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

Очень важной категорией физических величин являются те, операторы которых не зависят явно от времени и, кроме того, коммутативны с гамильтонианом, так что $\widehat{\dot{f}} = 0$. Такие величины называют *сохраняющимися*. Для них $\overline{\dot{f}} = \dot{\overline{f}} = 0$, т. е. $\overline{f} = \text{const}$. Другими словами, среднее значение величины остается постоянным во времени. Можно также утверждать, что если в данном состоянии величина f имеет определенное значение (т. е. волновая функция является собственной функцией оператора $\hat{f}$), то и в дальнейшие моменты времени она будет иметь определенное — то же самое — значение.

§ 10. Стационарные состояния

Гамильтониан замкнутой системы (а также системы, находящейся в постоянном — но не в переменном — внешнем поле) не может содержать времени явно. Это следует из того, что по отношению к такой физической системе все моменты времени эквивалентны. Поскольку, с другой стороны, всякий оператор, конечно, коммутативен сам с собой, то мы приходим к выводу, что у систем, не находящихся в переменном внешнем поле, функция Гамильтона сохраняется. Как известно, сохраняющаяся функция Гамильтона называется энергией. Смысл закона сохранения энергии в квантовой механике состоит в том, что если в данном состоянии энергия имеет определенное значение, то это значение остается постоянным во времени.

Состояния, в которых энергия имеет определенные значения, называются *стационарными состояниями* системы. Они описываются волновыми функциями Ψ_n, являющимися собственными функциями оператора Гамильтона, т. е. удовлетворяющими уравнению $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$, где E_n — собственные значения энергии. Соответственно этому, волновое уравнение (8,1) для функции Ψ_n

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = \hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$$

может быть непосредственно проинтегрировано по времени и дает

$$\Psi_n = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(q), \tag{10,1}$$

где ψ_n — функция только от координат. Этим определяется зависимость волновых функций стационарных состояний от времени.

Малой буквой ψ мы будем обозначать волновые функции стационарных состояний без временного множителя. Эти функции, а также сами собственные значения энергии, определяются уравнением

$$\hat{H}\psi = E\psi. \tag{10,2}$$

Стационарное состояние с наименьшим из всех возможных значением энергии называется *нормальным* или *основным* состоянием системы.

Разложение произвольной волновой функции Ψ по волновым функциям стационарных состояний имеет вид

$$\Psi = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(q). \tag{10,3}$$

Квадраты $|a_n|^2$ коэффициентов разложения, как обычно, определяют вероятности различных значений энергии системы.

Распределение вероятностей для координат в стационарном состоянии определяется квадратом $|\Psi_n|^2 = |\psi_n|^2$; мы видим, что оно не зависит от времени. То же самое относится и к средним значениям $\bar{f} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_n \, dq = \int \psi_n^* \hat{f} \psi_n \, dq$ всякой физической величины f (оператор которой не зависит от времени явно).

Как указывалось, оператор всякой сохраняющейся величины коммутативен с гамильтонианом. Это значит, что всякая сохраняющаяся физическая величина может быть измерена одновременно с энергией.

Среди различных стационарных состояний могут быть и такие, которые соответствуют одному и тому же собственному значению энергии (или, как говорят, *энергетическому уровню* системы), отличаясь значениями каких-либо других физических величин. О таких уровнях, которым соответствует по нескольку различных стационарных состояний, говорят как о *вырожденных*. Физически возможность существования вырожденных уровней связана с тем, что энергия, вообще говоря, не составляет сама по себе полной системы физических величин.

Уровни энергии системы, вообще говоря, вырождены, если имеются две сохраняющиеся физические величины f и g, операторы которых некоммутативны. Действительно, пусть ψ есть волновая функция стационарного состояния, в котором, наряду с энергией, имеет определенное значение величина f. Тогда можно утверждать, что функция $\hat{g}\psi$ не совпадает (с точностью до постоянного множителя) с ψ; противное означало бы, что имеет определенное значение также и величина g, что невозможно, так как f и g не могут быть измерены одновременно. С другой стороны, функция $\hat{g}\psi$ есть собственная функция гамильтониана, соответствующая тому же значению E энергии, что и ψ:

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

Таким образом, мы видим, что энергии E соответствуют более чем одна собственная функция, т. е. уровень вырожден.

Ясно, что любая линейная комбинация волновых функций, соответствующих одному и тому же вырожденному уровню энергии, есть тоже собственная функция того же значения энергии. Другими словами, выбор собственных функций вырожденного значения энергии неоднозначен. Произвольно выбранные собственные функции вырожденного уровня, вообще говоря, не взаимно ортогональны. Надлежащим подбором их линейных комбинаций можно, однако, всегда получить набор взаимно ортогональных (и нормированных) собственных функций [1]).

Эти утверждения относительно собственных функций вырожденного уровня относятся, разумеется, не только к собственным функциям энергии, но и к собственным функциям всякого оператора. Автоматически ортогональными являются лишь функции, соответствующие различным собственным значениям данного оператора; функции же, соответствующие одному и тому же вырожденному собственному значению, вообще говоря, не ортогональны.

Если гамильтониан системы представляет собой сумму двух (или нескольких) частей, $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, одна из которых содержит только координаты q_1, а другая — координаты q_2, то собственные функции оператора $\hat{H}$ могут быть написаны в виде произведений собственных функций операторов $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$, а собственные значения энергии равны суммам собственных значений этих операторов.

Спектр собственных значений энергии может быть как дискретным, так и непрерывным. Стационарное состояние дискретного спектра всегда соответствует *финитному* движению системы, т. е. движению, при котором система или какая-либо ее часть не уходит на бесконечность. Действительно, для собственных функций дискретного спектра интеграл $\int |\Psi|^2 dq$, взятый по всему пространству, конечен. Это, во всяком случае, означает, что квадрат $|\Psi|^2$ достаточно быстро убывает, обращаясь на бесконечности в нуль. Другими словами, вероятность бесконечных значений координат равна нулю, т. е. система совершает финитное движение или, как говорят, находится в *связанном* состоянии.

Для волновых функций непрерывного спектра интеграл $\int |\Psi|^2 dq$ расходится. Квадрат волновой функции $|\Psi|^2$ не опреде-

---

[1]) Причем это может быть сделано бесчисленным множеством способов; действительно, число независимых коэффициентов в линейном преобразовании n функций равно n^2, а число условий нормировки и ортогональности n функций равно $n(n+1)/2$, т. е. меньше, чем n^2.

ляет здесь непосредственно вероятности различных значений координат и должен рассматриваться лишь как величина, пропорциональная этой вероятности. Расходимость интеграла $\int |\Psi|^2 dq$ всегда бывает связана с тем, что $|\Psi|^2$ не обращается на бесконечности в нуль (или обращается в нуль недостаточно быстро). Поэтому можно утверждать, что интеграл $\int |\Psi|^2 dq$, взятый по области пространства, внешней по отношению к любой сколь угодно большой, но конечной замкнутой поверхности, будет все же расходиться. Это значит, что в рассматриваемом состоянии система (или какая-либо ее часть) находится на бесконечности. Для волновой функции, представляющей собой суперпозицию волновых функций различных стационарных состояний непрерывного спектра, интеграл $\int |\Psi|^2 dq$ может оказаться сходящимся, так что система находится в конечной области пространства. Однако с течением времени эта область будет неограниченно смещаться, и в конце концов система уходит на бесконечность.

Действительно, произвольная суперпозиция волновых функций непрерывного спектра имеет вид

$$\Psi = \int a_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi_E(q)\, dE.$$

Квадрат модуля Ψ может быть написан в виде двойного интеграла

$$|\Psi|^2 = \int\int a_E a^*_{E'} e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t} \psi_E(q) \psi^*_{E'}(q)\, dE\, dE'.$$

Если усреднить это выражение по некоторому промежутку времени T и затем устремить T к бесконечности, то средние значения осциллирующих множителей $\exp\{i(E'-E)t/\hbar\}$, а с ними и весь интеграл обратятся в пределе в нуль. Другими словами, среднее по времени значение вероятности нахождения системы в любом заданном месте конфигурационного пространства обращается в нуль; но это возможно только, если движение происходит во всем бесконечном пространстве [1]).

Таким образом, стационарные состояния непрерывного спектра соответствуют инфинитному движению системы.

---

[1]) Заметим, что для функции Ψ, представляющей собой суперпозицию функций дискретного спектра, было бы

$$\overline{|\Psi|^2} = \sum_{n,m} a_n a^*_m \overline{\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t\right\}} \psi_n \psi^*_m = \sum_n |a_n \psi_n(q)|^2,$$

т. е. плотность вероятности остается при усреднении по времени конечной.