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

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}. \tag{19,1}$$

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.

находится в определенной точке пространства в некоторый момент времени, то она не будет иметь определенного положения уже в следующий бесконечно близкий момент времени.

Отметим полезную формулу для оператора $\hat{\dot{f}}$ производной по времени от некоторой величины $f(\mathbf{r})$, являющейся функцией радиуса-вектора частицы. Имея в виду, что f коммутативно с $U(\mathbf{r})$, находим

$$\hat{\dot{f}} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}f - f\hat{H}) = \frac{i}{2m\hbar}(\hat{\mathbf{p}}^2 f - f\hat{\mathbf{p}}^2).$$

С помощью (16,4) пишем

$$\hat{\mathbf{p}}^2 f = \hat{\mathbf{p}}(f\hat{\mathbf{p}} - i\hbar\nabla f), \quad f\hat{\mathbf{p}}^2 = (\hat{\mathbf{p}}f + i\hbar\nabla f)\hat{\mathbf{p}}$$

и находим искомое выражение

$$\hat{\dot{f}} = \frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}}\nabla f + \nabla f\cdot\hat{\mathbf{p}}). \tag{19,2}$$

Далее, найдем оператор ускорения. Имеем

$$\hat{\dot{\mathbf{v}}} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{\mathbf{v}} - \hat{\mathbf{v}}\hat{H}) = \frac{i}{m\hbar}(\hat{H}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{H}) = \frac{i}{m\hbar}(U\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}U).$$

Воспользовавшись формулой (16,4), находим

$$m\hat{\dot{\mathbf{v}}} = -\nabla U. \tag{19,3}$$

Это операторное уравнение по форме в точности совпадает с уравнением движения (уравнением Ньютона) классической механики.

Интеграл $\int |\Psi|^2 dV$, взятый по некоторому конечному объему V, представляет собой вероятность нахождения частицы в этом объеме. Вычислим производную от этой величины по времени. Имеем

$$\frac{d}{dt}\int|\Psi|^2 dV = \int\left(\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)dV = \frac{i}{\hbar}\int(\Psi\hat{H}^*\Psi^* - \Psi^*\hat{H}\Psi)\,dV.$$

Подставив сюда

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

и использовав тождество

$$\Psi\Delta\Psi^* - \Psi^*\Delta\Psi = \operatorname{div}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi),$$

получим

$$\frac{d}{dt}\int|\Psi|^2 dV = -\int \operatorname{div}\mathbf{j}\,dV,$$

где $\mathbf{j}$ обозначает вектор [1])

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi \operatorname{grad} \Psi^* - \Psi^* \operatorname{grad} \Psi) = \frac{1}{2m}(\Psi \hat{\mathbf{p}}^* \Psi^* + \Psi^* \hat{\mathbf{p}} \Psi). \quad (19,4)$$

Интеграл от $\operatorname{div} \mathbf{j}$ может быть преобразован, согласно теореме Гаусса, в интеграл по замкнутой поверхности, окружающей объем V:

$$\frac{d}{dt}\int |\Psi|^2 dV = -\oint \mathbf{j}\, d\mathbf{f}. \quad (19,5)$$

Отсюда видно, что вектор $\mathbf{j}$ может быть назван вектором *плотности потока вероятности* или просто *плотностью потока*. Интеграл от этого вектора по поверхности есть вероятность того, что в течение единицы времени частица пересечет эту поверхность. Вектор $\mathbf{j}$ и плотность вероятности $|\Psi|^2$ удовлетворяют уравнению

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad (19,6)$$

аналогичному классическому уравнению непрерывности.

Волновая функция свободного движения — плоская волна (17,9) — может быть пронормирована так, чтобы она описывала поток частиц с равной единице плотностью (поток, в котором через единичную площадку его поперечного сечения проходит в среднем по одной частице в единицу времени). Такая функция

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{pr})}, \quad (19,7)$$

где v — скорость частицы. Действительно, подставив ее в (19,4), получим $\mathbf{j} = \mathbf{p}/mv$, т. е. единичный вектор в направлении движения.

Полезно показать, каким образом непосредственно из уравнения Шредингера следует взаимная ортогональность волновых функций состояний с различной энергией. Пусть ψ_m и ψ_n — две такие функции; они удовлетворяют уравнениям

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_m + U\psi_m = E_m\psi_m,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_n^* + U\psi_n^* = E_n\psi_n^*.$$

[1]) Если представить ψ в виде $|\psi| e^{i\alpha}$, то

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m}|\psi|^2 \operatorname{grad}\alpha. \quad (19,4а)$$

Умножим первое из них на ψ_n^*, а второе — на ψ_m и вычтем почленно друг из друга; это дает

$$(E_m - E_n)\psi_m\psi_n^* = \frac{\hbar^2}{2m}(\psi_m\Delta\psi_n^* - \psi_n^*\Delta\psi_m) = \frac{\hbar^2}{2m}\operatorname{div}(\psi_m\nabla\psi_n^* - \psi_n^*\nabla\psi_m).$$

Если теперь проинтегрировать обе стороны уравнения по всему пространству, то правая сторона, будучи преобразована по теореме Гаусса, обратится в нуль, и мы получим

$$(E_m - E_n)\int \psi_m\psi_n^*\,dV = 0,$$

откуда, ввиду предполагаемого $E_m \neq E_n$, следует искомое соотношение ортогональности

$$\int \psi_m\psi_n^*\,dV = 0.$$

§ 20. Вариационный принцип

Уравнение Шредингера в общем виде $\hat{H}\psi = E\psi$ может быть получено из вариационного принципа

$$\delta\int \psi^*(\hat{H} - E)\psi\,dq = 0. \tag{20,1}$$

Ввиду комплексности ψ варьирование по ψ и ψ^* можно производить независимо. Варьируя по ψ^*, имеем

$$\int \delta\psi^*(\hat{H} - E)\psi\,dq = 0,$$

откуда, ввиду произвольности $\delta\psi^*$, получаем искомое уравнение $\hat{H}\psi = E\psi$. Варьирование по ψ не дает ничего нового. Действительно, варьируя по ψ и воспользовавшись эрмитовостью оператора $\hat{H}$, имеем

$$\int \psi^*(\hat{H} - E)\delta\psi\,dq = \int \delta\psi(\hat{H}^* - E)\psi^*\,dq = 0,$$

откуда получается комплексно сопряженное уравнение $\hat{H}^*\psi^* = E\psi^*$.

Вариационный принцип (20,1) требует безусловного экстремума интеграла. Его можно представить в другом виде, рассматривая E как множитель Лагранжа в задаче об условном экстремуме

$$\delta\int \psi^*\hat{H}\psi\,dq = 0 \tag{20,2}$$

при дополнительном условии

$$\int \psi\psi^*\,dq = 1. \tag{20,3}$$

Минимальное (при дополнительном условии (20,3)) значение интеграла (20,2) представляет собой первое из собственных зна-