

Глава 2

7. Постулаты квантовой механики

Как и в любом разделе теоретической физики, в квантовой механике имеются исходные утверждения, обобщающие экспериментальные факты-постулаты. Их истинность подтверждается следствиями, которые вытекают из постулатов и проверяются на опыте. Сформулируем постулаты квантовой механики.

1-й постулат. Каждой физической величине можно сопоставить эрмитовый, самосопряженный линейный оператор. (Напомним, что оператором называется символическая запись действий, с помощью которых некоторую функцию можно перевести в другую функцию, но принадлежащую тому же классу функций). Оператор имеет следующее символическое обозначение: \hat{L} , где под символом \hat{L} нужно понимать любой эрмитов оператор. Операцию действия оператора на некоторую функцию и получение при этом функции из того же класса функций записывается с помощью следующего уравнения:

$$\hat{L}\Psi = \lambda\Psi \quad (7.1)$$

где λ называется собственным значением оператора \hat{L} , а функции Ψ и ψ – собственными функциями того же оператора.

2-ой постулат. Особенностью эрмитового оператора является то, что его собственные значения всегда являются вещественными величинами. А это важно, так как физическая величина может быть только вещественной величиной. Именно поэтому в квантовой механике используются только эрмитовы операторы.

3-ий постулат. Пусть состояние частицы или системы частиц описывается функцией Ψ . Пусть некоторой физической величине, определяющей состояние частицы или системы частиц, соответствует эрмитов оператор \hat{L} . Выше мы говорили, что у оператора имеется собственная функция. Но любая функция того же множества тоже является собственной функцией этого оператора. Поэтому можно утверждать, что у оператора

\mathcal{L} имеется полный набор собственных функций (система функций называется полной, если в нее входят все собственные функции данного оператора). Третий постулат утверждает, что функцию Ψ можно представить в виде ряда по собственным функциям оператора \mathcal{L} в следующем виде:

$$\Psi = \sum C_n u_n. \quad (7.2)$$

Коэффициент разложения имеет следующий смысл: квадрат модуля коэффициента $|C_n|^2$ определяет плотность вероятности нахождения системы (частицы) в n -состоянии. Дадим “рецепт” нахождения коэффициентов C_n . Домножим формулу (7.2) на функцию u_m^* , комплексно сопряженную функции u_m :

$$u_m^* \Psi = u_m^* \sum C_n u_n = \sum C_n u_m^* u_n.$$

Проинтегрируем это равенство по всей области задания переменных, от которых зависит функции u_n :

$$\int u_m^* \Psi dt = \int \sum C_n u_m^* u_n dt.$$

В силу независимости действий суммирования и интегрирования, поменяем порядок этих действий справа, и постоянный коэффициент C_n вынесем за знак интеграла:

$$\int u_m^* \Psi dt = \sum C_n \int u_m^* u_n dt.$$

Но функции u_n являются собственными функциями оператора, который соответствует некоторой характеристике рассматриваемой частицы или системы, обладают свойством ортонормированности, его математическая запись такова:

$$\int u_m^* u_n dt = \begin{cases} 0, & \text{если } m \neq n \\ 1, & \text{если } m = n \end{cases}.$$

Таким образом, предыдущее равенство запишется так:

$$C_m = \int u_m^* \Psi dt. \quad (7.3)$$

Замена индекса m на n у коэффициента C законна, так как только при равенстве этих индексов условие ортонормированности дает отличный от нуля вклад.

8. Линейность эрмитовых операторов

Линейность эрмитовых операторов вытекает из принципа суперпозиции, который действует при рассмотрении сложных квантово - механических состояний системы. Этот принцип утверждает: если система может находиться в состоянии, описываемом функцией f и в состоянии, описываемом функцией j , то эта система может находиться и в состоянии, описываемом функцией:

$$\Psi = C_1 f + C_2 j,$$

где: C_1 и C_2 – постоянные коэффициенты.

Оператор \mathcal{E} считается линейным, если выполняется условие

$$\mathcal{E}(C_1 f + C_2 j) = C_1 \mathcal{E}f + C_2 \mathcal{E}j.$$

Самосопряженные, эрмитовые операторы удовлетворяют следующему условию:

$$\int y_1^* \mathcal{A} y_2 dt = \int y_2 \mathcal{A}^* y_1 dt,$$

где \mathcal{A}^* - оператор, комплексно сопряженный оператору \mathcal{A} .

9. Операторы основных физических величин

Часть операторов, сопоставляемых физическим величинам, находят методом подбора. Достоверность найденных операторов подтверждается следствиями, которые получаются при применении этих операторов.

В других случаях используется простая замена физической величины ее оператором.

1. Оператор координаты.

Оператор координаты получается, когда мы над ней поставим символ оператора-значок \hat{x} , то есть символически оператор координаты запишется так: \hat{x} . Примем, что действие оператора \hat{x} состоит в умножении на величину x того, что стоит за этим оператором. Договорились, что над координатой в этом случае значок оператора не ставить.

2. Оператор проекции импульса.

Для нахождения искомого оператора составим операторное уравнение:

$$\hat{P}_x \mathcal{Y} = P_x \mathcal{Y}. \quad (*)$$

при этом мы использовали основное свойство эрмитового оператора - переводить собственную функцию в нее же саму при умножении на некоторый множитель, называемый собственным значением оператора.

Рассмотрим частный случай решения этого уравнения. Пусть функция \mathcal{Y} является волновой функцией де-Бройля, которая описывает движение свободной частицы:

$$\mathcal{Y} = A e^{-i(\omega t - kx)}.$$

Преобразуем показатель степени, используя уравнения де-Бройля:

$$E = \hbar \omega = \hbar \omega \quad \text{и} \quad p_x = \hbar k,$$

тогда волновая функция \mathcal{Y} примет вид:

$$\mathcal{Y} = A e^{\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)}.$$

Операторное уравнение будет выполняться, если для оператора

\hat{P}_x взять выражение $\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Убедимся в этом. Составим левую сторону операторного уравнения (*):

$$\begin{aligned} \mathcal{Y} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{Y} &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left[A \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (Et - p_x x) \right\} \right] = \\ &= -i\hbar A \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - p_x x) \right] \frac{i}{\hbar} p_x = P_x \mathcal{Y}. \end{aligned}$$

Но это и есть правая часть уравнения (*). Мы получили тождественное выражение, предположив, что оператор \hat{P}_x имеет выражение

$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Обобщим полученный результат и будем считать, что этот оператор имеет всегда такой вид, а не только для свободной частицы. Аналогично построим проекции оператора импульса на оси Oy и Oz :

$$\hat{P}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad \hat{P}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

Следовательно, сам оператор импульса запишется так:

$$\hat{P} = i\hat{p}_x + j\hat{p}_y + k\hat{p}_z = -i\hbar\nabla,$$

где символ ∇ — есть векторный оператор набла, принято над ним знак оператора не ставить. Очевидно, что оператор набла имеет следующее представление:

$$\nabla = i\frac{\partial}{\partial x} + j\frac{\partial}{\partial y} + k\frac{\partial}{\partial z}.$$

3. Оператор момента количества движения

Обобщим “опыт” построения операторов физических величин: если физическая величина является функцией координат и импульсов, то, для построения оператора этой величины, нужно в функции этой величины заменить координаты и импульсы (или их проекции) на их квантово-механические операторы (на те, что были “построены” выше). В виде примера построения такого сложного оператора рассмотрим оператор момента количества движения.

В классической механике для момента количества движения вводится следующее выражение:

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r}\mathbf{P}] = \begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ P_x & P_y & P_z \end{vmatrix}.$$

Следуя сформулированному выше правилу, “построим” оператор момента количества движения (оператор импульса):

$$\hat{L} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} & -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} & -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}.$$

Составим коммутатор операторов координаты и соответствующей проекции импульса. Символически коммутатор записывается так:

$$[x\hat{p}_x] = x\hat{p}_x - \hat{p}_x x.$$

Так как оператор должен действовать на некоторую функцию, то придадим предыдущему равенству вид операторного уравнения, умно-

жив обе его стороны на некоторую функцию Ψ справа:

$$[x\hat{p}_x]\Psi = (x\hat{p}_x - \hat{p}_x x)\Psi.$$

Далее составим каждый член справа, используя явный вид оператора проекции импульса:

$$i\hbar\left[x\frac{\partial}{\partial x}\Psi - \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)\right] = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial x}\Psi - x\frac{\partial}{\partial x}\Psi - \Psi\frac{\partial x}{\partial x}\right) = i\hbar\Psi.$$

Сравнивая с левой стороной исходного операторного уравнения, получаем, что коммутатор операторов координаты и соответствующей проекции импульса не равен нулю. А это означает, что соответствующие этим операторам физические величины не могут иметь одновременно точных значений. Мы получили новую формулировку для соотношения неопределенностей Гейзенберга: если коммутатор операторов двух физических величин не равен нулю (операторы не коммутируют), то соответствующие этим операторам физические величины не могут быть измерены в одном опыте одновременно точно, для этих величин можно составить соотношение неопределенностей Гейзенберга.

Легко показать, производя действия, подобные только-что произведенным выше, что коммутатор $[x\hat{p}_y]$ равен нулю. А это означает, что операторы x и \hat{p}_y коммутируют друг с другом. Следовательно, физические величины, которым соответствуют эти операторы, могут быть измерены точно в одном опыте.

4. Оператор Гамильтона

В классической механике важную роль выполняет функция Гамильтона, которая в случае консервативных внешних полей совпадает с полной энергией системы или частицы:

$$H = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + U(x, y, z).$$

Воспользуемся сформулированным выше “рецептом” для составления оператора, соответствующего функции Гамильтона, оператора Гамильтона. Для этого необходимо в выражении функции Гамильтона заменить динамические переменные-координаты и импульсы- их операторами:

$$\hat{H} = \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} + U(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z),$$

где $\Delta = \nabla^2$ и $(-i\hbar)(-i\hbar) = -\hbar^2$.

Для примера составим операторное уравнение для оператора Гамильтона:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi,$$

или, подставляя явный вид оператора Гамильтона, получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + U\Psi = E\Psi.$$

Это уравнение называется координатным уравнением Шредингера. Координатным оно называется потому, что в него не входит зависимость от времени в операторных действиях. Так как в уравнение входит потенциальная функция $U(x, y, z)$, имеющая конкретный вид в каждой задаче, то координатное уравнение Шредингера необходимо решать каждый раз самостоятельно, если изменяется вид потенциальной функции. Поскольку решение уравнения не зависит от времени, это координатное уравнение Шредингера применяется при решении стационарных задач. Соответственно и уравнение называется стационарным уравнением Шредингера.

5. Оператор полной энергии

При рассмотрении нестационарных процессов необходимо решать операторное уравнение, содержащее явную зависимость от времени в самом операторе, входящем в это уравнение. Обозначим общее выражение для этого оператора так: \hat{E} . Так как буквой E мы обозначаем энергию системы или частицы, то оператор \hat{E} будем называть оператором энергии, точнее оператором полной энергии.

Символическая запись операторного уравнения с оператором полной энергии такова:

$$\hat{E}\Psi = E\Psi.$$

Для нахождения явного вида оператора полной энергии применим тот же метод, что и при нахождении явного вида оператора проекции импульса (см. п.2). В качестве пробной функции Ψ возьмем волновую функцию де-Бройля:

$$\Psi(x, t) = Ae^{-(wt - kx)}.$$

Для упрощения решения задачи мы рассматриваем одномерный случай (т.е. явно входит лишь одна координата x). Легко убедиться прямой подстановкой, что операторное уравнение превращается в тождество, если в качестве оператора полной энергии взять оператор вида

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

Сравним уравнения для оператора Гамильтона и для оператора полной энергии:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi = E\Psi \quad \text{и} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = E\Psi. \quad (9.5.1)$$

Справа стоят собственные значения операторов Гамильтона и полной энергии (умноженные на волновую функцию). Но в классической механике функция Гамильтона рассматривается как полная энергия системы (или частицы). Поскольку правые стороны рассматриваемых уравнений совпадают, то равны и левые стороны этих уравнений. И можно написать следующее операторное уравнение:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi. \quad (9.5.2)$$

Это уравнение называется полным уравнением Шредингера, так как в нем рассматриваются действия операторов, один из которых действует на временную, другой на координатную зависимость волновой функции.

Обратим внимание, что мы не вывели, а “построили” уравнение Шредингера, подобно тому как не выводятся, а “строятся” уравнения Максвелла в теории электромагнетизма, или формула 2-го закона Ньютона в механике.

Итак, мы получили три уравнения Шредингера. Для определенности будем называть первое из уравнений координатным уравнением Шредингера, второе из уравнений (9.5.1) - временным, а уравнение (9.5.2) - полным уравнением Шредингера.

10. Решение полного уравнения Шредингера

Будем находить решение уравнения (9.5.2), учитывая, что обе стороны его рассматриваются как действия по разным переменным. А поэтому возьмем волновую функцию в виде произведения координатной функции $j(x, y, z)$ и функции $f(t)$, зависящей от времени:

$$\Psi(x, y, z, t) = f(t)j(x, y, z). \quad (10.1)$$

Используя функцию (10.1), составим по отдельности левую и правую стороны уравнения (9.5.2):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t)j(x, y, z) = i\hbar j(x, y, z) \frac{\partial}{\partial t} f(t); \quad (10.2)$$

и

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta[f(t)\phi(x, y, z)] + U(x, y, z)f(t)\phi(x, y, z) = \\ & -\frac{\hbar^2}{2m} f(t)\Delta j(x, y, z) + U(x, y, z)f(t)j(x, y, z) \end{aligned} \quad (10.3).$$

Приравняем выражения (10.2) и (10.3), и, разделив обе стороны уравнения на $\Psi = f(t)j(x, y, z)$, получим:

$$\frac{i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t}}{f(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta j(x, y, z)}{j(x, y, z)} + U(x, y, z). \quad (10.4)$$

В равенстве (10.4) левая сторона является функцией времени, правая же - функцией координат. Это равенство должно выполняться в любой точке и в любой момент времени. Но это возможно лишь в том случае, если обе стороны равны постоянной величине. Обозначим её буквой E и выясним физический смысл этой величины. Для этого воспользуемся методом размерностей. Одним из правил этого метода является утверждение, что складывать (вычитать) и приравнивать можно только однородные величины. Но справа в формуле (10.4) одно из слагаемых - это потенциальная энергия. Следовательно, и все остальные члены в формуле (10.4) имеют смысл энергии. А потому и величина E является энергией. И поскольку она составляется из двух частей, одна из которых связана с кинетической энергией, а вторая - с потенциальной, то величина E является

полной (механической) энергией квантово-механической системы (или частицы), состояние которой определяется волновой функцией $\Psi(x, y, z, t)$. Таким образом, уравнение (10.4) распадается на два дифференциальных уравнения:

$$\frac{i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t}}{f(t)} = E \quad (10.5)$$

и

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta j(x, y, z) + U(x, y, z) = E j(x, y, z). \quad (10.6)$$

Уравнение (10.5) решается методом разделения переменных:

$$\frac{\partial f(t)}{f(t)} = -\frac{i}{\hbar} E \partial t. \quad (10.7)$$

Так как в этом уравнении функция является функцией лишь одной переменной, то символ дифференцирования ∂ можно заменить на символ d . Интегрирование этого выражения дает следующую функцию:

$$f(t) = C e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (10.8)$$

Особенностью решения уравнения (10.5) - функция (10.8)- является то, что оно сохраняет свой смысл для любой квантово-механической задачи, так как не зависит от вида потенциальной энергии. Рассмотрим уравнение (10.6), преобразуем его, умножив обе стороны на функцию $j(x, y, z)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta j(x, y, z) + Uj(x, y, z) = Ej(x, y, z).$$

Но это уравнение нам уже встречалось, когда мы составляли операторное уравнение для оператора Гамильтона. Это уравнение мы назвали координатным уравнением Шредингера и отмечали, что его необходимо решать каждый раз, если задается новая потенциальная функция $U(x, y, z)$. Ниже мы решим несколько квантово-механических задач, задавая каждый раз явный вид потенциальной функции.

11. Закон причинности в квантовой механике

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

В силу однородности хода времени любой момент времени можно принять за начальный, нулевой момент времени, и тем самым определить волновую функцию в этот момент времени. Это и будет начальным условием задачи, которое необходимо при решении дифференциальных уравнений. Знание волновой функции в нулевой момент времени позволяет определить вероятность данного состояния системы. Составляя квадрат модуля волновой функции в нулевой момент времени, мы определяем плотность вероятности нахождения системы в исходном состоянии:

$$|\Psi|^2 = |f(t)|^2 |j|^2 = |j|^2. \quad (11.1)$$

В отличие от классической физики, в квантовой механике нельзя говорить об абсолютном, достоверном, однозначном знании состояния квантово-механической системы. Из-за корпускулярно-волнового дуализма свойств частиц системы можно говорить лишь о вероятностном состоянии системы. Но вероятностное толкование выводов квантовой механики не устраняет объективности этих выводов, не устраняет действия закона причинности. Он лишь приобретает новый, вероятностный характер. Знание волновой функции в нулевой момент времени позволяет определить ее в любой последующий момент времени. Тем самым мы имеем возможность установить вероятность нахождения системы в новом состоянии.

Таким образом, уравнение Шредингера позволяет связать исходное состояние квантово-механической системы в нулевой момент времени с состоянием системы в момент времени t . И то, что эти состояния связаны вероятностными законами, не уменьшает их реальности, достоверности.

И в квантовой механике закон причинности не отменяется, а в силу квантово-механических свойств частиц и систем частиц имеет новое, вероятностное проявление.

12. Дифференцирование операторов по времени

Воспользуемся ранее полученной формулой для расчета среднего значения любой физической величины, определяющей состояние квантово-механической системы:

$$\bar{L} = \int \Psi^* \dot{L} \Psi dt. \quad (12.1)$$

где интегрирование проводится по координатам.

Так как волновая функция является функцией от времени, то следует ожидать, что и среднее значение физической величины будет изменяться во времени. А так как среднее значение величины определяется её оператором, то и оператор может изменяться во времени. Перед нами возникает задача определения действий, дающих нам производную по времени от оператора. Поступим следующим образом. Возьмем от выражения (12.1) полную производную по времени:

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{d}{dt} \int \Psi^* \dot{L} \Psi dt = \int \left\{ \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \dot{L} \Psi + \Psi^* \dot{L} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi^* \frac{\partial \dot{L}}{\partial t} \Psi \right\} dt. \quad (12.2)$$

При составлении этого выражения очень важно соблюдать порядок множителей, помня, что оператор действует на функцию, которая стоит после него. Так как подынтегральная функция состоит из трех множителей, то мы получили в фигурных скобках три слагаемых. Производя дифференцирование, мы поменяли порядок действий, внося взятие производной по времени под знак интеграла, так как интегрирование производится по координатам.

Для дальнейшего преобразования выражения (12.2) воспользуемся полным уравнением Шредингера, однако не раскрывая явный вид оператора Гамильтона:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad \text{и} \quad -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \hat{H} \Psi^*. \quad (12.3)$$

Второе уравнение в (12.3) - это уравнение, комплексно сопряженное исходному уравнению Шредингера. Обратим внимание на то, что оператор Гамильтона входит без символа комплексного сопряжения. В дальнейшем нам не раз придется воспользоваться тем, что в силу вещественности оператора Гамильтона

$$\dot{H} = \dot{H}^* \quad (12.4)$$

Чтобы убедиться в этом, достаточно восстановить вид оператора Гамильтона:

$$\hat{H} = -\frac{\mathbf{h}^2}{2m} \Delta + U. \quad (12.5)$$

Все члены в операторе Гамильтона – вещественные величины.

Воспользуемся уравнениями (12.3) и выразим из них нужные нам производные:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\mathbf{h}} \hat{H} \Psi \quad \text{и} \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\mathbf{h}} \hat{H} \Psi^*. \quad (12.6)$$

Продолжим преобразование выражения (12.2):

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{L}}{dt} &= \int \left\{ \frac{i}{\mathbf{h}} \hat{H} \Psi^* \hat{L} \Psi + \Psi^* \hat{L} \left(-\frac{i}{\mathbf{h}} \hat{H} \Psi \right) + \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi \right\} dt = \\ &= \int \left\{ \frac{i}{\mathbf{h}} (\hat{H} \Psi^* \hat{L} \Psi - \Psi^* \hat{L} \hat{H} \Psi) + \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi \right\} dt \end{aligned}$$

Преобразуем первое слагаемое в круглых скобках: $\hat{H} \Psi^* \hat{L} \Psi$.

Рассмотрим внимательно это выражение. По сути дела оно состоит из двух множителей, которые получаются в результате действия двух операторов на функции, которые стоят непосредственно после них. Эти два множителя независимы друг от друга, поэтому их можно поменять местами:

$$\hat{L} \Psi \hat{H} \Psi^*.$$

Составим интеграл с этим подынтегральным выражением:

$$\int \hat{L} \Psi \hat{H} \Psi^* dt = \int \Psi^* \hat{H} \hat{L} \Psi dt.$$

При этом мы воспользовались условием самосопряженности эрмитового оператора \hat{H} :

$$\int u_1^* \hat{H} u_2 dt = \int u_2 \hat{H} u_1^* dt, \quad (12.7)$$

причем в качестве функции u_1^* выступала функция Ψ^* , а функции

$u_2 = \hat{L} \Psi$ и учли вещественность оператора $\hat{H} = \hat{H}^*$.

Продолжим составление $\frac{d\bar{L}}{dt}$:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{L}}{dt} &= \int \left\{ \frac{i}{\mathbf{h}} (\Psi^* \hat{H} L \Psi - \Psi^* L \hat{H} \Psi) + \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi \right\} dt = \\ &= \int \Psi^* \left\{ \frac{i}{\mathbf{h}} (\hat{H} L - L \hat{H}) + \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \right\} \Psi dt. \end{aligned}$$

Сравним полученное выражение с формулой для расчета среднего значения любой физической величины:

$$\bar{L} = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dt. \quad (12.8)$$

Можно утверждать, что роль полной производной от оператора по времени выполняет величина, стоящая в фигурных скобках:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\mathbf{h}} (\hat{H} \hat{L} - \hat{L} \hat{H}). \quad (12.9)$$

Второй член в этом выражении носит название квантовой скобки Пуассона. Обратим внимание на то, что квантовую скобку Пуассона можно рассматривать в виде произведения коммутатора $\hat{H} \hat{L} - \hat{L} \hat{H} = [\hat{H} \hat{L}]$ на множитель $\frac{i}{\mathbf{h}}$.

13. Интегралы движения

Как в классической, так и в квантовой механике существуют интегралы движения, т.е. величины, которые не изменяют своего значения во времени. Получим критерии, которым должны подчиняться квантовые интегралы движения. Для этого воспользуемся формулой (12.9). Пусть оператор некоторой физической величины \hat{L} не зависит явно от времени.

Тогда $\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = 0$ и формула (12.9) принимает вид:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{i}{\mathbf{h}} (\hat{H} \hat{L} - \hat{L} \hat{H}). \quad (13.1)$$

Особый интерес представляет случай, когда оператор \hat{L} коммутиру-

ет с оператором Гамильтона \hat{H} . Тогда выражение (13.1) принимает вид:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = 0. \quad (13.2)$$

Если воспользоваться формулой для расчета среднего значения любой физической величины:

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \int \Psi^* \frac{d\hat{L}}{dt} \Psi dt \quad (13.3)$$

и подставить (13.2), то тотчас же получаем, что $\frac{d\bar{L}}{dt} = 0$. Откуда следует, что величина $\bar{L} = Const$ и согласно определению является интегралом движения.

Теперь мы можем сформулировать условия, удовлетворяя которым физическая величина является интегралом движения: **1.** частная производная по времени от оператора этой величины равна нулю, т.е. оператор явно от времени не зависит; **2.** оператор искомой величины должен коммутировать с оператором Гамильтона. Проще всего проиллюстрировать установленные критерии на операторе полной энергии системы, находящейся в стационарном состоянии. В этом случае, действительно, оператор \hat{H} явно не зависит от времени и коммутатор $[\hat{H}\hat{H}] = 0$. Полная энергия системы в стационарном состоянии является интегралом движения.

14. Уравнения Эрнфеста

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

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

Составим уравнение (12.9) для оператора координаты x и затем для оператора проекции импульса на ту же ось, причем, будем считать, что эти операторы явно от времени не зависят:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}x - x\hat{H})$$

и

$$\frac{dp_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}p_x - p_x\hat{H}). \quad (14.1)$$

Формулы (14.1) носят название квантовых уравнений движения. Займемся раскрытием коммутаторов.

$$(\hat{H}x - x\hat{H}) = \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) x - x \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \right],$$

где оператор Лапласа имеет обычный вид

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

кроме того, опущен знак оператора над координатой.

Если произвести все действия, указанные в квадратных скобках, то после сокращения подобных членов, получим, что

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

Составим первое уравнение Эрнфеста:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{1}{m} \hat{p}. \quad (14.2)$$

Составим выражение для среднего значения производной от координаты:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \int \Psi^* \frac{dx}{dt} \Psi dt = \int \Psi^* \frac{1}{m} \hat{p}_x \Psi dt = \frac{1}{m} \bar{p}_x = \bar{v}_x. \quad (14.3)$$

Выражение $\frac{dx}{dt} = v_x$ в классической механике выполняется строго в любой момент времени. В квантовой же механике соотношение (14.3) выполняется лишь для средних величин. Это есть проявление корпускулярно-волнового дуализма, невозможность одновременно задать точное положение (координату x) частицы и соответствующую проекцию ее импульса, которые удовлетворяют соотношению неопределенностей Гейзенберга $\Delta x \Delta p_x = h$. Можно сделать следующий вывод: классическое уравнение $\frac{dx}{dt} = v_x$, которое в классической механике выполняется строго в любой момент времени, в квантовой механике справедливо только для усредненных величин:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{\bar{p}_x}{m}. \quad (14.4)$$

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

Рассмотрим второе квантово-механическое уравнение движения:

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

Все слагаемые в операторе Лапласа коммутируют с оператором $\frac{\partial}{\partial x}$, поэтому, после сокращения подобных членов, уравнение принимает вид:

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

Итак,

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x} = \hat{F}_x, \quad (14.5)$$

где использована установленная в классической механике связь между $\frac{\partial U}{\partial x}$ и F_x , а затем применено правило сопоставления классической функции эрмитового оператора.

Далее воспользуемся формулой для среднего значения физической величины, в качестве которой возьмем $\frac{d\hat{p}_x}{dt}$:

$$\frac{d\bar{p}_x}{dt} = \int \Psi^* \frac{d\hat{p}_x}{dt} \Psi dt = \int \Psi^* \hat{F}_x \Psi dt = \bar{F}_x.$$

или

$$\frac{d\bar{p}_x}{dt} = \bar{F}_x. \quad (14.6)$$

Мы получили уравнение (14.6), которое в квантовой механике называют 2-м уравнением Эрнфеста. В классической механике это уравнение является точным и выражает 2-ой закон Ньютона в импульсной форме. В квантовой же механике это уравнение справедливо только для усредненных величин. И все, что сказано при анализе 1-го уравнения Эрнфеста о связи с принципом соответствия, остается справедливым и в отношении уравнения (14.6).

15. Связь законов сохранения с симметрией пространства и времени

1. Закон сохранения и превращения энергии

Опытным путем установлено, что время течет равномерно в отсутствии гравитационного поля. Это означает, что любой момент времени

можно принять за начало отсчета времени. Такое свойство времени называют его однородностью.

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

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

где \hat{H} - оператор Гамильтона.

Составим формулу (12.9) для полной производной по времени от оператора Гамильтона:

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

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

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

так как $\frac{d\hat{H}}{dt} = 0$. Но полученный результат, что $\frac{d\bar{E}}{dt} = 0$, и означает сохранение энергии в замкнутой системе.

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

2. Закон сохранения количества движения

Покажем, что закон сохранения количества движения следует из однородности пространства. Пусть состояние частицы (системы) задается волновой функцией $\Psi(r)$, за некоторый промежуток времени частица переместится на некоторое расстояние dr и её состояние определится новой функцией $\Psi(r + dr)$. Считая перемещение dr малой величиной по

сравнению с r , произведем разложение волновой функции в ряд Тейлора, учтем лишь первые два члена разложения:

$$\Psi(r + dr) = \Psi(r) + dr \frac{\partial \Psi(r)}{\partial r} + \dots$$

Продолжим преобразование и вынесем волновую функцию Ψ вправо:

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

Рассматривая это равенство как операторное уравнение, можно выражение, стоящее в скобках, считать оператором, который, действуя на функцию $\Psi(r)$ преобразует ее в функцию $\Psi(r + dr)$.

Назовем оператор $\left(1 + dr \frac{\partial}{\partial r} \right)$ оператором переноса или трансляции и обозначим его символом

$$\hat{T} = \left(1 + dr \frac{\partial}{\partial r} \right). \quad (15.1)$$

Составим коммутатор двух операторов, оператора Гамильтона и оператора трансляции:

$$\begin{aligned} [\hat{H}\hat{T}] &= \hat{H}\hat{T} - \hat{T}\hat{H} = \\ &= \left(-\frac{\mathbf{h}^2}{2m} \Delta + U \right) \left(1 + dr \frac{\partial}{\partial r} \right) - \left(1 + dr \frac{\partial}{\partial r} \right) \left(-\frac{\mathbf{h}^2}{2m} \Delta + U \right) \end{aligned}$$

Упростим задачу. Предположим, что внешнее поле отсутствует, т.е. $U = 0$. А тогда в коммутаторе остаются лишь дифференциальные операторы, которые переставимы и коммутатор оказывается тождественно равным нулю. А это означает, что операторы \hat{H} и \hat{T} коммутируют. Чтобы выяснить смысл полученного результата, преобразуем оператор трансляции \hat{T} , выразив его через оператор импульса \hat{p} . Оператор \hat{T} содержит два члена, но первое — просто число, следовательно, действие оператора трансляции связано с действием второго члена $dr \frac{\partial}{\partial r}$. Множитель dr

является постоянной величиной, поэтому активной частью оператора трансляции является оператор дифференцирования $\frac{\partial}{\partial r}$, который легко связать с оператором импульса $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$, откуда $\frac{\partial}{\partial r} = \frac{i}{\hbar} \hat{p}$. Таким образом, с точки зрения операторного действия операторы импульса и трансляции с точностью до постоянных множителей эквивалентны друг другу. Поэтому, справедливо следующее равенство:

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

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

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

$$\bar{p} = Const.$$

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

3. Закон сохранения момента количества движения

Установим связь закона сохранения момента количества движения с изотропией пространства.

Изотропия пространства (равноправие всех направлений) проявляется в инвариантности свойств замкнутых систем относительно произвольных поворотов. Такая инвариантность имеет место для систем, находящихся в центрально-симметричном поле, если поворот осуществляется относительно центра поля.

Определим оператор бесконечно малого поворота. Будем обозначать бесконечно малый поворот на угол dj вектором $d\hat{j}$, направлен-

ным вдоль оси вращения и по абсолютной величине равным углу поворота. Изменение радиуса – вектора $\dot{\mathbf{r}}$ при таком повороте определяется выражением:

$$\dot{\mathbf{r}} \rightarrow \dot{\mathbf{r}} + [d\mathbf{j} \cdot \dot{\mathbf{r}}].$$

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

$$\Psi\{\dot{\mathbf{r}} - [d\mathbf{j} \cdot \dot{\mathbf{r}}]\} = \{1 - d\mathbf{j}[\dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla]\}\Psi(\dot{\mathbf{r}}),$$

Как и в случае установления вида оператора трансляции видим, что в качестве оператора поворота на бесконечно малый угол $d\mathbf{j}$ можно взять оператор

$$\hat{K}_{d\mathbf{j}} = 1 - d\mathbf{j}[\dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla]. \quad (15.2)$$

Сравним (15.2) с оператором момента количества движения:

$$\hat{M} = -i\hbar[\dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla]. \quad (15.3)$$

Следовательно, оператор бесконечно малого поворота на угол $d\mathbf{j}$ связан с оператором момента количества движения следующим образом:

$$\hat{K}_{d\mathbf{j}} = \left(1 - \frac{i}{\hbar} d\mathbf{j} \cdot \hat{M} \right) \quad (15.4)$$

Инвариантность оператора Гамильтона относительно произвольных бесконечно малых поворотов определяется его коммутацией с оператором $\hat{K}_{d\mathbf{j}}$ или с проекцией оператора углового момента на произвольное направление оси вращения

$$\hat{n} \hat{M} \hat{n} = \hat{H} \hat{n} \hat{M},$$

где \hat{n} – единичный вектор оси вращения. Из этого равенства следует, что в свободном пространстве, а так же в любом центрально-симметричном поле интегралом движения является проекция момента на произвольное направление. Если внешнее поле имеет аксиальную симметрию, то оператор Гамильтона инвариантен лишь по отношению к вращению вокруг аксиальной оси симметрии и сохраняется только проекция углового момента на это направление.

Из операторов бесконечно малых поворотов вокруг некоторой оси, определяемой единичным вектором \hat{n} , можно составить оператор поворота вокруг той же оси на любой конечный угол.

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

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

4. Преобразование инверсии

Рассмотрим одно из дискретных преобразований, относительно которого оператор Гамильтона остается инвариантным. Это так называемое преобразование инверсии. Пространственная инверсия состоит в одновременной замене знака у всех пространственных координат частиц:

$$\begin{aligned} x &\rightarrow (-x); \\ y &\rightarrow (-y); \\ z &\rightarrow (-z). \end{aligned} \tag{15.5}$$

Очевидно, что при таком преобразовании правая система координат переходит в левую систему координат. Оператор Гамильтона любой замкнутой системы, в которой действуют ядерные или электромагнитные силы, инвариантен по отношению к преобразованию инверсии. Эта инвариантность сохраняется и для систем, находящихся в центрально-симметричном внешнем поле при условии, что центр инверсии совпадает с центром поля.

Обозначим оператор инверсии через \hat{P} , тогда симметрия между левым и правым математически выражается коммутацией операторов \hat{P} и \hat{H} :

$$\hat{H}\hat{P} = \hat{P}\hat{H}.$$

По определению оператора инверсии

$$\hat{P}\Psi\left(\vec{r}\right) = \Psi\left(-\vec{r}\right).$$

Определим собственные значения оператора инверсии, решая операторное уравнение:

$$\hat{P}\Psi(\vec{r}) = P\Psi(-\vec{r}).$$

Применим к обеим сторонам этого уравнения операцию инверсии. Учтем при этом, что двухкратное применение операции инверсии сводится к тождественному преобразованию. Тогда мы получим слева исходную функцию $\Psi(\vec{r})$, а справа - $P^2\Psi(\vec{r})$. Приравнявая эти выражения, получаем

$$\Psi(\vec{r}) = P^2\Psi(\vec{r}),$$

откуда

$$P^2 = 1$$

и, следовательно,

$$P = \pm 1. \quad (15.6)$$

Значение $P = 1$ соответствует операторному равенству $\hat{P}\Psi_+ = \Psi_+$. Функция Ψ_+ определяет так называемое четное состояние квантовой частицы (системы), а значение $P = -1$ соответствует операторному равенству $P\Psi_- = -\Psi_-$ и функция Ψ_- определяет нечетное состояние частицы (системы).

Благодаря коммутации оператора инверсии с оператором Гамильтона мы устанавливаем новый закон сохранения - закон сохранения четности. Четность состояния является интегралом движения. Однако в 1956 году три физика Ли, Янг и Ву установили, что при слабых взаимодействиях (они наблюдали распад К-мезонов) закон сохранения четности не выполняется. Академик Л. Ландау ввел комбинированный закон сохранения четности: к пространственной инверсии необходимо добавить изменение знака заряда (т.е. частицу заменить античастицей). В 70-х гг. XX в. был постулирован усложненный закон сохранения, так называемый закон сохранения РСТ. Для выполнения этого закона необходимо не только изменить знак у координат, заменить частицу на античастицу, но и заменить T на $(-T)$, где T -это временная координата, относительно которой уравнение Шредингера не обладает симметрией (в уравнении Шредингера производная по времени – первого порядка и соответствующий член изменяет свой знак при изменении направлении хода времени).

5. Закон сохранения числа частиц, заряда и массы в нерелятивистской квантовой механике

Уравнение Шредингера, подобно уравнениям Максвелла в электродинамике, практически содержит все основное содержание нерелятивистской квантовой механики. Покажем, что это действительно так. Установим упомянутые в заголовке параграфа законы, используя уравнение Шредингера.

Нам потребуется полное уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi. \quad (15.7)$$

Составим уравнение, комплексно сопряженное уравнению (15.7):

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = H^* \Psi^* = H\Psi^*, \quad (15.8)$$

где учтена вещественность оператора Гамильтона.

Умножим уравнение (15.7) на Ψ^* , а уравнение (15.8) - на Ψ и вычтем из первого результата второй:

$$i\hbar \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hbar \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \Psi^* H\Psi - \Psi H\Psi^*. \quad (15.9)$$

Очевидно, что левую сторону уравнения (15.9) можно записать так:

$$i\hbar \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hbar \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2.$$

Запишем правую сторону уравнения (15.9) подробно, подставив оператор Гамильтона в явном виде:

$$\begin{aligned} \Psi^* H\Psi - \Psi H\Psi^* &= \Psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi \right] - \Psi \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* + U\Psi^* \right] = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*] \end{aligned}$$

где произведено сокращение подобных членов с разными знаками.

Объединим обе стороны преобразуемого равенства, разделив их предварительно на множитель $(i\hbar)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} [\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*] = -\frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div} [\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi],$$

где использована формула векторного анализа и изменен порядок слагае-

мых в скобках.

Введем обозначение:

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} [\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi] . \quad (15.10)$$

Тогда предыдущее равенство запишется так:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = - \operatorname{div} \mathbf{j} . \quad (15.11)$$

Ранее было установлено, что величина $|\Psi|^2$ имеет смысл плотности вероятности. Обозначим эту величину буквой \mathbf{r} , тогда формула (15.11) запишется так:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{r} = - \operatorname{div} \mathbf{j} . \quad (15.12)$$

Уравнение (15.12) тождественно совпадает с математической записью закона сохранения электрического заряда, установленного в классической электродинамике. Поэтому логично и эту формулу толковать как математическое выражение закона сохранения числа частиц в нерелятивистской квантовой механике. Действительно, величина $|\Psi|^2$ определяет плотность вероятности обнаружения частиц в данный момент времени в окрестности некоторой точки, тогда вектор \mathbf{j} следует толковать как вектор потока плотности вероятности. И уравнение (15.12) действительно принимает смысл закона сохранения числа частиц. Однако, в отличие от абсолютного закона сохранения электрического заряда в электродинамике, закон сохранения числа частиц в квантовой механике имеет вероятностный характер, что является следствием корпускулярно-волновых свойств элементарных частиц.

Если величины $|\Psi|^2$ и \mathbf{r} умножить на величину электрического заряда e элементарной частицы и подставить соответствующие величины в формулу (15.12), то мы получим закон сохранения электрического заряда в квантовой механике. Теперь этот закон будет иметь вероятностный характер. Умножая же уравнение (15.12) на массу частицы m , то тотчас же получаем вероятностный закон сохранения массы в квантовой механике.

6. Принцип соответствия в квантовой механике

В 1926 году Н. Бор сформулировал новый физический принцип – принцип соответствия: каждая более общая физическая теория должна включать в себя как предельный случай предшествующую теорию. Благодаря принципу соответствия устанавливаются границы применимости предшествующей теории. Несмотря на то, что принцип был сформулирован лишь в 1926 году, но оказалось, что созданные ранее физические теории удовлетворяют ему. Например, электродинамика Максвелла для статических и стационарных процессов давала те же результаты, что и электродинамика Кулона-Ампера-Вебера, основанная на идее дальнего действия. Аналогично, специальная теория относительности (СТО) включает в себя в качестве предельного случая классическую механику. Критерием применимости классических представлений является выполнимость соотноше-

ния $\frac{v}{c} \ll 1$. Однако, нужно иметь в виду, что и при этих условиях справед-

лива СТО, только её поправками к классическим результатам в отдельных случаях можно пренебречь. Например, для покоящегося тела, когда, казалось бы, можно пользоваться классической механикой, СТО дает принципиально новый результат $E_0 = mc^2$, которого просто нет в классической физике.

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

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

Действительно, такой “простой” прием перехода от формул квантовой механики к формулам классической физики невозможно осуществить применительно к основному уравнению квантовой механики - к уравне-

нию Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi$$

Если следовать установленному рецепту для выполнения принципа соответствия, то исчезают два члена в этом уравнении и оставшееся равенство не имеет разумного физического смысла:

$$U\Psi = 0.$$

К такому же результату мы придем, если рассмотрим лишь частный вид уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = E\Psi.$$

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

Покажем это на примере полного уравнения Шредингера:

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

Воспользуемся следующим представлением волновой функции:

$$\Psi = A \exp \frac{i}{\hbar} S,$$

где функция S имеет размерность Дж·с (как и постоянная Планка) и называется функцией действия, она зависит от тех же переменных, что и сама функция Ψ .

Для упрощения задачи будем рассматривать одномерный случай. Составим все члены уравнения Шредингера:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi = \frac{\partial}{\partial t} A e^{\frac{i}{\hbar} S(x,t)} = A e^{\frac{i}{\hbar} S} \cdot \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} S;$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi = \frac{\partial}{\partial x} A e^{\frac{i}{\hbar} S} = A e^{\frac{i}{\hbar} S} \cdot \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x} S;$$

Далее составим вторую производную по координате:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(A e^{\frac{i}{\hbar} S} \cdot \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x} \right) = A \frac{i}{\hbar} \left[e^{\frac{i}{\hbar} S} \cdot \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x} \cdot \frac{\partial S}{\partial x} + e^{\frac{i}{\hbar} S} \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] = \\ &= -A \frac{1}{\hbar^2} e^{\frac{i}{\hbar} S} \cdot \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + A \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} S} \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial x^2}. \end{aligned}$$

Составим уравнение Шредингера, приведем подобные члены и сократим на общий множитель, получаем:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + U. \quad (15.13)$$

Сейчас мы имеем возможность совершить предельный переход, устремив $\hbar \rightarrow 0$:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial S}{\partial t} + U = 0. \quad (15.14)$$

Мы получили чисто классическое уравнение, в классической механике оно является уравнением движения и носит имя уравнения Гамильтона-Якоби. В отдельных случаях оно упрощается. Например, если задача стационарна, то второго слагаемого не будет. В случае, когда скорость изменения градиента функции действия $\frac{\partial S}{\partial x}$ значительно меньше величин

ны $\frac{\partial S}{\partial t}$, можно пренебречь первым слагаемым в (15.14).

Проанализируем, в каких случаях мы имели право отбросить в (15.13)

член $\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2}$. Формально этот член получается из того слагаемого в уравнении Шредингера, который соответствует кинетической энергии. Но при этом мы оставляем в уравнении (15.14)

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 = \frac{1}{2m} (\text{grad}_x S)^2,$$

который также связан с кинетической энергией. Следовательно, наши действия будут оправданы, если в одномерном случае

$$\hbar \left| \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right| \ll \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2.$$

Но $\frac{\partial S}{\partial x} = p_x$, поэтому $\hbar \left| \frac{\partial p}{\partial x} \right| \ll p^2$.

Учтем, что

$$p = \sqrt{2m(E - U)},$$

тогда

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{m}{p} \left| \frac{\partial U}{\partial x} \right|.$$

Таким образом, условие квазиклассичности (когда можно пренебречь квантовыми эффектами) принимает вид:

$$\hbar m \left| \frac{\partial U}{\partial x} \right| \ll p^3,$$

т.е. наши действия оправданы для быстрых частиц с малым градиентом поля.

Итак, для перехода от формул квантовой механики к формулам классической механики необходимо или непосредственно, или после некоторых преобразований устремить постоянную Планка к нулю. Физическим смыслом этого действия является пренебрежение дискретным изменением физических характеристик в классической физике. Ранее, выводя уравнения Эрнфеста, мы установили, что формулы классической механики в квантовой механике выполняются только для средних величин. Причем, усреднение физических характеристик должно быть произведено по формулам квантовой механики. Эти же формулы учитывают корпускулярно-волновой дуализм элементарных частиц. Поэтому мы можем сформулировать еще один критерий перехода от квантовой механики к классической: классическая механика справедлива тогда, когда можно пренебречь корпускулярно-волновым дуализмом элементарных частиц.