Это уравнение имеет наглядный физический смысл: a^2 есть плотность вероятности нахождения частицы в том или ином месте пространства ($|\Psi|^2 = a^2$); $\nabla S/m = \mathbf{p}/m$ есть классическая скорость $\mathbf{v}$ частицы. Поэтому уравнение (17,11) есть не что иное, как уравнение непрерывности, показывающее, что плотность вероятности «перемещается» по законам классической механики с классической скоростью $\mathbf{v}$ в каждой точке.

Задача

Найти закон преобразования волновой функции при преобразовании Галилея.

Решение. Произведем преобразование над волновой функцией свободного движения частицы (плоской волной). Поскольку всякая функция Ψ может быть разложена по плоским волнам, то тем самым будет найден закон преобразования и для произвольной волновой функции.

Плоские волны в системах отсчета K и K' (K' движется относительно K со скоростью $\mathbf{V}$):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \mathrm{const}\cdot e^{i(\mathbf{pr}-Et)/\hbar}, \quad \Psi'(\mathbf{r}', t) = \mathrm{const}\cdot e^{i(\mathbf{p}'\mathbf{r}'-E't)/\hbar},$$

причем $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{V}t$, а импульсы и энергии частицы в обеих системах связаны друг с другом формулами

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + m\mathbf{V}, \quad E = E' + \mathbf{V}\mathbf{p}' + \frac{mV^2}{2}$$

(см. I, § 8). Подставив эти выражения в Ψ, получим

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi'(\mathbf{r}', t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(m\mathbf{V}\mathbf{r}' + \frac{mV^2}{2}t\right)\right] =$$

$$= \Psi'(\mathbf{r} - \mathbf{V}t, t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(m\mathbf{V}\mathbf{r} - \frac{mV^2}{2}t\right)\right]. \qquad (1)$$

В таком виде эта формула уже не содержит величин, характеризующих свободное движение частицы, и устанавливает искомый общий закон преобразования волновой функции произвольного состояния частицы. Для системы частиц в показателе экспоненты в (1) должна стоять сумма по частицам.

§ 18. Основные свойства уравнения Шредингера

Условия, которым должны удовлетворять решения уравнения Шредингера, имеют весьма общий характер. Прежде всего волновая функция должна быть однозначной и непрерывной во всем пространстве. Требование непрерывности сохраняется и в тех случаях, когда само поле $U(x, y, z)$ имеет поверхности разрыва. На такой поверхности должны оставаться непрерывными как волновая функция, так и ее производные. Непрерывность последних, однако, не имеет места, если за некоторой поверхностью потенциальная энергия U обращается в бесконечность. В область пространства, где $U = \infty$, частица вообще не может проникнуть, т. е. в этой области должно быть везде $\psi = 0$. Непрерывность ψ требует, чтобы на границе этой области ψ обращалось в нуль;

производные же от ψ в этом случае испытывают, вообще говоря, скачок.

Если поле $U(x, y, z)$ нигде не обращается в бесконечность, то волновая функция тоже должна быть конечной во всем пространстве. Это же условие должно соблюдаться и в тех случаях, когда U обращается в некоторой точке в бесконечность, но не слишком быстро — как $1/r^s$ с $s < 2$ (см. также § 35).

Пусть $U_{\min}$ есть минимальное значение функции $U(x, y, z)$. Поскольку гамильтониан частицы есть сумма двух членов — операторов кинетической $\hat{T}$ и потенциальной U энергий, то среднее значение энергии в произвольном состоянии равно сумме $\overline{E} = \overline{T} + \overline{U}$. Но все собственные значения оператора $\hat{T}$ (совпадающего с гамильтонианом свободной частицы) положительны; поэтому и среднее значение $\overline{T} \geqslant 0$. Имея также в виду очевидное неравенство $\overline{U} > U_{\min}$, найдем, что и $\overline{E} > U_{\min}$. Поскольку это неравенство имеет место для любого состояния, то ясно, что оно справедливо и для всех собственных значений энергии

$$E_n > U_{\min}. \tag{18,1}$$

Рассмотрим частицу, движущуюся в силовом поле, исчезающем на бесконечности; функцию $U(x, y, z)$, как обычно принято, определим так, чтобы на бесконечности она обращалась в нуль. Легко видеть, что спектр отрицательных собственных значений энергии будет тогда дискретным, т. е. все состояния с $E < 0$ в исчезающем на бесконечности поле являются связанными. Действительно, в стационарных состояниях непрерывного спектра, соответствующих инфинитному движению, частица находится на бесконечности (см. § 10). Но на достаточно больших расстояниях наличием поля можно пренебречь, и движение частицы может рассматриваться как свободное; при свободном же движении энергия может быть только положительной.

Напротив, положительные собственные значения образуют непрерывный спектр и соответствуют инфинитному движению; при $E > 0$ уравнение Шредингера, вообще говоря, не имеет (в рассматриваемом поле) решений, для которых бы интеграл $\int |\psi|^2 dV$ сходился [1]).

Обратим внимание на то, что в квантовой механике при финитном движении частица может находиться и в тех областях пространства, в которых $E < U$; вероятность $|\psi|^2$ нахождения частицы хотя и стремится быстро к нулю в глубь такой области, но на всех конечных расстояниях все же отлична от нуля. В этом

[1]) С чисто математической точки зрения надо, однако, оговориться, что при некоторых определенных видах функции $U(x, y, z)$ (не имеющих физического значения) из непрерывного спектра может выпадать дискретный набор значений.

отношении имеется принципиальное отличие от классической механики, в которой частица вообще не может проникнуть в область, где $U > E$. В классической механике невозможность проникновения в эту область связана с тем, что при $E < U$ кинетическая энергия была бы отрицательной, т. е. скорость — мнимой. В квантовой механике собственные значения кинетической энергии тоже положительны; тем не менее мы не приходим здесь к противоречию, так как если процессом измерения частица локализуется в некоторой определенной точке пространства, то в результате этого же процесса состояние частицы нарушается таким образом, что она вообще перестает обладать какой-либо определенной кинетической энергией.

Если во всем пространстве $U(x, y, z) > 0$ (причем на бесконечности $U \to 0$), то в силу неравенства (18,1) имеем $E_n > 0$. Поскольку, с другой стороны, при $E > 0$ спектр должен быть непрерывным, то мы заключаем, что в рассматриваемом случае дискретный спектр вообще отсутствует, т. е. возможно только инфинитное движение частицы.

Предположим, что U в некоторой точке (которую выберем в качестве начала координат) обращается в $-\infty$ по закону

$$U \approx -\alpha/r^s \quad (\alpha > 0). \tag{18,2}$$

Рассмотрим волновую функцию, конечную в некоторой малой области (радиуса r_0) вокруг начала координат и равную нулю вне ее. Неопределенность в значениях координат частицы в таком волновом пакете порядка r_0; поэтому неопределенность в значении импульса $\sim\hbar/r_0$. Среднее значение кинетической энергии в этом состоянии порядка величины $\hbar^2/mr_0^2$, а среднее значение потенциальной энергии $\sim-\alpha/r_0^s$. Предположим сначала, что $s > 2$. Тогда сумма

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

при достаточно малых r_0 принимает сколь угодно большие по абсолютной величине отрицательные значения. Но если средняя энергия может принимать такие значения, то это во всяком случае означает, что существуют отрицательные собственные значения энергии, сколь угодно большие по абсолютной величине. Уровням энергии с большим $|E|$ соответствует движение частицы в очень малой области пространства вокруг начала координат. «Нормальное» состояние будет соответствовать частице, находящейся в самом начале координат, т. е. произойдет «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 начинается с некоторого конечного отрицательного значения. Падения частицы на центр в этом случае не происходит. Обратим внимание на то, что в классической механике падение частицы на центр в принципе возможно во всяком поле притяжения (т. е. при любом положительном s). Случай $s = 2$ будет рассмотрен особо в § 35.

Далее, исследуем характер энергетического спектра в зависимости от поведения поля на больших расстояниях. Предположим, что при $r \to \infty$ потенциальная энергия, будучи отрицательной, стремится к нулю по степенному закону (18,2) (в этой формуле теперь r велико). Рассмотрим волновой пакет, «заполняющий» шаровой слой большого радиуса r_0 и толщины $\Delta r \ll r_0$. Тогда снова порядок величины кинетической энергии будет $\hbar^2/m(\Delta r)^2$, а потенциальной: $-\alpha/r_0^s$. Будем увеличивать r_0, увеличивая одновременно и Δr (так, чтобы Δr росло пропорционально r_0). Если $s < 2$, то при достаточно больших r_0 сумма $\hbar^2/m(\Delta r)^2 - \alpha/r_0^s$ станет отрицательной. Отсюда следует, что существуют стационарные состояния с отрицательной энергией, в которых частица может с заметной вероятностью находиться на больших расстояниях от начала координат. Но это означает, что существуют сколь угодно малые по абсолютной величине отрицательные уровни энергии (надо помнить, что в области пространства, где $U > E$, волновые функции быстро затухают). Таким образом, в рассматриваемом случае дискретный спектр содержит бесконечное множество уровней, которые сгущаются по направлению к уровню $E = 0$.

Если же на бесконечности поле спадает, как $-1/r^s$ с $s > 2$, то сколь угодно малых по абсолютной величине отрицательных уровней нет. Дискретный спектр кончается уровнем с отличным от нуля абсолютным значением, так что общее число уровней конечно.

Уравнение Шредингера для волновых функций ψ стационарных состояний, как и накладываемые на его решения условия, — вещественно. Поэтому его решения всегда могут быть выбраны вещественными [1]). Что касается собственных функций невырожденных значений энергии, то они автоматически оказываются вещественными с точностью до несущественного фазового множителя. В самом деле, ψ^* удовлетворяет тому же уравнению, что и ψ, и потому тоже есть собственная функция для того же значения энергии; поэтому если это значение не вырождено, то ψ и ψ^* должны быть по существу одинаковыми, т. е. могут отличаться лишь постоянным множителем (с модулем, равным единице). Волновые же функции, соответствующие одному и тому же вырожденному уровню энергии, не обязательно вещественны, но путем

---

[1]) Эти утверждения не справедливы для систем, находящихся в магнитном поле.

соответствующего выбора их линейных комбинаций всегда можно получить набор вещественных функций.

Полные же (зависящие от времени) волновые функции Ψ определяются уравнением, в коэффициенты которого входит i. Это уравнение, однако, сохраняет свой вид, если в нем заменить t на $-t$ и одновременно перейти к комплексно сопряженному [1]. Поэтому можно всегда выбрать функции Ψ такими, чтобы Ψ и Ψ^* отличались только знаком у времени.

Как известно, уравнения классической механики не меняются при *обращении времени*, т. е. при изменении его знака. В квантовой механике симметрия по отношению к обоим направлениям времени выражается, как мы видим, в неизменности волнового уравнения при изменении знака t и одновременной замене Ψ на Ψ^*. Надо, однако, помнить, что эта симметрия относится здесь только к уравнениям, но не к самому понятию измерения, играющему фундаментальную роль в квантовой механике (как об этом подробно шла речь в § 7).

§ 19. Плотность потока

В классической механике скорость частицы $\mathbf{v}$ связана с ее импульсом соотношением $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. В квантовой механике, как и следовало ожидать, такая же связь имеет место между соответствующими операторами. В этом легко убедиться, вычислив оператор $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\dot{\mathbf{r}}}$ по общему правилу дифференцирования операторов по времени (9,2):

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\mathbf{r} - \mathbf{r}\hat{H}).$$

Воспользовавшись выражением (17,5) для $\hat{H}$ и формулой (16,5), получим

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}. \qquad (19,1)$$

Такие же соотношения будут, очевидно, иметь место и между собственными значениями скорости и импульса и между их средними значениями в любом состоянии.

Скорость, как и импульс частицы, не может иметь определенного значения одновременно с ее координатами. Но скорость, умноженная на бесконечно малый элемент времени dt, определяет смещение частицы за время dt. Поэтому факт несуществования скорости одновременно с координатами означает, что если частица

---

[1] Предполагается, что потенциальная энергия U не зависит явно от времени — система либо замкнута, либо находится в постоянном (не магнитном) поле.