функция и ее первые производные должны оставаться непрерывными. Производная от волновой функции испытывает скачок лишь на поверхности бесконечно большого разрыва потенциальной энергии.

Уравнение Шредингера, как и уравнения движения классической механики, допускает «обращение во времени».

Действительно, уравнение (6, 8) не изменяется при преобразовании $t \to -t$ и при переходе к комплексно сопряженной функции ψ^*. Следовательно, обращенный во времени процесс описывается волновой функцией $\psi_{\text{обр}}(x, t)$, причем

$$\psi_{\text{обр}}(x, t) = \psi^*(x, -t). \tag{6,9}$$

Отметим, что при движении в магнитном поле обращение во времени имеет место лишь при изменении направления магнитного поля на обратное (см. § 27). Более подробно вопрос об обращении времени мы рассмотрим в § 98.

§ 7. Плотность потока вероятности

Волновая функция, описывающая движение частицы, вообще говоря, изменяется в пространстве и времени. Однако это изменение не может быть произвольным.

Именно, имеет место некоторый закон сохранения. Для формулировки этого закона рассмотрим интеграл $\int\limits_V |\psi|^2 dV$, представляющий вероятность нахождения частицы в объеме V. Поступая так же, как и при выводе закона сохранения заряда (см. § 5 ч. I), найдем производную от последнего интеграла по времени. Для вычисления $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ и $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$ воспользуемся уравнением Шредингера (6,8) и уравнением, сопряженным ему.

Тогда получим

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \psi\psi^* dV = \int\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) dV = \frac{\hbar}{2mi}\int(\psi\,\Delta\psi^* - \psi^*\,\Delta\psi)\, dV =$$
$$= \frac{\hbar}{2mi}\int \operatorname{div}(\psi\,\nabla\psi^* - \psi^*\,\nabla\psi)\, dV. \tag{7,1}$$

Воспользовавшись теоремой Гаусса — Остроградского, имеем

$$\int\limits_V \operatorname{div}(\psi\,\nabla\psi^* - \psi^*\,\nabla\psi)\, dV = \oint\limits_S (\psi\,\nabla\psi^* - \psi^*\,\nabla\psi)\, d\mathbf{S},$$

где поверхность S охватывает объем V. Поэтому

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V |\psi|^2 dV = \frac{\hbar}{2mi}\oint\limits_S (\psi\,\nabla\psi^* - \psi^*\,\nabla\psi)\, d\mathbf{S}. \tag{7,2}$$

Введем вектор j, определенный соотношением

$$j = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \nabla\psi - \psi\nabla\psi^*). \tag{7,3}$$

Тогда (7,2) перепишется в виде

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V |\psi|^2 dV = \oint\limits_S j_n\, dS. \tag{7,4}$$

Формула (7, 4) показывает, что плотность вероятности удовлетворяет закону сохранения, а введенный нами вектор j имеет смысл плотности потока вероятности. Соотношение (7,4) может быть переписано в дифференциальной форме в виде уравнения непрерывности

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0. \tag{7,5}$$

Интеграл от нормальной составляющей вектора j по некоторой поверхности представляет вероятность того, что частица пересечет указанную поверхность в единицу времени.

Рассмотрим, в частности, свободное движение. Волновую функцию возьмем в виде плоской волны $\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(pr-Et)}$. Используя соотношение (7,3), получаем

$$j = \frac{1}{m}p|A|^2. \tag{7,6}$$

Применим теперь соотношение (7, 4) ко всему пространству, т. е. будем считать поверхность S бесконечно удаленной. Если ψ является квадратично-интегрируемой функцией, то подынтегральная функция в интеграле по поверхности убывает быстрее, чем $\frac{1}{r^4}$, а поверхность интегрирования растет пропорционально r^2. В итоге интеграл по поверхности в (7,4) обращается в нуль. Если же ψ не стремится указанным образом к нулю при $r \to \infty$, как, например, в случае плоской волны, то на бесконечности имеется поток частиц. Если этот поток является стационарным, то волновую функцию можно нормировать так, что вектор j представляет вектор плотности потока частиц.

Заметим, наконец, что плотность потока j заведомо обращается в нуль, если состояние системы описывается действительной волновой функцией ψ, что непосредственно следует из формулы (7, 3).

Соотношение (7,5), записанное в форме

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0. \tag{7,7}$$

можно трактовать как закон сохранения числа частиц (ср. § 5 ч. I).