# Атомная физика

## Лекция 14

**М.Ю. Рябикин**

***канд. физ.-мат. наук, в.н.с. ИПФ РАН***

**ННГУ им. Н.И. Лобачевского, ВШОПФ**

**2025**

# Гамильтониан. Стационарные состояния. Уравнение Шредингера

## Предельный переход от квантовой механики к классической

КМ должна содержать в себе классическую механику (КлМ) в качестве предельного случая. Как осуществляется этот переход?

**КМ**: электрон описывается ВФ-ей. ВФ определяет возможные результаты измерений координат электрона. ВФ является решением некоторого линейного дифференциального уравнения в частных производных.

**КлМ**: электрон – материальная частица, движущаяся по траектории, полностью определяемой уравнениями движения.

Нетрудно увидеть, что взаимоотношение между КМ и КлМ в некотором смысле аналогично взаимоотношению между волновой и геометрической оптикой в электродинамике.

**Волновая** оптика: ЭМ волны описываются векторами электрического и магнитного полей, удовлетворяющими системе линейных дифференциальных уравнений в частных производных (уравнений Максвелла).

**Геометрическая** оптика: распространение ЭМ волн описывается в терминах движения по определенным траекториям – лучам.

Можно ожидать, что предельный переход от КМ к КлМ происходит аналогично переходу от волновой к геометрической оптике.

## 1. Электродинамика.

Любая из компонент поля в ЭМ волне может быть представлена как $u = ae^{i\varphi}$, где $a$ и $\varphi$ – вещественные амплитуда и фаза поля ($\varphi$ называют в геометрической оптике ***эйконалом***). Предельный случай геометрической оптики соответствует малым длинам волн по сравнению с характерным размером $L$ области неоднородности оптических свойств среды – см. таблицу (левая часть). Математически этому соответствует большая величина изменения фазы $\varphi$ на таких расстояниях $\rightarrow$ фазу можно считать большой по абсолютной величине.

| **Электродинамика** | **Механика** |
|---|---|
| **Волновая оптика** | **Квантовая механика** |
| $\lambda \geq L$ | $\lambda_Б \geq L$ |
| **Геометрическая оптика** | **Классическая механика** |
| $\lambda << L$ | $\lambda_Б << L$ |

## 2. Механика.

Можно предположить, что и в механике предельный случай перехода от волнового описания к описанию в терминах траекторий, т.е. перехода от КМ к КлМ, соответствует малым длинам волн де Бройля по сравнению с характерным размером $L$ области неоднородности силового поля – см. таблицу (правая часть). Математически этому соответствуют ВФ вида $u = ae^{i\varphi}$, где $a$ – медленно меняющаяся на масштабе $L$ функция, а фаза $\varphi$ принимает большие значения.

Проведенное выше сравнение показывает, что траектория движения частицы в классической механике является аналогом светового луча в геометрической оптике. Ход лучей в одном случае и траектория частицы в другом случае определяются схожими принципами.

В геометрической оптике ход лучей определяется ***принципом Ферма***, согласно которому должна быть минимальной «оптическая длина пути» луча, т.е. разность его фаз в конце и в начале пути.

Аналогично, в механике траектория частицы может быть определена из вариационного принципа, согласно которому действие $S$ механической системы между началом и концом пути должно быть минимальным (***принцип наименьшего действия***).

Исходя из этой аналогии можно утверждать, что фаза $\varphi$ ВФ-и в классическом предельном случае должна быть пропорциональна механическому действию $S$ данной физической системы: $S = \text{const}\times\varphi$. Коэффициент пропорциональности называется ***постоянной Планка*** и обозначается буквой $\hbar$. Эта постоянная имеет размерность действия (соответственно, $\varphi$ – безразмерная величина) и равна

$\hbar = 1.054\times10^{-27}$ эрг×сек.

↓

ВФ «почти классической» (или ***квазиклассической***) физической системы имеет вид

$$\Psi = ae^{iS/\hbar}. \qquad (14.1)$$

Правило квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\oint pdr = 2\pi n\hbar$$

Проведенное выше сравнение показывает, что траектория движения частицы в классической механике является аналогом светового луча в геометрической оптике. Ход лучей в одном случае и траектория частицы в другом случае определяются схожими принципами.

В геометрической оптике ход лучей определяется ***принципом Ферма***, согласно которому должна быть минимальной «оптическая длина пути» луча, т.е. разность его фаз в конце и в начале пути.

Аналогично, в механике траектория частицы может быть определена из вариационного принципа, согласно которому действие $S$ механической системы между началом и концом пути должно быть минимальным (***принцип наименьшего действия***).

Исходя из этой аналогии можно утверждать, что фаза $\varphi$ ВФ-и в классическом предельном случае должна быть пропорциональна механическому действию $S$ данной физической системы: $S = \text{const}\times\varphi$. Коэффициент пропорциональности называется ***постоянной Планка*** и обозначается буквой $\hbar$. Эта постоянная имеет размерность действия (соответственно, $\varphi$ – безразмерная величина) и равна

$\hbar = 1.054\times10^{-27}$ эрг×сек.

↓

ВФ «почти классической» (или ***квазиклассической***) физической системы имеет вид

$$\Psi = ae^{iS/\hbar}. \qquad (14.1)$$

$\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (импульс)

$E = \hbar\omega$ (энергия)

$S = \hbar\phi$ (действие)

Малость величины $\hbar$ по сравнению с характерными значениями действия для макроскопических частиц обеспечивает большие значения фазы ВФ (14.1) для случаев, соответствующих системам с квазиклассическим поведением.

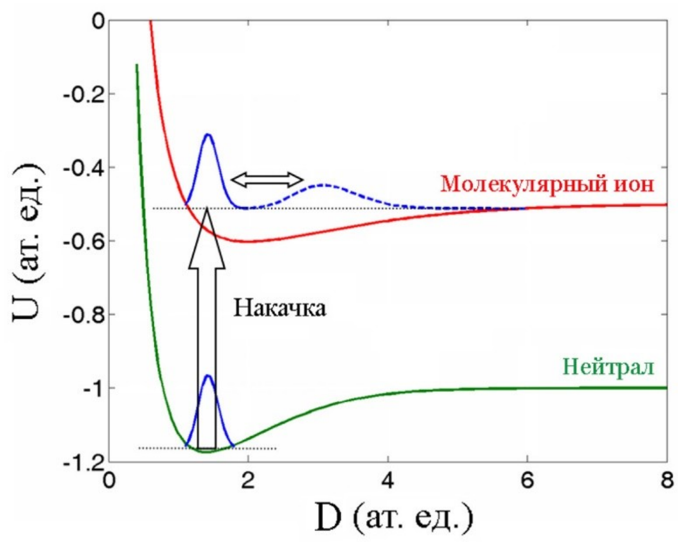
Формально малость длины волны де Бройля (отвечающую ситуации, аналогичной переходу к геометрической оптике) для частицы можно обеспечить, считая квант действия $\hbar$ некоторым параметром задачи и осуществляя предельный переход $\hbar \to 0$ по этому параметру. Действительно, по формуле де Бройля при $\hbar \to 0$ длина волны де Бройля $\lambda_D = 2\pi\hbar/p$ также стремится к нулю. Поэтому переход от квантовой теории к классической в уравнении Шредингера (см. далее) можно осуществить, выполняя в нем предельный переход $\hbar \to 0$.

Следует отметить, что движение в предельном случае, описываемом ВФ (14.1), отнюдь не переходит к движению по определенной траектории. Можно лишь говорить, что при заданном начальном вероятностном распределении координат в дальнейшем это распределение будет перемещаться в соответствии с законами классической механики. Это относится, в частности, к среднему значению координат (***теорема Эренфеста***).

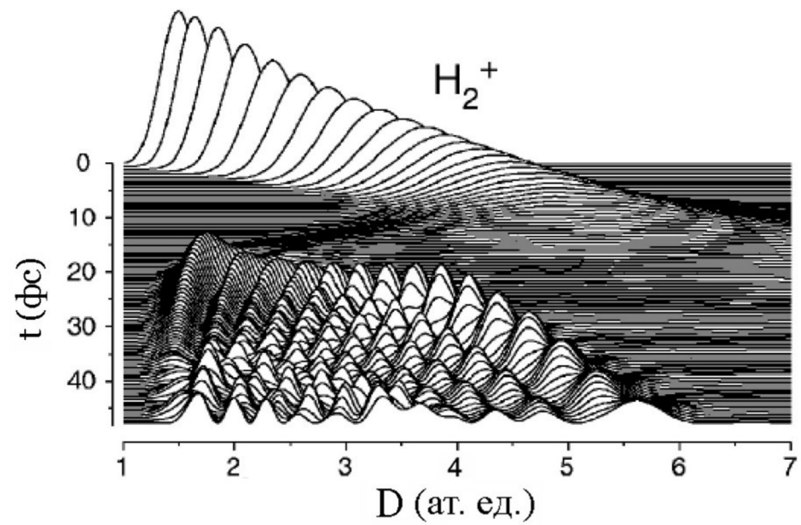
Пронаблюдать динамику, схожую с движением по определенной траектории, удается в случае, если ВФ представляет собой функцию, локализованную в очень малой области пространства (***волновой пакет***). По крайней мере на некотором отрезке времени волновой пакет, оставаясь достаточно хорошо локализованным, будет перемещаться в пространстве как классическая частица, после чего в его динамике начнут все же наблюдаться волновые свойства, например, начнут появляться квантовые интерференционные эффекты.

Пример: динамика колебательного волнового пакета в двухатомной молекуле.

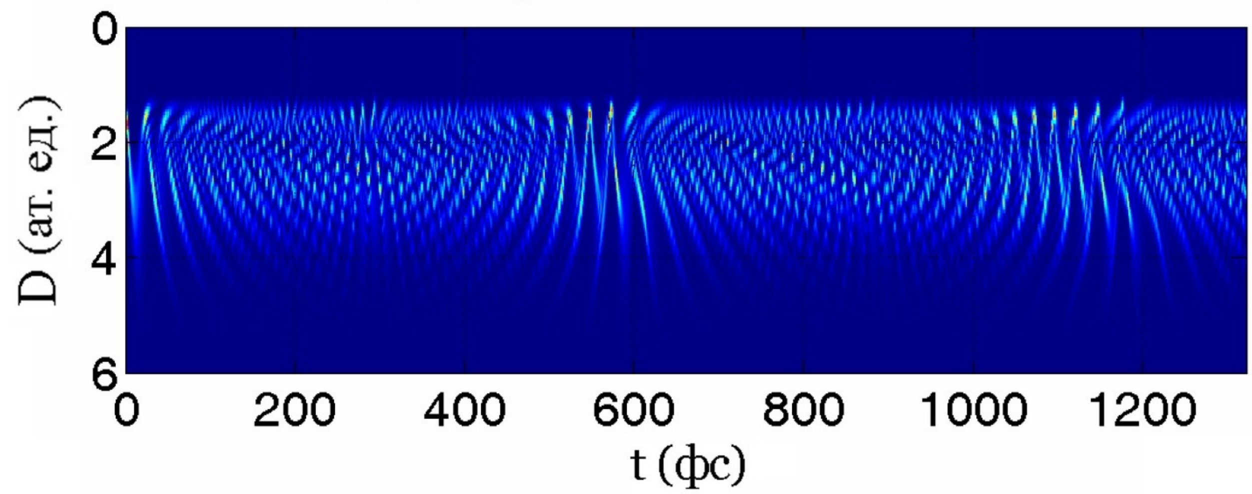
Создание ВП




Начальная стадия динамики ВП




Долговременная эволюция ВП




Коллапсы и возрождения квантовомеханического волнового пакета.

## Гамильтониан

ВФ полностью определяет состояние физической системы в КМ. → Задание этой функции в некоторый момент $t$ не только описывает все свойства системы в этот момент, но и предопределяет её дальнейшее поведение. Математически это выражается в том, что значение производной $\partial\Psi/\partial t$ в каждый данный момент $t$ должно определяться значением самой функции $\Psi$ в тот же момент. Эта зависимость, согласно принципу суперпозиции, должна быть линейной. В наиболее общем виде это можно записать как

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi\,, \qquad (14.2)$$

где $\hat{H}$ – некоторый линейный оператор; смысл введения множителя $i\hbar$ выяснится из дальнейшего.

Интеграл $\int\Psi^*\Psi dq$ есть постоянная, не зависящая от времени величина →

$$\frac{d}{\partial t}\int|\Psi|^2 dq = \int\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi dq + \int\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}dq = 0\,.$$

В 1-м слагаемом поменяем местами $\dfrac{\partial\Psi^*}{\partial t}$ и $\Psi$ и для $\dfrac{\partial\Psi^*}{\partial t}$ из (14.2) напишем:

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \hat{H}^*\Psi^*\text{, или } \frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}^*\Psi^*\,.$$

Во 2-е слагаемое подставим $\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi$. Опустив общий множитель $i/\hbar$, пишем:

$\int \Psi \hat{H}^* \Psi^* dq - \int \Psi^* \hat{H}\Psi dq =$ (используем транспонирование)

$$= \int \Psi^* \tilde{\hat{H}}^* \Psi dq - \int \Psi^* \hat{H}\Psi dq = \int \Psi^* \left( \tilde{\hat{H}}^* - \hat{H} \right) \Psi dq = \int \Psi^* \left( \hat{H}^+ - \hat{H} \right) \Psi dq = 0 .$$

Это равенство должно выполняться для произвольной функции $\Psi$ → должно быть тождественно $\hat{H}^+ = \hat{H}$ → оператор $\hat{H}$ эрмитов.

Какой величине соответствует оператор $\hat{H}$ ?

Воспользуемся предельным выражением ВФ: $\Psi = ae^{iS/\hbar}$ →

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\Psi, \text{ или } i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\partial S}{\partial t}\Psi$$

(медленно меняющуюся амплитуду $a$ можно не дифференцировать). Сравниваем полученное равенство с (14.2) → в предельном случае оператор $\hat{H}$ сводится к простому умножению на величину $-\partial S/\partial t$. → Последняя и есть та физическая величина, в которую переходит эрмитов оператор $\hat{H}$. Но $-\partial S/\partial t$ есть не что иное, как функция Гамильтона физической системы. → $\hat{H}$ – оператор, соответствующий в КМ функции Гамильтона. Его называют ***оператором Гамильтона***, или ***гамильтонианом*** системы.

Убедимся, что уравнению (14.2) удовлетворяет, например, плоская волна де Бройля

$$\psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(pr - Et)}. \qquad (14.3)$$

Действительно, из (14.3) $\rightarrow$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\psi$$

и

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)\psi.$$

Учитывая, что для свободной частицы

$$\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} = E,$$

находим

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right).$$

Последнее уравнение принято записывать в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi.$$

Оператор в правой части – оператор кинетической энергии, или гамильтониан свободной частицы → приходим к уравнению (14.2).

Как мы отмечали ранее, любая волновая функция может быть разложена по полному набору базисных функций, например, по набору плоских волн де Бройля. Это означает, что уравнению (14.2) удовлетворяет не только плоская волна, но и любая их суперпозиция, т.е. любая ВФ.

Если вид гамильтониана известен, то уравнение (14.2) определяет волновые функции данной физической системы. Это основное уравнение КМ называется ***волновым уравнением***.

## Дифференцирование операторов по времени

КлМ: Определение производной физической величины по $t$ связано с рассмотрением её значений в два близких, но всё же различных момента времени.

КМ: Величина, имеющая в некоторый момент $t$ определённое значение, не имеет в следующие моменты, вообще говоря, никакого определённого значения. →

Понятие о производной физической величины по времени должно быть в КМ определено иным образом, чем в КлМ.

Пусть имеется величина $f$, среднее значение которой равно $\bar{f}$. Естественно определить производную $\dot{f}$ от величины $f$ как величину, среднее значение которой равно производной от среднего значения $\bar{f}$:

$$\overline{\dot{f}} = \dot{\bar{f}} . \qquad (14.4)$$

Исходя из этого определения, нетрудно получить выражение для КМ оператора $\hat{\dot{f}}$, соответствующего величине $\dot{f}$:

$$\overline{\dot{f}} = \dot{\bar{f}} = \frac{d}{dt} \int \Psi^* \hat{f} \Psi \, dq = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \Psi \, dq + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{f} \, \Psi \, dq + \int \Psi^* \hat{f} \, \frac{\partial \Psi}{\partial t} \, dq \qquad (14.5)$$

(запишем в таком порядке).

Здесь $\partial\hat{f}/\partial t$ – оператор, получающийся дифференцированием оператора $\hat{f}$ по времени, от которого последний может зависеть как от параметра. Подставляем $\partial\Psi/\partial t$ и $\partial\Psi^*/\partial t$ из волнового уравнения (14.2) →

$$\bar{\dot{f}} = \int \Psi^* \frac{\partial\hat{f}}{\partial t} \Psi\, dq + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}^*\Psi^*)\, \hat{f}\, \Psi\, dq - \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* \hat{f}\, (\hat{H}\Psi)\, dq.$$

Оператор $\hat{H}$ – эрмитов →

$$\int\left(\hat{H}^*\Psi^*\right)\left(\hat{f}\,\Psi\right)dq = \int\left(\hat{f}\,\Psi\right)\left(\hat{H}^*\Psi^*\right)dq = \int\Psi^*\tilde{\hat{H}}^*\left(\hat{f}\,\Psi\right)dq = \int\Psi^*\hat{H}\hat{f}\,\Psi dq\,.$$

Таким образом, имеем

$$\bar{\dot{f}} = \int \Psi^* \left(\frac{\partial\hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{f} - \frac{i}{\hbar}\hat{f}\hat{H}\right) \Psi\, dq.$$

С другой стороны, по определению средних значений, $\bar{\dot{f}} = \int \Psi^* \hat{\dot{f}}\Psi\, dq$ →

выражение в скобках под интегралом есть не что иное, как искомый оператор $\hat{\dot{f}}$ :

$$\hat{\dot{f}} = \frac{\partial\hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H}). \qquad (14.6)$$

Если оператор $\hat{f}$ не зависит от времени явно, то $\dot{\hat{f}}$ сводится, с точностью до множителя, к коммутатору $\hat{f}$ с гамильтонианом.

Очень важной категорией физических величин являются те, операторы которых не зависят явно от времени и, кроме того, коммутативны с гамильтонианом, так что $\dot{\hat{f}} = 0$. Такие величины называются ***сохраняющимися***. Для них

$$\overline{\dot{f}} = \dot{\overline{f}} = 0, \qquad (14.7)$$

т.е. $\overline{f}$ = const (среднее значение величины $f$ остаётся постоянным во времени). Можно также утверждать, что если в данном состоянии величина $f$ имеет определенное значение (т.е. ВФ является собственной функцией оператора $\hat{f}$ ), то и в дальнейшем она будет иметь определенное (то же самое) значение.

Далее всё это применим к гамильтониану.

## Стационарные состояния

Гамильтониан замкнутой системы (а также системы, находящейся в постоянном внешнем поле), не содержит времени явно, т.к. по отношению к такой системе все моменты времени эквивалентны. С другой стороны, всякий оператор коммутативен сам с собой. → У системы, не находящейся в переменном внешнем поле, **функция Гамильтона сохраняется**. Сохраняющаяся функция Гамильтона называется энергией. Смысл **закона сохранения энергии в КМ** состоит в том, что если в данном состоянии энергия имеет определенное значение, то это значение остаётся постоянным во времени.

Состояния, в которых энергия имеет определенные значения, называются ***стационарными состояниями***. Они описываются волновыми функциями $\Psi_n$, являющимися собственными функциями оператора Гамильтона, т.е. удовлетворяющими уравнению

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n, \qquad (14.8)$$

где $E_n$ – собственные значения энергии. Соответственно, волновое уравнение (14.2) для функции $\Psi_n$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_n}{\partial t} = \hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n \qquad (14.9)$$

может быть непосредственно проинтегрировано по времени и дает решение для ВФ стационарного состояния как функции координат и времени:

$$\Psi_n = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(q), \qquad (14.10)$$

где $\psi_n$ – функция только от координат.

Малой буквой $\psi$ мы будем обозначать координатную часть ВФ стационарных состояний. Эти функции, как и сами собственные значения энергии, определяются уравнением

$$\hat{H}\psi = E\psi. \qquad (14.11)$$

Стационарное состояние с наименьшим из всех возможных значений энергии называется ***основным состоянием*** системы.

Распределение вероятностей для координат в стационарном состоянии определяется квадратом $|\Psi_n|^2 = |\psi_n|^2$; видно, что оно не зависит от времени. То же самое относится и к средним значениям

$$\overline{f} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_n \, dq = \int \psi_n^* \hat{f} \psi_n \, dq .$$

**Собственная функция гамильтониана системы из нескольких невзаимодействующих частей.**

Если гамильтониан системы представляет собой сумму двух частей

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2\,, \qquad (14.12)$$

одна из которых содержит только координаты $q_1$, а другая – координаты $q_2$ (и производные по ним), то собственные функции оператора $\hat{H}$ могут быть представлены в виде произведений собственных функций операторов $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$

$$\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\psi_2(q_2), \qquad (14.13)$$

где $\hat{H}_1\psi_1(q_1) = E_{n_1}\psi_1(q_1)$ и $\hat{H}_2\psi_2(q_2) = E_{n_2}\psi_2(q_2)$, а собственные значения энергии равны суммам собственных значений этих операторов:

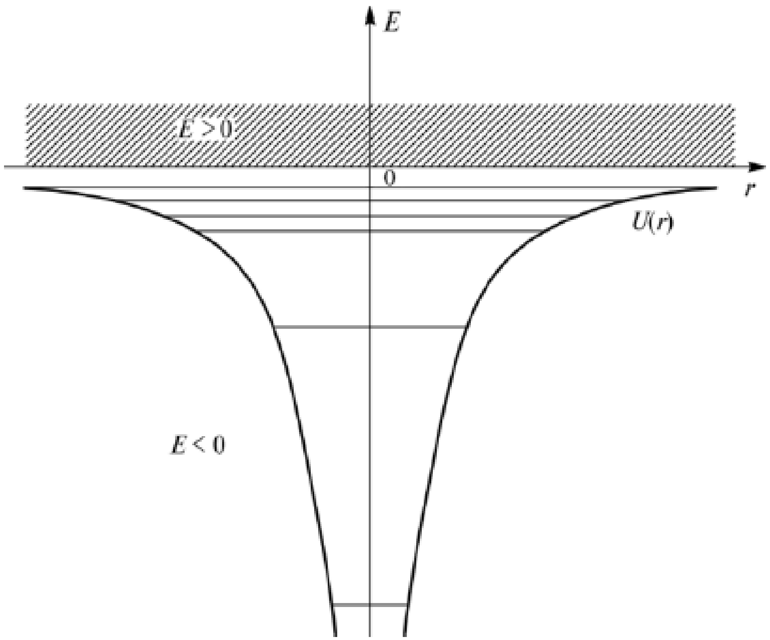
$$E_n = E_{n_1} + E_{n_2}\,. \qquad (14.14)$$

Действительно,

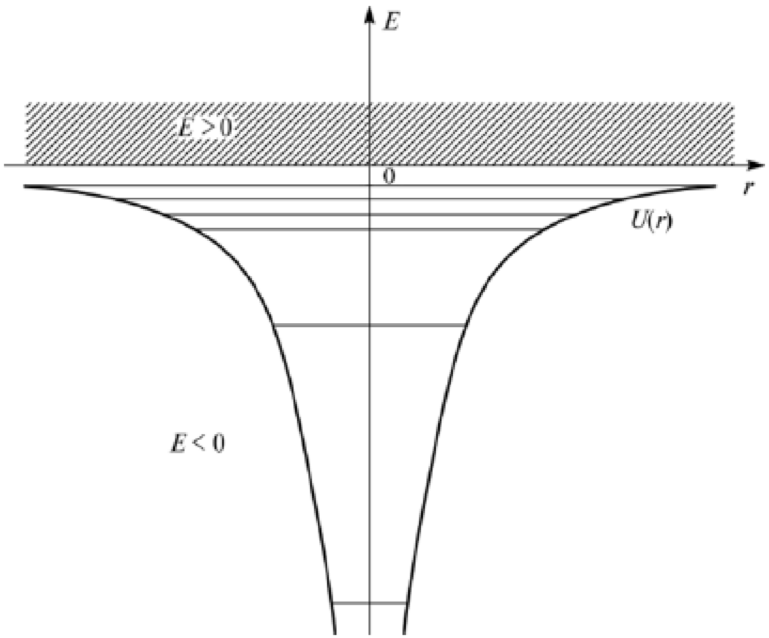
$$\hat{H}\psi = \left(\hat{H}_1 + \hat{H}_2\right)\psi_1\psi_2 = \left(\hat{H}_1\psi_1\right)\psi_2 + \psi_1\left(\hat{H}_2\psi_2\right) =$$

$$= E_{n_1}\psi_1\psi_2 + E_{n_2}\psi_1\psi_2 = \left(E_{n_1} + E_{n_2}\right)\psi_1\psi_2 = \left(E_{n_1} + E_{n_2}\right)\psi\,.$$

## Дискретный и непрерывный спектры энергии. Финитное и инфинитное движение.




Пусть частица находится в потенциале $U(\mathbf{r})$, величина которого на бесконечности спадает до нуля. Состояния с $E < 0$ – связанные. Движение классической частицы в таких состояниях финитно, т.к. она не может проникать в те области пространства, где $U(\mathbf{r}) > E$. Квантовая механика допускает нахождение частицы и в этой области, однако вероятность обнаружения её там быстро спадает по мере продвижения в классически недоступную область. $\rightarrow$ ВФ должна стремиться к нулю при $r \rightarrow \infty$. Формально далеко не все решения уравнения Шредингера обладают таким свойством, однако из физических соображений решения с $E < 0$, не удовлетворяющие требованию обращения ноль при $r \rightarrow \infty$, должны быть отброшены. Вышеупомянутому требованию $\psi(r \rightarrow \infty) = 0$ удовлетворяют лишь решения, соответствующие некоторым конкретным значениям энергии. $\rightarrow$ Состояния, отвечающие **финитному** движению, образуют **дискретный** спектр уровней энергии.




Состояния с $E > 0$ не являются связанными. Движение частицы в таких состояниях инфинитно, т.к. она не встречает при своем движении препятствий в виде потенциальных стенок, ограничивающих область её локализации. Типичными для таких состояний являются задачи рассеяния, когда частица приходит из бесконечности, рассеивается на потенциальном барьере или яме и снова уходит на бесконечность. Вдали от рассеивающего объекта движение частицы практически свободно. Как мы видели ранее, свободному движению с определенным импульсом отвечает ВФ в виде плоской волны де Бройля. Поскольку на величину импульса частицы, а, значит, и её энергии не возникает никаких ограничений, спектр энергий частицы в обсуждаемом случае **инфинитного** движения является **непрерывным**.

В отличие от состояний дискретного спектра, для которых интеграл $\int|\Psi|^2 dq$, взятый по всему пространству, конечен, в случае непрерывного спектра такой интеграл расходится. В этом случае квадрат модуля волновой функции $|\Psi|^2$ не определяет непосредственно вероятности различных значений координат, а должен рассматриваться лишь как величина, пропорциональная этой вероятности.

## Уравнение Шредингера

Ранее мы уже обсуждали конкретный вид операторов, соответствующих классическим выражениям для кинетической и потенциальной энергии частицы. Подставив выражения для этих операторов в уравнение (14.2), получим волновое уравнение для частицы во внешнем поле:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(x, y, z,) \Psi, \qquad (14.15)$$

а уравнение (14.11), определяющее стационарные состояния, принимает вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + [E - U(x, y, z)] \psi = 0. \qquad (14.16)$$

Уравнения (14.15), (14.16), установленные в 1926 г. Эрвином Шредингером, называются ***уравнениями Шредингера*** (часто их называют, соответственно, нестационарным и стационарным уравнениями Шредингера).

Проследим, каким образом происходит в уравнении Шредингера **предельный переход к классической механике**.

Подставим в уравнение Шредингера (14.15) предельное выражение для волновой функции $\Psi = ae^{iS/\hbar}$. Произведя дифференцирования и поделив все слагаемые на $-e^{iS/\hbar}$, получим

$$a\frac{\partial S}{\partial t} - i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}a\Delta S - \frac{i\hbar}{m}\nabla S\nabla a - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta a + Ua = 0.$$

В этом уравнении имеются чисто вещественные и чисто мнимые слагаемые. Приравнивая суммы тех и других по отдельности к нулю, получим два уравнения:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U - \frac{\hbar^2}{2ma}\Delta a = 0, \qquad (14.17а)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m}\Delta S + \frac{1}{m}\nabla S\nabla a = 0. \qquad (14.17б)$$

Учитывая, что в классическом пределе $\hbar/S << 1$, пренебрежем в (14.17а) слагаемым, содержащим $\hbar^2$, в результате чего получим

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U = 0. \qquad (14.18)$$

Это не что иное, как классическое **уравнение Гамильтона-Якоби** для действия $S$ частицы. Таким образом, при $\hbar \to 0$ классическая механика справедлива с точностью до величин 1-го порядка по $\hbar$ включительно.

Рассмотрим теперь уравнение (14.17б). Умножив его на $2a$, получим

$$2a\frac{\partial a}{\partial t}+\frac{a^2}{m}\Delta S+\frac{2a}{m}\nabla S\nabla a=0\,. \qquad (14.19)$$

Это уравнение может быть переписано в виде

$$\frac{\partial a^2}{\partial t}+\mathrm{div}\left(a^2\frac{\nabla S}{m}\right)=0\,. \qquad (14.20)$$

Убедимся в этом. 1-е слагаемые в (14.19) и (14.20) равны друг другу. Распишем подробнее 2-е слагаемое в (14.20):

$$\mathrm{div}\left(a^2\frac{\nabla S}{m}\right)=\sum_i\frac{\partial}{\partial x_i}\left(a^2\frac{\partial S/\partial x_i}{m}\right)=\frac{1}{m}\sum_i 2a\frac{\partial a}{\partial x_i}\frac{\partial S}{\partial x_i}+\frac{a^2}{m}\sum_i\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_i}S=\frac{2a}{m}(\nabla a,\nabla S)+\frac{a^2}{m}\Delta S\,.$$

Правая часть полученного выражения равна сумме двух последних слагаемых в (14.19). $\to$ Уравнения (14.19) и (14.20) тождественны друг другу.

Уравнение (14.20) имеет наглядный физический смысл.

$a^2$ есть плотность вероятности $\rho$ нахождения частицы в данной точке пространства; $\nabla S / m = \mathbf{p} / m$ есть классическая скорость частицы. → (14.20) есть не что иное, как **уравнение непрерывности**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \qquad (14.21)$$

где $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$ – плотность потока вероятности. Уравнение (14.21) показывает, что плотность вероятности перемещается по законам классической физики с классической скоростью $\mathbf{v}$ в каждой точке. Если вероятность уходит из малого объёма (дивергенция плотности потока вероятности положительна), то вероятность внутри этого объёма уменьшается на соответствующую величину.

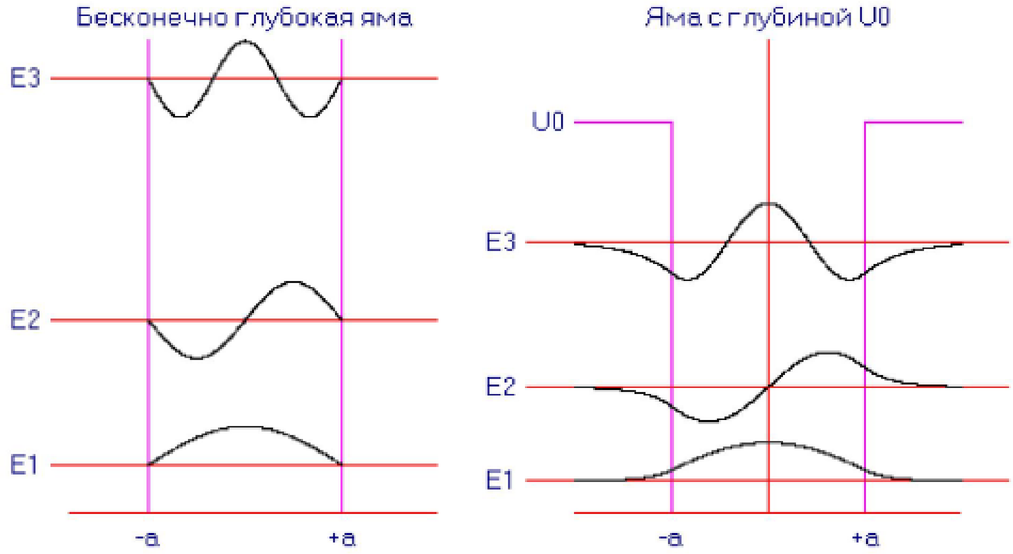
Можно показать, что уравнение непрерывности (14.21) является справедливым не только в классическом пределе, но и в общем случае (Ландау, Лифшиц, т. 3, §19). При этом плотность потока вероятности записывается как

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2m}\left(\Psi \hat{\mathbf{p}}^* \Psi^* + \Psi^* \hat{\mathbf{p}} \Psi\right). \qquad (14.22)$$

Применив теорему Гаусса, можно уравнение (14.21) переписать в интегральном виде. Интегрирование по всему пространству показывает, что в случае интегрируемой функции $\psi$ полная вероятность найти частицу где-либо в пространстве не зависит от времени. Отсюда следует **закон сохранения числа частиц**.

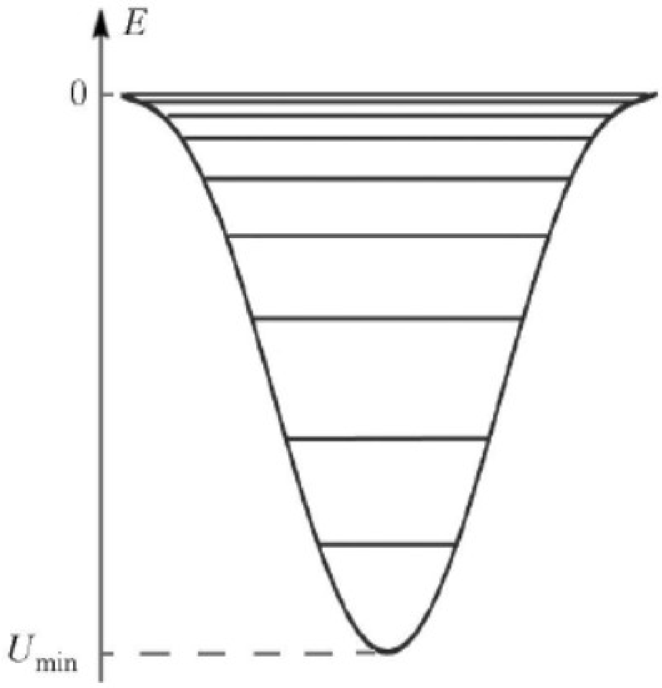
## Основные свойства уравнения Шредингера и его решений

Ряд основных свойств решения уравнения Шредингера уже обсуждался нами ранее (однозначность, непрерывность ВФ). ВФ остается непрерывной и когда поле $U\,(x,y,z)$ имеет разрывы. Непрерывность производной от ВФ, однако, нарушается, если в некоторой точке (или на некоторой поверхности) поле $U\,(\mathbf{r})$ обращается в бесконечность. В область пространства, где $U = \infty$, частица вообще не может проникнуть, т.е. там везде должно быть $\psi = 0$, а производные от ВФ на границе этой области испытывают скачок. Следует, однако, отметить, что обращение $U\,(\mathbf{r})$ в бесконечность является идеализацией.




В реальности поле всегда конечно; замена бесконечности на большую, но всё же конечную величину приводит к исчезновению скачка производной – см. случаи прямоугольных ям бесконечной и конечной глубины.

## Энергия основного состояния

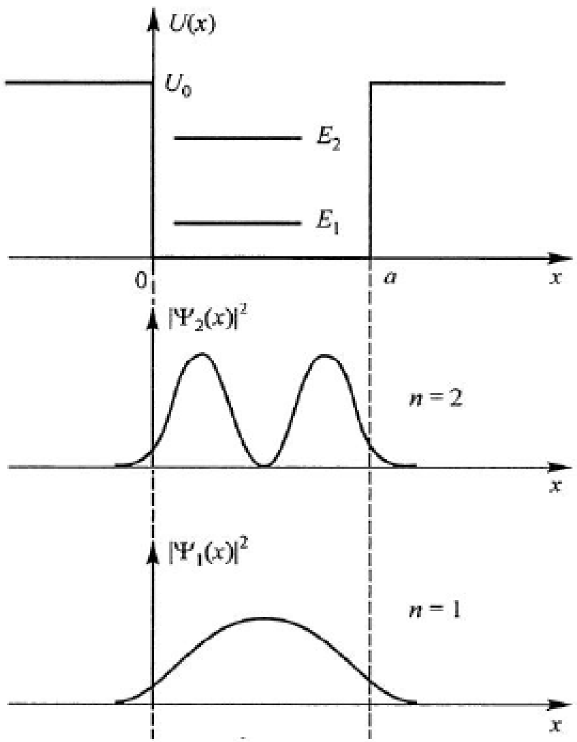



Пусть $U_{\min}$ – минимальное значение функции $U(x,y,z)$.

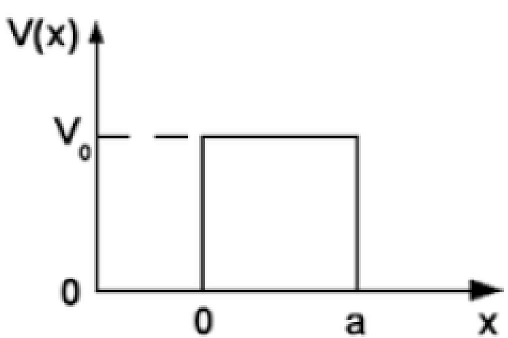
Энергия основного состояния, как и всех других состояний, больше $U_{\min}$. →

$$E_n > U_{\min}\,. \qquad (14.23)$$

В КМ частица не может покоиться на дне потенциальной ямы. Это следует и из соотношения неопределенностей: если бы частица покоилась на дне ямы, у нее были бы определенными и координата, и импульс.




В квантовой механике при финитном движении частица может находиться и в тех областях, где $E < U$. Вероятность нахождения частицы хоть и быстро стремится к нулю вглубь этой области, она всё же отлична от нуля на всех конечных расстояниях.
В этом отношении имеется принципиальное отличие от классической механики, в которой частица не может проникнуть в область, где $U > E$, т.к. кинетическая энергия в этом случае была бы отрицательной. В КМ собственные значения кинетической энергии тоже положительны, однако точное измерение координаты частицы приводит к невозможности точно измерить её импульс и, следовательно, кинетическую энергию.




Если во всем пространстве $U(x,y,z) > 0$ (причем на бесконечности $U \to 0$), то в силу неравенства $E_n > U_{\min}$ имеем $E_n > 0$. При $E > 0$ спектр должен быть непрерывным $\to$ в рассматриваемом случае дискретный спектр вообще отсутствует, т.е. возможно только инфинитное движение частицы.

**Падение на центр.**

Пусть в некоторой точке (возьмем её в качестве начала координат) потенциал $U$ обращается в $-\infty$ по закону

$$U \approx -\alpha/r^s \qquad (\alpha > 0). \qquad (14.24)$$

Рассмотрим ВФ, конечную в некоторой малой области радиусом $r_0$ вокруг начала координат и равную нулю вне её. Неопределенность координаты для такого волнового пакета порядка $r_0$. → Неопределенность в значении импульса будет $\sim \hbar/r_0$. Среднее значение кинетической энергии будет в этом случае $\sim \hbar^2/mr_0^2$, а среднее значение потенциальной энергии $\sim -\alpha/r_0^s$.

Предположим сначала, что $s > 2$. Тогда средняя энергия, приблизительно равная сумме

$$\frac{\hbar^2}{mr_0^2} - \frac{\alpha}{r_0^s},$$

при достаточно малых $r_0$ будет принимать сколь угодно большие по абсолютной величине отрицательные значения. Но, если средняя энергия может принимать такие значения, то это означает, что существуют отрицательные собственные значения энергии, сколь угодно большие по абсолютной величине. Таким уровням энергии соответствует движение частицы в очень малой области вокруг начала координат. Основное состояние будет соответствовать частице, находящейся в самом начале координат. Это будет означать падение частицы в точку $r = 0$.

Если же $s < 2$, то энергия не может принимать сколь угодно больших по абсолютной величине отрицательных значений. Дискретный спектр в этом случае начинается с некоторого конечного отрицательного значения (пример – кулоновский потенциал). Падения частицы на центр в этом случае не происходит. Заметим, что в классической механике падение частицы на центр возможно во всяком поле притяжения (при любом положительном $s$).

**Характер энергетического спектра в зависимости от поведения поля на больших расстояниях.**

Если поле, будучи отрицательным, спадает при больших $r$ по степенному закону

$$U \approx -\alpha/r^s \qquad (\alpha > 0) ,$$

то при $s < 2$ дискретный спектр содержит бесконечное множество уровней, сгущающихся к $E = 0$, а при $s > 2$ общее число уровней конечно (см. [Ландау, Лифшиц, т. 3, §18).