ГЛАВА 7

ВОЛНОВАЯ МЕХАНИКА ШРЕДИНГЕРА

Нерелятивистское волновое уравнение Шредингера

1. Обратимся теперь к рассмотрению феноменологической теории, сыгравшей крайне важную роль в развитии квантовой физики. Основой этой теории является уравнение Шредингера; ее впервые сформулировал Эрвин Шредингер в 1926 г. *), вскоре после того, как Гейзенберг открыл матричную механику. Обе эти теории были первыми количественными формулировками основных принципов квантовой механики.

В этой книге мы обращаемся к теории Шредингера, чтобы дать читателю некоторое представление о том, как работает волновая теория, т. е. как с ее помощью выполняются расчеты реальных явлений. Мы выбрали нерелятивистскую теорию Шредингера в качестве примера волновой теории, ибо она во многих отношениях особенно проста.

2. Теория уравнения Шредингера, понимаемая в несколько ограниченном, как будет показано ниже, смысле, основана на нескольких сильных допущениях, из которых мы отметим главные:

1) Частицы не рождаются и не исчезают: в любом физическом процессе число частиц данного типа остается постоянным.

2) Скорость частиц достаточно мала; лишь в этом случае возможно нерелятивистское приближение.

Мы считаем перечисленные допущения сильными, так как, во-первых, из опыта известно, что процессы рождения и аннигиляции частиц действительно происходят, а во-вторых, любая фундаментальная теория *должна* принимать во внимание принципы специальной теории относительности.

Указанные допущения нельзя считать независимыми. Рассмотрим, например, столкновение двух одинаковых частиц, и пусть в системе центра масс их скорости очень близки к скорости света. При этом кинетическая энергия частиц достаточно велика для образования новых частиц. С другой стороны, если скорости малы, то мала и кинетическая энергия, и процессы рождения частиц невозможны — они запрещены законом сохранения энергии. Это утверждение нуждается в одной оговорке. Поскольку масса фотона равна нулю, то фотон может возникнуть или исчезнуть (т. е. свет может быть испущен или поглощен) даже в том случае, если

*) *Schrödinger E.* Quantisierung als Eigenwertproblem.— Ann. d. Phys., 1926, v. 79, p. 361; v. 79, p. 489; v. 80, p. 437; v. 81, p. 109.

остальные частицы, имеющие массу покоя, движутся с нерелятивистскими скоростями. Таким образом, теория Шредингера, понимаемая в более широком смысле, должна описывать поглощение и испускание света, и высказанные выше допущения следует уточнить:

1*) Рождение или исчезновение частиц, *имеющих массу покоя*, не происходит, но испускание и поглощение фотонов возможно.

2*) *Все* частицы, *имеющие массу покоя*, движутся с малыми скоростями, и их можно описывать нерелятивистским образом. Фотоны, являющиеся релятивистскими объектами, требуют специального описания.

Следует заметить, что существуют теории, основанные на «релятивистских» волновых уравнениях, в которых второе допущение снято. Примером может служить знаменитое уравнение Дирака. Имеется также «релятивистский» вариант уравнения Шредингера. Мы не станем рассматривать здесь эти уравнения; говоря об уравнении Шредингера, мы имеем в виду нерелятивистское уравнение, основанное на приведенных выше допущениях.

3. В п. 1 этой главы мы назвали теорию Шредингера *феноменологической*. Она не претендует на звание фундаментальной теории. Выше были перечислены некоторые причины такого положения, и мы хотим, чтобы читатель их ясно понял. Теория уравнения Шредингера не эквивалентна квантовомеханической теории в целом.

Необходимо тем не менее подчеркнуть, что применение теории Шредингера к атомным и молекулярным явлениям оказалось чрезвычайно успешным. В этой области ее следует считать, несмотря на ограниченность, хорошим *приближением*.

4. Прежде чем перейти к самому уравнению Шредингера, постараемся понять, почему теория, основанная на двух допущениях, рассмотренных в п. 2, оказалась в состоянии правильно описать свойства атомов и молекул. Главной причиной является «малость» постоянной тонкой структуры α. В гл. 2 было показано, что именно эта малость приводит к тому, что атомы и молекулы оказываются слабо связанными структурами, состоящими из медленно движущихся частиц. Мы показали, что скорость электрона в атоме водорода имеет порядок $\alpha c \approx c/137$. Внешние электроны остальных атомов имеют скорости того же порядка, а ядра в молекуле движутся с много меньшими скоростями. Таким образом, второе допущение, лежащее в основе теории Шредингера, хорошо выполняется для атомов и молекул.

5. Чтобы понять, на чем основано первое допущение, вспомним рассмотренные в гл. 2 типичные значения энергии переходов и связи для атомов и молекул. Энергии оптических переходов и энергии ионизации атомов и молекул имеют порядок 1—10 эВ. Наибольшие энергии имеют рентгеновские кванты, испускаемые тяжелыми атомами, но и они не превосходят 100 кэВ.

Такие энергии существенно меньше энергии покоя электрона, равной 0,5 МэВ. Нет легче частицы, чем электрон (кроме фотона, но мы условились рассмотреть проблему фотона отдельно), а она может быть рождена лишь в паре с позитроном. Рождение электронно-позитронной пары требует по меньшей мере энергии в 1 МэВ, что намного превосходит энергии, типичные для атомов и молекул. (Читатель может возразить, что имеется еще одна частица, существенно более легкая, чем электрон,— нейтрино. Но нейтрино *очень слабо* взаимодействует со всеми другими частицами, и, по сравнению с электромагнитным взаимодействием, происходящие с участием нейтрино взаимодействия пренебрежимо слабы. В атомной и молекулярной физике о взаимодействии нейтрино можно полностью забыть.)

6. Квантовая электродинамика, представляющая собой частный случай так называемой *квантовой теории поля*, может с полным основанием считаться «верной» теорией атомных и молекулярных явлений. Теория Шредингера в применении к этим явлениям может рассматриваться как первое приближение к «верной» теории. Сравнивая предсказания квантовой электродинамики с предсказаниями теории Шредингера, можно получить представление о точности последней. Общий результат такого сравнения позволяет считать, что теория Шредингера правильно описывает основные свойства структуры атомов и молекул. Более точно это утверждение можно выразить следующим образом. Теоретические значения многих атомных и молекулярных величин, таких как энергии и времена жизни стационарных состояний, длины волн излучения, геометрические параметры молекул и т. д., могут быть разложены в ряд по степеням постоянной тонкой структуры α. В этом разложении теория Шредингера дает верное значение основного члена. Члены более высокого порядка являются так называемыми «радиационными поправками». Эти поправки малы, так как мала постоянная α.

7. Перейдем теперь к изложению теории Шредингера для очень простой физической ситуации, а именно для движения частицы, например электрона, во внешнем силовом поле. Теория Шредингера в действительности способна на значительно большее. Она в состоянии описать движение любого числа взаимодействующих между собой частиц. Но чтобы понять основные принципы, начнем с еще более простой ситуации.

Рассмотрим, скажем, движение частицы в отсутствие внешнего поля, т. е. движение *свободной частицы*. Теория Шредингера основана на волновом уравнении, известном под названием уравнения Шредингера. Его решением является волна де Бройля, «связанная» с частицей. В п. 37 гл. 5 мы имели уже дело с одним из волновых уравнений, а именно с уравнением Клейна — Гордона. Это уравнение обладает релятивистской инвариантностью и применимо при любой скорости движения частицы. Мы хотим изменить уравнение Клейна — Гордона таким образом, чтобы оно согласовалось с приближениями, на которых основана теория Шредингера, иными словами, мы хотим получить его нерелятивистское приближение. Затем мы дадим физическое истолкование волновой функции $\psi(x, t)$, описывающей волну де Бройля.

8. В гл. 5 мы дали *грубую* интерпретацию волновой функции: «частицу легче найти в тех областях пространства, где амплитуда

$\psi(\boldsymbol{x}, t)$ велика». Здесь мы сделаем специальное предположение, которое придаст этой идее количественный характер.

Шредингеровская волновая функция $\psi(\boldsymbol{x}, t)$, т. е. амплитуда волны де Бройля, в теории Шредингера определяет вероятность нахождения частицы в данной точке пространства и времени. Если мы пытаемся установить положение частицы в данный момент времени t, то *вероятность* обнаружить частицу в малой части объема $d^3(\boldsymbol{x})$, содержащей точку $\boldsymbol{x}$, пропорциональна $|\psi(\boldsymbol{x}, t)|^2 d^3(\boldsymbol{x})$. Таким образом, *плотность вероятности* пропорциональна квадрату модуля волновой функции.

Это характерное и основное предположение теории Шредингера. Чтобы иметь возможность делать точные вычисления, мы, естественно, должны иметь *какую-то* интерпретацию волновой функции, и сформулированная выше вероятностная интерпретация и удобна, и физически прозрачна, и плодотворна. Эта глубокая и важная идея впервые высказана была Максом Борном *).

9. Шредингеровская волновая функция зависит от положения и времени и является комплексной величиной, удовлетворяющей (линейному) уравнению Шредингера (которое мы вскоре напишем).

Определенная волновая функция соответствует некоторому определенному состоянию движения частицы. Заметим, что если $\psi(\boldsymbol{x}, t)$ — возможная для данного состояния волновая функция, то функция $e^{\theta i}\psi(\boldsymbol{x}, t)=\psi_1(\boldsymbol{x}, t)$ также возможна, если θ — вещественная постоянная. Очень важно, что плотности вероятности, определяемые функциями ψ и ψ_1, *совпадают*. Это означает, что обе волновые функции $\psi(\boldsymbol{x}, t)$ и $\psi_1(\boldsymbol{x}, t)$ описывают одно и то же состояние движения частицы. Мы можем утверждать, что каждой волновой функции соответствует определенное состояние движения частицы. Обратное утверждение неверно: данное состояние движения частицы определяет шредингеровскую волновую функцию с точностью до *постоянного* комплексного коэффициента с модулем, равным единице. Две волновые функции, отличающиеся таким множителем, соответствуют *одному и тому же* физическому состоянию.

10. Обозначим массу частицы через m и рассмотрим плоскую волну с импульсом $\boldsymbol{p}$. Энергия частицы **)

$$E=\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}. \tag{10a}$$

Перейдем теперь к нерелятивистскому приближению, когда скорость частицы много меньше скорости света. Такое предположение означает, что в выражении (10a) слагаемое c^2p^2 много меньше слагаемого m^2c^4. Разлагая выражение под корнем (10a) по степеням p^2 и удерживая два первых члена, получим

$$E\approx mc^2+p^2/2m. \tag{10b}$$

---

*) *Born M.* Quantenmechanik der Stossvorgänge.— Zs. f. Phys., 1926, v. 38, p. 803.

**) В этой главе мы пользуемся системами единиц СИ или СГС.

Первое слагаемое в (10b) дает энергию покоя частицы, а второе — нерелятивистское выражение для ее кинетической энергии.

Соответствующая волновая функция де Бройля, которую мы обозначим через $\psi_B(\boldsymbol{x}, t)$, приближенно равна

$$\psi_B(\boldsymbol{x},t) = \exp\left(\frac{i\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}}{\hbar} - \frac{itp^2}{2m\hbar}\right)\exp\left(-\frac{itmc^2}{\hbar}\right). \tag{10c}$$

Ее можно записать в виде произведения двух множителей. Первый из них обозначим через $\psi_S(\boldsymbol{x}, t)$:

$$\psi_S(\boldsymbol{x},t) = \exp\left(\frac{i\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}}{\hbar} - \frac{itp^2}{2m\hbar}\right). \tag{10d}$$

Тогда имеем

$$\psi_B(\boldsymbol{x}, t) = \psi_S(\boldsymbol{x}, t)\exp(-itmc^2/\hbar), \tag{10e}$$

при этом

$$|\psi_B(\boldsymbol{x}, t)|^2 = |\psi_S(\boldsymbol{x}, t)|^2. \tag{10f}$$

Из равенства (10f) следует, что обе волновые функции ψ_B и ψ_S отличаются комплексным множителем с модулем, равным единице, который *не зависит* от состояния движения частицы, т. е. от импульса $\boldsymbol{p}$. Квадраты абсолютных значений обеих волновых функций совпадают в любой точке пространства для всего времени. Для описания распределения вероятности волновая функция ψ_S так же хороша, как и «правильная» волновая функция де Бройля ψ_B. Именно такая операция над волновой функцией и производится в теории Шредингера. Функция ψ_S, определенная равенством (10d), является шредингеровской волновой функцией, описывающей свободную частицу, движущуюся с малым импульсом $\boldsymbol{p}$. Произведенный выбор волновой функции является вопросом удобства; зачем вводить в вычисления множитель $\exp(-itmc^2/\hbar)$, если заранее известно, что за ним не скрывается никакого «физического смысла»?

11. В общем случае волновая функция Шредингера может быть представлена суперпозицией плоских волн, имеющих вид (10d). Чтобы найти волновое уравнение, которому удовлетворяет любая волновая функция Шредингера, повторим рассуждения, приведенные в п. 37 гл. 5. Итак, мы хотим иметь простейшее *линейное* волновое уравнение, которому удовлетворяет любая *плоская* волна. Выкладки полностью аналогичны произведенным в гл. 5, и мы получаем

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x}, t). \tag{11a}$$

В этом уравнении индекс S у волновой функции опущен. В дальнейшем мы будем иметь дело только со шредингеровской волновой функцией, и в индексе нет необходимости.

Уравнение (11a) является волновым уравнением Шредингера для свободной частицы. Оно описывает движение такой частицы в нерелятивистском приближении. Сравнивая (11a) с релятивистским уравнением (37e) гл. 5, замечаем, что уравнение (11a) содержит лишь первую производную по времени. Кроме того, в согласии с нерелятивистской природой уравнения Шредингера, в нем нет места для скорости света.

12. Рассмотрим решение уравнения Шредингера (11a) в виде плоской волны (10d). *Фазовая скорость* v_f' такой волны равна

$$v_f' = \omega/k = p/2m, \text{ где } \omega = p^2/2m\hbar, \quad k = p/\hbar. \tag{12a}$$

С другой стороны, фазовая скорость v_f волны де Бройля (в нерелятивистском приближении) согласно (10c) равна

$$v_f \approx \frac{mc^2}{p} + \frac{p}{2m}. \tag{12b}$$

Обе фазовые скорости v_f и v_f' не равны друг другу, хотя две волны ψ_B и ψ_S должны, по нашим предположениям, соответствовать одной и той же физической ситуации. У нас нет, однако, оснований для тревоги: фазовая скорость — это совсем не то, что скорость частицы, и фазовой скорости не отвечает нечто наблюдаемое. С другой стороны, *групповая* скорость v для волны Шредингера равна

$$1/v = dk/d\omega = m/p, \tag{12c}$$

и эта скорость действительно равна скорости частицы, как и должно быть. Мы уже отмечали в гл. 5, что групповая скорость волны де Бройля равна скорости частицы. Таким образом, оба типа волн распространяются с одинаковой групповой скоростью.

13. Попытаемся сейчас продвинуться на шаг дальше и рассмотреть движение частицы под действием внешних сил, имеющих потенциал. Обозначим потенциальную энергию, или потенциал, частицы через $V(\boldsymbol{x})$: потенциал зависит от координат, но не от времени.

У читателя могут возникнуть сомнения в связи с появлением в квантовой механике потенциала, определяющего силу. Силы, испытываемые частицей, вызваны, разумеется, присутствием других частиц, и согласованная теория требует квантовомеханического описания всей системы частиц. *Все* частицы в данной физической ситуации должны быть описаны волнами де Бройля, и *фундаментальная* теория взаимодействия частиц должна быть теорией, рассматривающей взаимодействие между этими волнами. Именно такое фундаментальное описание взаимодействия характерно для *квантовой теории* поля. Согласно этой теории, волна де Бройля, описывающая, например, электрон в атоме водорода, взаимодействует с квантованным электромагнитным полем, которое в свою очередь может взаимодействовать с волной де Бройля, описывающей протон. В такой теории взаимодействие электрона с протоном не является прямым процессом; оно осуществляется квантованным электромагнитным полем. Мы говорим, что взаимодействие происходит благодаря *обмену фотонами*.

В данной главе, однако, мы останемся в рамках приближений, характерных для теории Шредингера, и будем работать не с фундаментальной, а с феноменологической теорией. Нас интересует лишь движение *единственной* частицы, и действие всех других частиц разумно описать с помощью *эффективного потенциала* $V(x)$. В выборе такого потенциала путеводной нитью будет аналогия с классической физикой.

Идея о введении потенциальной функции становится особенно ясной, если рассмотреть движение заряженной частицы в *макроскопическом* электрическом поле, созданном проводящими телами, подключенными к батареям. В этом случае движение электрона с высокой степенью точности описывается классической теорией и траектория частицы определяется электростатическим потенциалом, созданным системой проводников. На языке квантовой теории поля электрон обменивается фотонами со всеми заряженными частицами в проводниках. Интуитивно, однако, ясно, что конечный эффект такого «обмена фотонами» может быть описан через электростатический потенциал, «ощущаемый» электроном в каждой точке пространства.

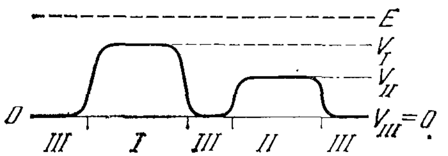

Рис. 15А. К выводу уравнения Шредингера. Прежде всего находим уравнения, которым удовлетворяют волны в областях I, II и III, где потенциал V постоянен. Обобщая уравнения (16с), (16е) и (16f), справедливые для этих областей, приходим к единственному уравнению (17а), которое является уравнением Шредингера. На графике потенциальная энергия V показана сплошной линией. Полная энергия E в данном случае больше любого значения потенциальной энергии. Она показана жирной штриховой линией, проходящей выше кривой потенциальной энергии

14. Идея об эффективном потенциале в теории Шредингера во многих отношениях аналогична идее о показателе преломления в классической оптике. Хорошо известно, что в микроскопическом масштабе стекло, которое состоит из атомов, не является однородной средой. Описывая распространение в стекле световой волны (фотона) в рамках *фундаментальной* теории, мы должны были бы рассмотреть взаимодействие волны со всеми атомами стекла. Если, однако, можно ограничиться *феноменологическим* описанием распространения света через стекло (которое может быть, например, частью оптической системы), то суммарный эффект элементарных взаимодействий можно заменить некоторым эффективным показателем преломления. Как мы указывали, оптический показатель преломления в большой степени аналогичен потенциалу в теории Шредингера, и такая аналогия помогает понять теорию. Вспомним, однако, что описание электромагнитных свойств твердого тела с помощью показателя преломления имеет свои ограничения. Аналогично, в некоторых физических ситуациях взаимодействия между элементарными частицами не могут быть полностью описаны потенциальной функцией. Такая функция имеет смысл лишь в тех случаях, когда выполнены два основных допущения теории Шредингера.

15. Рассмотрим теперь ситуацию, когда имеются две ограниченные области пространства I и II, причем потенциальная энергия частицы в области I равна V_I, а в области II равна V_{II}. Предположим, что за границами этих областей потенциалы быстро спадают до нуля. Обозначим остальную часть пространства, не входящую в области I и II, индексом III. Тогда $V_{III}=0$. Такая ситуация схематически изображена на рис. 15А, где показана зависимость потенциала от координаты.

Допустим теперь, что в таком потенциальном поле сил движется частица с энергией E (мы рассматриваем *полностью нерелятивистский* случай). Полная энергия E будет равна сумме кинетической и потенциальной энергий частицы (энергия покоя mc^2 в выражение для энергии *не включается*). Согласно классической механике, *кинетическая* энергия частицы равна $E-V_{III}$ в области III, $E-V_I$ в области I и $E-V_{II}$ в области II. Кинетическая энергия связана с импульсом частицы следующим образом:

$$E_k=p^2/2m. \tag{15a}$$

Полная энергия показана на рис. 15А жирной штриховой линией. Начнем с предположения, что полная энергия всюду больше потенциальной.

16. Рассмотрим теперь поведение шредингеровской волны, связанной с частицей. У такой волны частота ω пропорциональна энергии: $E=\hbar\omega$, и волновая функция зависит от времени t только благодаря множителю $\exp(-itE/\hbar)$. Поэтому шредингеровская волна для частицы с определенной энергией E удовлетворяет уравнению

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}, t)=E\psi(\boldsymbol{x}, t). \tag{16a}$$

Пространственная зависимость волны определяется импульсом частицы: импульс и длина волны связаны соотношением де Бройля $\lambda=h/p$. Рассмотрим волну в области III при энергии, равной E. Волна может быть представлена в виде суперпозиции плоских волн. Пространственная зависимость этих плоских волн задается экспоненциальным множителем $\exp(i\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}/\hbar)$, где импульс $\boldsymbol{p}$ определяется энергией

$$E=p^2/2m. \tag{16b}$$

Отсюда следует, что каждая из плоских волн удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x}, t)=E\psi(\boldsymbol{x}, t). \tag{16c}$$

Таким образом, шредингеровская волна, отвечающая частице с энергией E, находящейся в области III, удовлетворяет дифференциальному уравнению (16c).

Рассмотрим теперь волну в области I. Будем по-прежнему считать ее суперпозицией плоских волн типа $\exp(i\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}/\hbar)$. В согласии с (15a) импульс $\boldsymbol{p}$ теперь определяется соотношением

$$p^2/2m=E_k=E-V_I. \tag{16d}$$

Отсюда следует, что шредингеровская волна в области I удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x}, t) = (E - V_I)\psi(\boldsymbol{x}, t). \tag{16e}$$

Аналогично, уравнение для волновой функции в области II имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x}, t) = (E - V_{II})\psi(\boldsymbol{x}, t). \tag{16f}$$

17. Доводы, которые привели нас к уравнениям (16c), (16e) и (16f) для волновых функций в областях I, II и III, кажутся правдоподобными. Заманчиво объединить эти три уравнения в одно:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x}, t) = [E - V(\boldsymbol{x})]\psi(\boldsymbol{x}, t); \tag{17a}$$

здесь $V(\boldsymbol{x})$ — потенциальная функция, принимающая значения V_I, V_{II} и $V_{III}=0$ в трех областях. Заметим, однако, что мы не привели никаких соображений в пользу справедливости уравнения (17a) в переходных областях, где потенциал быстро меняется. Заранее не очевидно, что уравнение (17a) здесь выполняется. Автор должен сознаться, что он умышленно вел рассуждения и рисовал кривые на рис. 15А так, чтобы привести читателя к убеждению в справедливости, например, уравнения (16e). В таких рассуждениях есть слабое место. До тех пор, пока область II очень *велика* по сравнению с длиной волны де Бройля, можно не сомневаться в справедливости уравнения (16e). Поведение волны *в данной точке* области не будет зависеть от потенциала в любых других точках, и связь между длиной волны и кинетической энергией будет именно такой, какую мы предполагали. Ситуация, однако, меняется, если область II *мала* по сравнению с длиной волны, т. е. если потенциал $V(\boldsymbol{x})$ заметно меняется на длине волны. В этом случае неясно, какова должна быть пространственная зависимость волновой функции. Действительно, «длина волны» в точке $\boldsymbol{x}$, определяемая соотношением де Бройля через кинетическую энергию $E - V(\boldsymbol{x})$, оказывается функцией положения.

Поэтому совершенно не очевидно, что уравнение (17a) окажется справедливым для любой точки пространства и для любой потенциальной функции $V(\boldsymbol{x})$. Тем не менее мы *предполагаем*, следуя Шредингеру, что уравнение (17a) верно. Оно, по крайней мере, является разумным уравнением, описывающим свойства шредингеровских волн, и мы подвергаем его большому числу испытаний. Заметим, однако, что до сих пор наши рассуждения отнюдь не были *проверкой* справедливости уравнения (17a). Они содержали лишь правдоподобные доводы в его пользу. В действительности возможно нечто лучшее. Можно исходить из квантовой электродинамики. В этом случае удается показать, что уравнение (17a), которое применяется к нерелятивистским задачам для атомов и молекул, является приближением, следующим из теории поля. Другой возможный подход заключается в систематическом изучении различных волновых уравнений, допускающих разумную физическую интерпретацию, включая вероятностную интерпретацию, рассмотренную в п. 8. Мы хотим сохранить эту интерпретацию волновой функции для частицы, находящейся под действием сил. Можно показать, что уравнение (17а) в определенном смысле является простейшим волновым уравнением для квантовомеханических задач, которые «соответствуют» классическим задачам для частицы, движущейся в потенциальном поле $V(\boldsymbol{x})$. Подробное исследование этих проблем увело бы слишком далеко, и нам следует поэтому принять уравнение (17а) как рабочую гипотезу, основанную на высказанных выше соображениях.

18. Уравнение (17а) относится к волне, имеющей определенную энергию E. Для такой волны справедливо уравнение (16а), и (17а) можно переписать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x}, t)+V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}, t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}, t); \qquad (18а)$$

здесь E отсутствует, и, таким образом, (18а) справедливо для *любой* энергии и, следовательно, для *любой* волны Шредингера.

Уравнения (17а) и (18а) представляют собой знаменитые уравнения Шредингера. Уравнение (18а) известно как *зависящее от времени уравнение Шредингера*, а уравнение (17а) — *уравнение Шредингера, не зависящее* от времени. Следует иметь в виду, что уравнение (18а) справедливо для *всех* волн Шредингера, тогда как (17а) выполняется только для волн, описывающих частицу с заданной энергией E.

Наилучшим подтверждением справедливости уравнений (17а) и (18а) является совпадение предсказаний, основанных на этих уравнениях, с опытом. Вскоре после великого открытия Шредингера его уравнения были с замечательным успехом применены ко многим областям атомной и молекулярной физики. Сам Шредингер принимал активное участие в этих исследованиях. В следующей главе мы познакомимся с тем, как он объяснял квазистабильные состояния атомов. Нельзя не восхищаться интуицией Шредингера, которая привела к уравнению (18а). Оно справедливо в пределах допущений, на которых основано.

В нашу задачу не входит рассмотрение общей теории решения уравнения (18а); мы ограничимся несколькими весьма простыми примерами, которые помогут понять, как это уравнение «работает».

Некоторые простые «барьерные» задачи

19. Предположив, что уравнения Шредингера (17а) и (18а) справедливы для любой потенциальной функции $V(\boldsymbol{x})$, мы при «выводе» уравнения (17а) имели, однако, дело со случаем, когда потенциал $V(\boldsymbol{x})$ везде меньше полной энергии E. Посмотрим теперь, что происходит в тех областях пространства, где потенциал $V(\boldsymbol{x})$ *больше* полной энергии E. Согласно классической механике, такие области