

## Раздел III. СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

## § 16. Исследование стационарных состояний

Уравнение Шредингера квантовой системы формально записывается в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi. \quad (33)$$

Предположим, что гамильтониан  $H$  от времени явно не зависит. Это случай консервативных систем, соответствующих классическим системам, для которых энергия есть интеграл движения. образуем решение  $\Psi$ , представляющее динамическое состояние с определенной энергией  $E$ .

Такая волновая функция  $\Psi$  должна обладать вполне определенной круговой частотой  $\omega$ , соответствующей соотношению Эйнштейна  $E = \hbar\omega$ . Напомним, что это соотношение между частотой волны и энергией системы составляет основной постулат теории волн вещества. Функция  $\Psi$  записывается в виде

$$\Psi = \psi e^{-i \frac{Et}{\hbar}}, \quad (34)$$

где  $\psi$  зависит от координат в конфигурационном пространстве, но не зависит от времени. Подставляя это выражение в уравнение (33), получаем уравнение

$$H\psi = E\psi, \quad (35)$$

которое обычно называется уравнением Шредингера, не зависящим от времени, или *стационарным уравнением Шредингера*.

Когда система представляется волновой функцией (34), говорят, что она находится в *стационарном состоянии с энергией  $E$* , а волновая функция  $\psi$ , не зависящая от времени, обычно называется волновой функцией стационарного состояния, хотя она отличается от истинной волновой функции фазовым множителем  $e^{-i \frac{Et}{\hbar}}$ .

## § 17. Общие свойства уравнения. Структура энергетического спектра

Чтобы облегчить изложение, продолжим обсуждение на частном примере частицы с массой  $m$  при наличии скалярного потенциала  $V(\mathbf{r})$ . Предположим, кроме того, что  $V(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ , когда  $r \rightarrow \infty$ . Функция  $\psi$  зависит от вектора  $\mathbf{r}(x, y, z)$ , фиксирующего положение частицы, а уравнение Шредингера, не зависящее от

времени, запишется в виде

$$H\psi(\mathbf{r}) \equiv \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (36)$$

На языке теории уравнений с частными производными уравнение типа (36) называется *уравнением на собственные значения*. Решение  $\psi_E(\mathbf{r})$  этого уравнения есть *собственная функция*, соответствующая собственному значению  $E$  оператора  $H$ .

В действительности задача на собственные значения определена только если сформулированы условия «регулярности» и граничные условия, которым должна удовлетворять функция  $\psi$ . Условия, накладываемые на функцию  $\psi(\mathbf{r})$ , должны, конечно, согласовываться с общей интерпретацией волновой функции. Мы вернемся в этой теме в гл. IV. Потребуем здесь, чтобы функция и ее частные производные первого порядка были *непрерывными* и *ограниченными* функциями во всем пространстве.

В этом случае можно доказать справедливость следующих результатов, которые мы примем как данные, но будем иметь возможность проверить их на многочисленных примерах.

а) Если  $E < 0$ , то уравнение (36) имеет решения только при некоторых определенных значениях  $E$ , образующих *дискретный спектр*. Собственная функция для любого собственного значения (или каждая функция, если их несколько) обращается в нуль на бесконечности. Точнее говоря, интеграл  $\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ , распространенный на все конфигурационное пространство, сходится. Согласно статистической интерпретации это значит, что вероятность найти частицу на бесконечности равна нулю, частица остается локализованной в конечной области пространства. Говорят, что частица находится в *связанном состоянии*.

б) Если  $E > 0$ , то уравнение (36) может иметь решения при любых положительных значениях  $E$ . Говорят, что положительные энергии образуют *непрерывный спектр*. Соответствующие собственные функции не обращаются в нуль на бесконечности, их асимптотическое поведение аналогично поведению плоской волны  $e^{ikr}$ . Точнее говоря, модуль  $|\psi(\mathbf{r})|$  стремится к конечной постоянной или осциллирует между значениями, из которых по крайней мере одно отлично от нуля. Частица не остается локализованной в конечной области. Волновые функции этого типа служат для описания задач столкновения; говорят, что мы имеем дело с частицей в *несвязанном состоянии*, или в стационарном состоянии рассеяния.

Таким образом, мы получаем первый фундаментальный результат: квантование уровней энергии связанных состояний, т. е. один из самых впечатляющих экспериментальных фактов,

обусловивших крушение классической теории. Определение квантованных уровней энергии представляется здесь как задача нахождения собственных значений. Решение этой задачи с наибольшей возможной степенью точности является одной из центральных задач волновой механики. Для некоторых особенно простых форм гамильтониана задача может быть решена строго. Именно таким является случай атома водорода (мы рассмотрим его подробно в гл. XI), когда уровни энергии оказываются собственными значениями оператора  $[-(\hbar^2/2m)\Delta - e^2/r]$ . Получаемый спектр совпадает с тем, который предсказывала старая квантовая теория; мы уже имели случай подчеркнуть удивительное совпадение этого спектра с экспериментальными данными. В более сложных ситуациях следует использовать различные приближенные методы. Но во всех случаях, когда удалось вычислить спектр энергий с достаточной степенью точности, согласие с опытом оказалось настолько хорошим, насколько этого вообще можно было ожидать от нерелятивистской теории.

Сама собственная функция  $\psi_E$  может быть подвергнута в определенной мере экспериментальной проверке. Действительно, собственные функции дискретного спектра используются при вычислениях различных наблюдаемых величин, например, вероятностей квантовых переходов. Что же касается собственных функций непрерывного спектра, то их асимптотическая форма непосредственно связана с эффективными сечениями, характеризующими явления рассеяния, что будет подробно выяснено в дальнейшем. В области нерелятивистской атомной физики до сих пор не было обнаружено ни одного случая расхождения между предсказаниями волновой механики и экспериментальными данными.

## ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. В эксперименте пытаются наблюдать за движением электрона по круговой боровской орбите атома водорода, измеряя последовательные положения электрона с помощью достаточно жестких рентгеновских лучей.

Оценить порядок величины передачи кинетической энергии электрону  $\Delta T$  при столкновении с рентгеновским фотоном в зависимости от длины волны последнего. Чтобы можно было наблюдать движение вдоль орбиты, необходимо, во всяком случае, чтобы  $\lambda$  была значительно меньше радиуса орбиты. Сравнить в этом случае  $\Delta T$  с расстоянием между соседними уровнями. Что можно сказать о возможности наблюдения боровских орбит?

2. В релятивистской механике полная энергия  $E$  и импульс  $p$  свободной частицы с массой покоя  $m$  и скоростью  $v$  равны соответственно 
$$\frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

и  $\frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ . Проверить, что уравнения движения могут быть записаны в гамильтоновой форме, если в качестве функции Гамильтона взять величину  $H = E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ .

Получить равенство скорости этой частицы и групповой скорости  $v_g$  ассоциированной волны де Бройля. Вычислить фазовую скорость  $v_\varphi$  этой волны; показать, что она превосходит скорость света  $c$  и что  $v_g v_\varphi = c^2$ .

3. Проверить обоснованность классического описания движения атома в двухатомной молекуле. Для этого, предполагая, что атом совершает гармонические колебания с круговой частотой  $\omega$  и средней кинетической энергией порядка  $\frac{1}{2}kT$ , сравнить среднюю длину волны атома с амплитудами этих колебаний. Рассмотреть сначала случай молекулы водорода в условиях обычных температур:  $T = 300^\circ\text{K}$ ,  $kT = 0,025 \text{ эв}$ ,  $\hbar\omega = 0,5 \text{ эв}$ , а затем случай молекулы из тяжелых атомов с массой в 200 масс водорода, предполагая, что возвращающая сила в обоих случаях одинакова. Сделать это для  $T = 300^\circ\text{K}$  и  $T = 10^\circ\text{K}$ .

4. Электрон движется по круговой траектории в постоянном магнитном поле  $\mathcal{H}$ . Применить для этого вращательного движения условие резонанса де Бройля. Показать, что кинетическая энергия электрона квантуется, уровни энергии эквидистантны и расстояние между ними равно  $(e\hbar/mc)\mathcal{H}$  — этот результат отличается от результата строгой квантовой теории только смещением всех уровней на величину  $(e\hbar/2mc)\mathcal{H}$ . Вычислить радиус орбит, количество движения и кинетическую энергию квантованных траекторий для поля в  $10^4 \text{ гс}$ . Сравнить радиус орбиты с квантовым числом единица с радиусом боровской орбиты атома водорода в основном состоянии. *Примечание.* Следует различать импульс  $p$  и количество движения  $mv$  в этой задаче. Если  $A$  есть векторный потенциал поля, то

$$p = mv + (e/c)A.$$

5. Используя тот факт, что произвольная волна может рассматриваться как суперпозиция плоских волн, показать, что в отсутствие поля волна вещества  $\Psi(\mathbf{r}_2, t_2)$  в точке  $\mathbf{r}_2$  в момент  $t_2$  может быть получена из значений  $\Psi(\mathbf{r}_1, t_1)$ , взятых в момент  $t_1$ , с помощью операции

$$\Psi(\mathbf{r}_2, t_2) = \int K(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1; t_2 - t_1) \Psi(\mathbf{r}_1, t_1) d\mathbf{r}_1, \quad (1)$$

где

$$K(\rho; \tau) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{\frac{i}{\hbar}(p\rho - E\tau)} dp.$$

В этом выражении  $E$  как функция  $p$  равна энергии соответствующей частицы с импульсом  $p$ . Показать, что для нерелятивистской частицы с массой  $m$

$$K(\rho; \tau) = e^{-\frac{3\pi i}{4}} \left( \frac{m}{2\pi\hbar\tau} \right)^{3/2} e^{i \frac{m\rho^2}{2\hbar\tau}}.$$

Вывести отсюда, что главный вклад в интеграл (1) дает область, около точки  $r_2$  с линейным размером порядка  $\left(\frac{2\hbar(t_2 - t_1)}{m}\right)^{1/2}$ .

6. Как изменить метод решения предыдущей задачи, чтобы он мог быть применен к случаю частицы в одном измерении? Пользуясь этим методом, найти волновую функцию в момент времени  $t$  свободной нерелятивистской частицы массы  $m$ , если волновая функция в момент  $t = 0$  есть

$$\psi(x, 0) = (\pi\xi_0^2)^{-1/4} e^{ip_0 x/\hbar} e^{-x^2/2\xi_0^2}.$$

Интенсивность (квадрат модуля) этой волны в момент  $t = 0$  выражается гауссовой кривой ширины  $\xi_0$ . Показать, что форма кривой интенсивности остается гауссовой в любой последующий момент времени, но ширина кривой увеличивается согласно закону

$$\xi = \xi_0 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \xi_0^4}\right)^{1/2}$$

(расплывание волнового пакета).