п/п. 7.2.3). Приведенное в п/п. 7.3.2 теоретически рассчитанное значение величины  $I_H$  даёт следующую величину правой части равенства (7.3.31):

$$\frac{I_H}{hc} = 109678,39(30) \text{ см}^{-1}.$$

Как видим, равенство (7.3.31) выполняется с весьма высокой точностью. Это свидетельствует о превосходном количественном согласии теории и эксперимента.

Необходимо, впрочем, отметить, что эмпирическая формула (7.3.29) описывает экспериментальные данные не вполне точно. Она не учитывает «тонкой структуры» спектральных линий атомарного водорода, многие из которых, как показывают измерения, в действительности представляют собой «дублеты», т.е. пары близко расположенных линий. В первом приближении это расщепление можно игнорировать. Такому приближению и соответствует формула (7.3.29).

Теоретическая формула (7.3.30) также, очевидно, не передаёт тонкую структуру спектра. По этой причине равенство (7.3.31) выполняется с погрешностью, превышающей ошибки определения его левой части (из эксперимента) и правой (из теоретического расчёта).

Дальнейшее развитие теории, связанное с учётом *релятивистских эффектов*, возникающих во «взаимоотношениях» электрона и ядра (наличие собственного магнитного момента электрона, связанного с его спином, и взаимодействие этого магнитного момента с магнитным полем, которое генерирует движущийся вокруг ядра отрицательно заряженный электрон, а также зависимость массы электрона от скорости его движения),

приводит к резкому (на три порядка) улучшению согласия теории с экспериментом. После этого остаются лишь крошечные расхождения, которые удаётся ликвидировать, используя квантовую электродинамику.

Таким образом, в конечном счёте квантовая теория позволяет рассчитать спектр излучения атомарного водорода, который полностью совпадает с исключительно точными (8–9 верных значащих цифр) результатами измерения волновых чисел в спектроскопических экспериментах. Несомненно, этот результат можно рассматривать как одно из блестящих подтверждений правильности квантовой физики.

### **Вопросы для самопроверки**

7.3.1. Как изменяется вид эффективной потенциальной энергии взаимодействия электрона и ядра в атоме водорода или водородоподобном ионе при изменении вращательного (азимутального) квантового числа? Имеются ли предельные значения вращательного квантового числа, как в двухатомной молекуле?

7.3.2. Руководствуясь формулой для подсчёта энергетических уровней, изобразите качественно энергетический спектр атома (иона) в виде зависимости энергии от колебательного квантового числа при нескольких значениях азимутального квантового числа (0, 1, 2). Как, пользуясь полученным изображением, объяснить природу случайного вырождения энергетических уровней?

7.3.3. Какие экспериментальные данные и с какой точностью подтверждают результаты теоретического расчёта энергетических уровней атома водорода и водородоподобных ионов?