

Рис. 1.1.

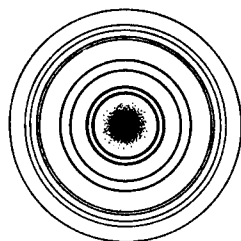


Рис. 1. 2. Дифракция пучка электронов на тонкой поликристаллической серебряной пластинке.

1927 г. Помимо них крупный вклад в разработку теории внесли В. Паули, П. Дирак и еще большая группа физиков разных стран. В эту группу, в частности, входят советские ученые В. А. Фок и Л. Д. Ландау.

§ 2. ФУНКЦИЯ СОСТОЯНИЯ

2.1. Необходимость вероятностно-статистической интерпретации волн де Бройля. Продолжим обсуждение волновых свойств микро-частиц. Как показывает опыт, можно наблюдать дифракцию электронов при отражении пучка этих частиц от кристалла. Однако при выяснении принципиальных особенностей поведения частиц нет необходимости изучать это сложное явление во всех его деталях и подробностях. Можно остановиться на дифракционной решетке более простого типа или даже ограничиться исследованием прохождения электронов через одно отверстие в диафрагме. Правда, такой опыт нельзя поставить в действительности. Но если мы будем при теоретическом анализе некоторой физической ситуации исходить только из твердо установленных закономерностей, то наши выводы не разойдутся с истиной. Мысленные эксперименты широко используются в физике. Как правило, они представляют собой весьма идеализированные схемы настоящих опытов. Это позволяет освободиться от несущественных моментов и сосредоточить внимание на главном — на том, что требуется изучить в первую очередь.

Итак, допустим, что пучок частиц падает на диафрагму с маленьким круглым отверстием посередине. Для определенности будем говорить об электронах. За диафрагмой и параллельно ей поставим экран (рис. 1.1). Опираясь на гипотезу де Бройля, можно предсказать, что произойдет, если электроны пройдут через отверстие. Предположим, что размеры отверстия соизмеримы с длиной волны де Бройля. Тогда должна наблюдаться дифракция волн. Если вместо экрана установить фотопластинку, то, выждав нужное для экспозиции время, мы получим дифракционную картину в виде темного круглого центрального пятна и бледных концентрических колец вокруг него. Реальные опыты по дифракции электронов при прохождении через тонкую поликристаллическую фольгу дают

похожую дифракционную картину, изображенную на рисунке 1.2. В этом проявляется волновая природа электрона.

Поставим вопрос: обладает ли волновыми свойствами отдельная частица или только весь пучок в целом?

Большинство физиков с самого начала полагали, что волновые свойства присущи каждому электрону в отдельности. Это подтверждено прямым экспериментом, поставленным в 1949 г. советскими учеными Л. М. Биберманом, П. П. Сушкиным и В. А. Фабрикантом. Наблюдалось прохождение электронов через кристалл, играющий роль дифракционной решетки. Частицы проходили через установку поочередно в определенный интервал времени. После длительной экспозиции была получена такая же дифракционная картина, как и при прохождении многих электронов одновременно через кристалл.

Далее закономерен следующий вопрос: дает ли каждый электрон всю дифракционную картину или он создает почернение только в одной точке фотопластинки?

Макроскопическая электромагнитная волна, например, дифрагируя на отверстии, разделяется на ряд пучков, идущих в различных направлениях и соответствующих максимумам дифракционной картины. Энергия волны дробится на несколько частей. Что же происходит с отдельной микрочастицей?

Если электрон — волна, то он должен в аналогичной ситуации разделиться на части, но если электрон — частица, сохраняющая свою целостность при прохождении отверстия, то разделиться на части он не может. Взаимодействие с диафрагмой может изменить направление его движения, но после прохождения отверстия электрон попадает в одну конкретную точку экрана.

Ответ должен дать реальный эксперимент: нужно, чтобы экран представлял собой совокупность детекторов, улавливающих отдельные частицы и измеряющих их массы и заряды. Такие опыты технически возможны и дают однозначный результат: заканчивая движение, каждая частица попадает в определенную точку экрана. Поэтому и в нашем мысленном опыте, где рассматривалось прохождение частиц через отверстие в диафрагме, каждый отдельный электрон будет вызывать почернение фотопластинки на небольшом участке.

Одна частица не создает дифракционной картины. Всю картину можно получить только благодаря попаданию на пластинку пучка частиц. Электрон не делится на части и полностью сохраняет свою целостность, т. е. свой заряд, массу и другие характеристики.

В этом проявляются корпускулярные свойства микрочастиц. В то же время налицо и проявление волновых свойств. Электрон после прохождения отверстия никогда не попадает на экран в том месте, где должен быть минимум дифракционной картины. Он может оказаться в точках экрана только вблизи дифракционных максимумов. При этом указать, в каком именно конкретном направлении полетит данная частица, в какую точку экрана она попадет, заранее нельзя.

Если взять много частиц, то по почернению фотопластинки об-

наружится закономерность: большая часть электронов попадает в область главного максимума; количество частиц, приходящихся на другие максимумы, убывает по мере возрастания номера (порядка) максимума. Для отдельной частицы нельзя указать конкретную точку, но можно предсказать вероятность ее попадания в то или иное место экрана.

Из результата опыта вытекает правило: *вероятность попадания электрона пропорциональна интенсивности волны, т. е. квадрату амплитуды волнового поля в данном месте экрана*. Обобщая это положение, приходим к вероятностно-статистическому толкованию природы волн, связанных с микрочастицами: *закономерность распределения микрочастиц в пространстве имеет статистический характер, т. е. однозначные выводы можно сделать для большого количества частиц; для одной частицы можно определить только вероятность попадания в определенную область*.

Вероятностно-статистическое толкование волновых свойств микрочастиц в известной мере разрешает противоречие в сочетании их корпускулярных и волновых свойств. Волны, связанные с микрочастицами, не представляют собой материального волнового поля, амплитуда которого была бы измеряемой физической величиной (как это, например, имеет место для электромагнитного поля). Функция $\psi(r, t)$, выражающая волну, позволяет при таком толковании определить вероятность того или иного положения точечной частицы в пространстве.

Надо отметить, что волновое поле микрочастицы или системы микрочастиц только в случае невзаимодействующих микрочастиц есть волна де Бройля (1.15). При взаимодействии частиц между собой и с макроскопическими телами волновое поле иное и выражается разнообразными функциями координат и времени. Вероятностно-статистическое же толкование функции $\psi(r, t)$ применяется всегда.

2.2. Невозможность последовательного использования классических представлений о движении частицы. Хотя волны, связанные с микрочастицами, не являются материальными, волновые свойства микрочастиц вполне объективны и непосредственно наблюдаемы. Вид волнового поля, связанного с частицей, определяется ее свойствами и наличием других микроскопических и макроскопических объектов, с которыми частица взаимодействует.

Попробуем установить, какой будет дифракционная картина, если пучок электронов падает на диафрагму с двумя отверстиями. Казалось бы, что возможен такой ответ: каждый электрон проходит через одно отверстие; поэтому на экране появится дифракционная картина, которая получится в результате простого наложения картин дифракции на первом и втором отверстиях.

Но в действительности ответ иной. Картина, получаемая при дифракции электронов на двух щелях, имеет вид колец, расположенных вокруг центрального максимума. На рисунке 13 изображена соответствующая диаграмма распределения интенсивности. Она напоминает диаграмму дифракции на одном отверстии, только радиусы колец другие.

Такой результат можно понять с волновой точки зрения, если считать, что с электроном связано волновое поле. Тогда дифракция электронов происходит по тем же законам, что и дифракция электромагнитных волн. В нашем мысленном опыте картина должна совпадать с картиной дифракции света на двух отверстиях (при той же длине волны, расположении и размерах отверстий). Однако такой чисто волновой подход не исчерпывает всех сторон опыта в силу наличия корпускулярных свойств у частиц, как об этом говорилось выше. Попробуем представить

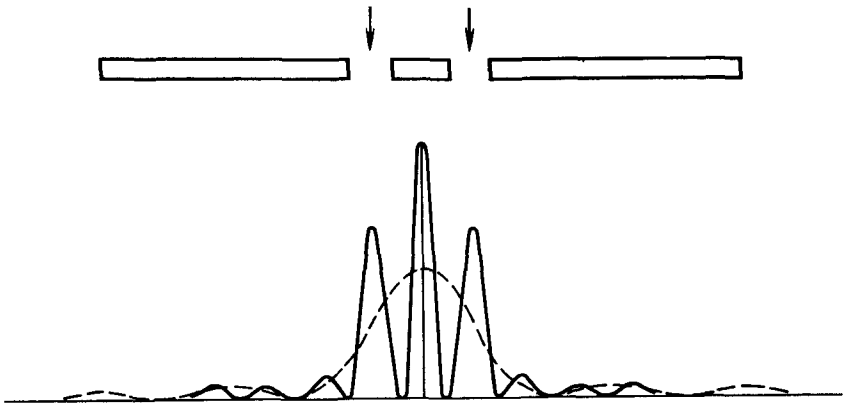


Рис. 1.3. Распределение интенсивности дифракционной картины на двух отверстиях. (Пунктир показывает наложение картин, образованных независимо от каждого отверстия.)

частицу в виде движущейся материальной точки. Результаты опыта с двумя щелями можно объяснить в рамках корпускулярной модели, предположив, что электрон проходит сразу через два отверстия или, проходя через одно отверстие, он каким-то способом «узнает» о существовании другого отверстия, которое сказывается на его движении.

Из рассмотренных мысленных опытов вытекает невозможность последовательно использовать в микромире классических представлений частицы-корпускулы и частицы-волны. Тот и другой подход не позволяет объяснить все стороны явления с единой точки зрения. Классические представления в лучшем случае имеют ограниченную применимость, позволяя в более или менее наглядной форме описать некоторые детали опытов. Но это не означает, что от них следует отказаться полностью.

Мы уже познакомились с единой вероятностно-статистической трактовкой волнового поля микрочастиц. Для описания поведения микрочастиц в квантовой механике выработаны специальные математические средства, подробно изучающиеся далее. Они имеют абстрактный характер и часто лишены наглядности. Между тем человеческое мышление образное, и предмет размышлений считается понятным тогда, когда мы сумеем его представить в достаточно наглядных понятиях и образах. Наглядными же мы считаем те представления, которые привычны нам с детства. Все они имеют корни в окружающем нас мире макроскопических тел. Свойства и движение последних описывает классическая физика. Дуализм корпускулярно-волновых свойств и соответствующая ему вероятностно-статистическая трактовка волн микрочастиц классической наглядностью не обладают. И самое главное здесь заключается в том, что в модели микрочастицы как точечного объекта утеряно основное свойство материальной точки — движение по определенной траектории. В модели же классической волны, применяемой к микрочастице, вместо непрерывного распределения материи в пространстве имеет место ее локализация в точечном объекте — микрочастице.

По этой причине ни модель материальной точки, ни модель волны материальной среды полностью к микрочастице неприменимы. В поведении микрообъектов всегда есть две стороны: корпускулярная и волновая. В одной ситуации поведение частицы сходно с движением или взаимодействием классической корпускулы, в другой — с процессом распространения волны или с картиной стационарного поля. На передний план могут выступать или корпускулярные, или волновые свойства. Взятые в диалектическом единстве корпускулярные и волновые свойства частиц дополняют друг друга, давая в совокупности полное представление о поведении микрочастицы. В этом состоит один из аспектов выдвинутого Н. Бором принципа дополнительности.

В квантовой механике необходимый синтез корпускулярных и волновых представлений достигается через использование понятия о волновой функции.

2.3. Волновая функция (функция состояния). После знакомства с корпускулярными и волновыми свойствами микрочастиц ясно, что для описания механического состояния микрочастицы непригодны те методы, которые используются в классической физике. В квантовой механике нужно применять для описания состояния новые специфические средства. Важнейшим из них является понятие о волновой функции, или функции состояния (она называется также ψ -функцией).

Функция состояния есть математический образ того волнового поля, которое следует связывать с каждой частицей. Например, согласно гипотезе де Бройля со свободной частицей связывается плоская монохроматическая волна (см. формулу (1.15)). В общем случае это поле может иметь весьма сложный вид, и оно изменяется с течением времени. Волновая функция зависит от параметров микрочастицы и от тех физических условий, в которых последняя находится.

Далее мы увидим, что через волновую функцию достигается наиболее полное описание механического состояния микрообъекта, какое только возможно в микромире. Зная волновую функцию, можно предсказать, какие значения всех измеряемых величин будут наблюдаться на опыте и с какой вероятностью. Функция состояния несет всю информацию о движении и квантовых свойствах частиц, поэтому говорят о задании с ее помощью квантового состояния.

Сейчас начнем с важнейшего вопроса о том, как задается в квантовой механике положение частицы в пространстве.

Пусть $\psi(x, y, z, t)$ — известная волновая функция. Тогда вероятность обнаружения частицы в момент времени t в элементарном объеме dV около точки с координатами x, y, z определяется формулой

$$dW = |\psi|^2 dV. \quad (2.1)$$

При этом частица представляется в виде точки, в которой сосредоточены ее масса, импульс и энергия.

Из уравнения (2.1) следует

$$\frac{dW}{dV} = w = |\psi|^2. \quad (2.2)$$

Квадрат модуля волновой функции есть *плотность вероятности* для местонахождения частицы (поэтому ψ -функцию называют также амплитудой вероятности).

В определениях (2.1) и (2.2) и заключен физический смысл функции состояния, ибо посредством измерений можно найти только величины dW и w .

Функция состояния $\psi(x, y, z, t)$ является комплексной: квадрат

ее модуля выражается формулой

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi,$$

где звездочка обозначает комплексное сопряжение.

Комплексная функция всегда может быть представлена в виде

$$\psi = R(x, y, z, t) e^{i\alpha(x, y, z, t)}. \quad (2.3)$$

Здесь $R(x, y, z, t)$ — модуль функции, а $e^{i\alpha(x, y, z, t)}$ называется фазовым множителем.

Из формул (2.1) и (2.3) следует, что волновая функция определена неоднозначно, а с точностью до произвольного фазового множителя. Действительно, умножение функции на экспоненту $e^{i\beta}$ изменяет фазу комплексной функции $\psi(x, y, z, t)$, но не ее модуль, что не приводит к изменению измеряемой величины w .

Указанную особенность функции состояния не следует рассматривать как недостаток теории. Всегда нужно помнить, что волновая функция есть математический объект. Ее даже нельзя найти экспериментально прямым измерением. Непосредственно измеримой характеристикой является величина $|\psi|^2$, а она задана однозначно. Произвол в фазовом множителе не приводит ни к каким наблюдаемым эффектам и поэтому является физически несущественным. (Здесь мы говорим только о положении микрочастицы в пространстве.)

В соответствии с определением (2.1) можно по известной ψ -функции рассчитать вероятность обнаружения частицы в любом конечном объеме V . Для этого следует разбить конечный объем на малые элементарные объемы dV , найти для них вероятности dW и по теореме о сложении вероятностей несовместимых событий сложить их:

$$W_V = \int_V |\psi|^2 dV. \quad (2.4)$$

Формула (2.4) вместе с формулой (2.2) лежит в основе реальных измерений вероятности. Однако мы не отметили еще одно необходимое свойство ψ -функции. Если провести интегрирование в формуле (2.4) по всему пространству (или по тому объему, в котором нахождение частицы — достоверный факт), то интеграл должен быть равен единице, ибо обнаружение частицы здесь есть событие достоверное; вероятность его равна единице:

$$\int |\psi|^2 dV = 1. \quad (2.5)$$

Равенство (2.5) называется *условием нормировки* функции состояния. Полезно заметить, что в процессе теоретического отыскания ψ -функция часто оказывается ненормированной, т. е. интеграл (2.5) равен не единице, а некоторому числу N . В таком случае легко находится нормированная функция: ψ -функция снабжается необходимым коэффициентом $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

Определения (2.1), (2.2), формула (2.4) и условие (2.5) отражают вероятностно-статистический смысл волновой функции. В связи с физическим толкованием возникают ограничения, накладываемые

на ψ -функцию: она должна быть однозначной, непрерывной и квадратично-интегрируемой функцией. Последнее требование означает ограниченность интеграла $\int |\psi|^2 dV$, взятого по всему пространству: без этого нельзя добиться выполнения равенства (2.5). По этой же причине на ψ -функцию обычно накладывают условие ограниченности: $|\psi| < \infty$. Во многих случаях ограниченность означает, что

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |\psi| = 0,$$

причем $|\psi|$ достаточно быстро затухает на бесконечности.

Пример 2.1. Квадратично-интегрируемая функция на конечном промежутке.

Рассмотрим функцию $\psi = C \sin \frac{\pi x}{a}$, заданную на отрезке $(0, a)$ оси Ox . Вычисления показывают, что

$$\int_0^a C^2 \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = \frac{a}{2} C^2,$$

т. е. это ограниченная величина.

Пример 2.2. Квадратично-интегрируемая функция на бесконечном промежутке.

Задана функция $\psi = C e^{-\frac{r}{a}}$, где C и a — константы, а r — модуль радиус-вектора точки пространства. В этом случае

$$\int_0^{\infty} C e^{-\frac{2r}{a}} dr = \frac{a^3}{4} C^2.$$

Пример 2.3. Нормировка функций.

Условие нормировки

$$\int_0^a C^2 \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = 1$$

в примере (2.1) приводит к равенству $C = \sqrt{\frac{2}{a}}$. Теперь функция

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}$$

нормирована на единицу.

Аналогично для примера 2.2 находим

$$C = \frac{2}{a^{3/2}}$$

и

$$\psi = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}}.$$

Пример 2.4. Использование плотности вероятности для оценки размеров атома.

Зависимость плотности вероятности местоположения электрона от расстояния до ядра в атоме водорода выражается формулой

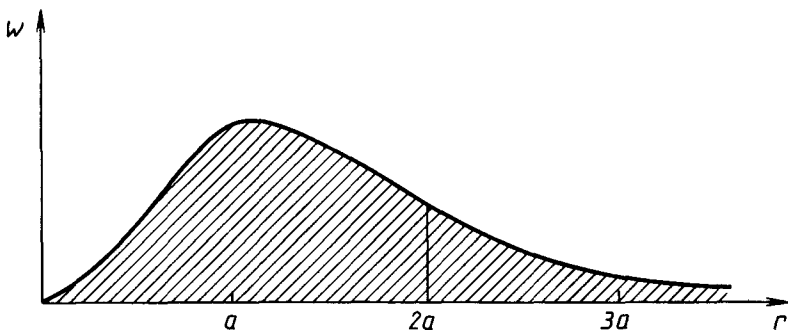


Рис 1.4

$$\omega(r) = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\frac{2r}{a}} r^2.$$

Ход кривой показан на рисунке 1.4.

Из графика видно, что наибольшая вероятность соответствует расстоянию электрона до ядра: $r = a = 0,5 \cdot 10^{-10}$ м. Имеется отличная от нуля вероятность обнаружить электрон и на больших расстояниях. Это значит, что резкой границы у атома нет, но вероятность обнаружения быстро падает по мере роста r при $r > a$.

Чтобы определить вероятность нахождения электрона в сфере, ограниченной радиусом $2a$, необходимо определить площадь заштрихованной части графика до точки $r = 2a$ и найти ее отношение ко всей площади под кривой $\omega(r)$. Приблизительно получается 0,7. Обсудим смысл этой величины.

Для применения статистики нужно взять много атомов, находящихся в одном и том же состоянии, например 10^6 атомов. В этом случае наблюдается определенная закономерность: в $0,7 \cdot 10^6$ атомов в указанном объеме электроны обнаруживаются, а в остальных $0,3 \cdot 10^6$ атомов электроны обнаруживаются вне этого объема. В результате относительная погрешность предсказания тем меньше, чем больше берется атомов. Если же взят один атом или их небольшое число, то задание вероятности не позволяет однозначно указать, находится электрон в заданном объеме или нет.

Существует также наглядная *временная* трактовка рассмотренного выше распределения вероятности для одного атома: электрон из какого-нибудь промежутка времени t (достаточно большого по сравнению с некоторым характерным временем — «периодом обращения» вокруг ядра) проводит $0,7t$ внутри указанного объема, а $0,3t$ — вне его.

Таким образом, размеры атома оцениваются по размерам его *электронного облака* — области пространства с заметно отличной от нуля вероятностью обнаружения электрона. В ряде случаев оказывается возможным при взаимодействии электронов считать их заряды непрерывно распределенными по облаку с плотностью:

$$\rho = -e\omega,$$

где $-e$ — электрический заряд электрона.

Разобранный пример 2.4 в какой-то мере отражает фактический предел той степени наглядности, которая возможна при описании движения частицы с помощью волновой функции. В рамках квантовой механики, в сущности, бессмысленно задавать следующие вопросы: в какой точке находится частица, движущаяся с определенной скоростью? По какой траектории происходит ее движение? Чему равно в данный момент значение ее координаты x ? Природа такова, что на микроскопическом уровне достоверных ответов на такие вопросы получить нельзя. Можно только указать распределение вероятностей для координат и его изменение со временем, если плотность вероятности зависит от времени.

2.4. Принцип суперпозиции состояний. Своеобразие описания состояний и движений микрочастиц с помощью ψ -функции проявляется

ся в правилах сложения волновых функций, выражающихся принципом суперпозиции состояний.

Принцип суперпозиции в том или ином виде характерен для всех фундаментальных теорий. Так, в классической механике он приводит к векторному сложению ускорений материальной точки, вызванных одновременным действием нескольких независимых сил. В электродинамике имеет место закон векторного сложения напряженности полей, созданных различными источниками. Допустимы и обратные действия разложения сил и напряженностей на составляющие.

Принцип суперпозиции в квантовой механике состоит в следующем: *пусть в данных условиях возможны различные состояния частицы (или системы частиц), описываемые волновыми функциями ψ_1, ψ_2, \dots , тогда возможно и состояние частицы (системы), описываемое ее линейной комбинацией:*

$$\psi = \sum_i C_i \psi_i, \quad (2.6)$$

где C_i — комплексные числа, удовлетворяющие условию

$$\sum_i |C_i|^2 = 1.$$

Равенство (2.6) допускает и несколько иную физическую интерпретацию, которую мы будем считать второй частью содержания принципа суперпозиции: *пусть в данных условиях частица (система) описывается волновой функцией ψ и при этом справедливо равенство (2.6). Тогда частица (система) с вероятностью W_i , равной $|C_i|^2$, находится (может быть обнаружена) в состоянии ψ_i .* Согласно этой формулировке, которая, по существу, является обратным чтением равенства (2.6), состояния ψ_i при данных условиях образуют альтернативный ряд состояний и частица находится в том или ином из них с определенной вероятностью W_i .

Покажем, в каком отношении между собой находятся волновая природа микрочастиц и принцип суперпозиции состояний. Для этого снова обратимся к мысленному опыту и рассмотрим дифракцию частиц на двух отверстиях. Причем опыт произведем следующим образом.

Пусть сначала открыто верхнее отверстие и закрыто нижнее — получается одна дифракционная картина на экране. Затем закроем верхнее отверстие и откроем нижнее — получим другую дифракционную картину. Третья дифракционная картина получается при обоих открытых отверстиях. Если бы речь шла не о микрочастицах, а о движущихся по законам классической механики малых телах — корпскулах, то каждое тело проходило бы через одно отверстие вне зависимости от наличия другого. Поэтому дифракционная картина при обоих открытых отверстиях была бы простым наложением друг на друга картин дифракций, полученных на каждом из отверстий по отдельности.

Однако для микрочастиц опыт обнаруживает дифракцию на двух отверстиях с картиной распределения максимумов и минимумов, от-

личной от простого наложения картин дифракции только от первого отверстия и только от второго. Это новая дифракционная картина.

Результаты опыта в квантовой механике объясняются с помощью принципа суперпозиции. Пусть φ_1 — функция состояния, соответствующая одному открытому отверстию, а φ_2 — другому. Плотности вероятности, определяющие дифракционную картину в каждом случае, определяются функциями

$$\omega_1 = \varphi_1^* \varphi_1, \quad \omega_2 = \varphi_2^* \varphi_2.$$

При обоих открытых отверстиях функция состояния находится как сумма φ_1 и φ_2 :

$$\varphi = \varphi_1 + \varphi_2.$$

Но теперь ей соответствует новое распределение вероятности:

$$\omega = \varphi^* \varphi = \varphi_1^* \varphi_1 + \varphi_2^* \varphi_2 + \varphi_1^* \varphi_2 + \varphi_2^* \varphi_1,$$

причем

$$\omega \neq \omega_1 + \omega_2.$$

Именно потому, что складываются волновые функции, а не вероятности, и возникает новая дифракционная картина — результат интерференции волн φ_1 и φ_2 .

Сложение волновых функций, а не вероятностей — важнейшая особенность суперпозиции состояний в микромире. Благодаря этому волновая функция является исходным математическим средством описания состояния микрочастиц.

Видоизменим опыт по наблюдению дифракции электронов на диафрагме с двумя отверстиями. Поставим за каждым из них источник света. Регистрируя фотоны, рассеянные на частицах, мы в принципе можем установить, через какую щель прошел электрон, попавший затем в данную точку экрана.

В результате оказывается, что каждый электрон проходит только через одно отверстие. Но и картина дифракции на экране теперь иная: не та, что была в опыте, где не фиксировалось, через какое отверстие прошел электрон. Теперь дифракционная картина представляет собой простое наложение картин дифракции на каждом отдельном отверстии.

Причина изменения картины состоит в том, что в новых условиях электроны взаимодействуют не только с диафрагмой, но и с детекторами, регистрирующими прохождение щели электронами. (Второй опыт не позволяет ответить на вопрос: через какую щель прошел электрон в условиях первого опыта?)

Обсудим результаты опытов, применяя принцип суперпозиции состояний. В опыте с двумя отверстиями без детекторов альтернативные события — прохождение того или иного отверстия — неразличимы, и вероятность попадания электрона в некоторую точку экрана находится по формуле

$$\omega_1 = |\varphi_1 + \varphi_2|^2.$$

В опыте с детекторами альтернативы различаются н

$$\omega_2 = |\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2,$$

так как интерференции волновых функций нет. (Условия для интерференции нарушены столкновениями электронов с фотонами при работе детекторов.)

Приведенные результаты наглядно свидетельствуют, что волновая функция содержит в себе лишь ту информацию, которая соответствует наличному взаимодействию. В опыте с двумя щелями не предусмотрено получение информации о прохождении электроном определенного отверстия, и картина соответствует взаимодействию

с обоими отверстиями. В опыте с детекторами отверстие специально выделяется посредством дополнительного взаимодействия, и картина соответствует взаимодействию с обоими отверстиями в отдельности.

§ 3. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА — ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

3.1. Вид уравнения и общие свойства его решений. В классической механике кинематическое уравнение

$$\vec{r} = \vec{r}(t)$$

описывает механическое состояние материальной точки в каждый момент времени. В квантовой механике ему следует сопоставить волновую функцию

$$\psi = \psi(\vec{r}, t).$$

Важная задача классической механики — расчет движения материальной точки под действием заданных сил, т. е. нахождение кинематического уравнения. Она решается с помощью основного уравнения классической динамики — уравнения второго закона Ньютона. Аналогичным образом функция состояния (и-изменение функции состояния) микрочастицы, движущейся в заданном силовом поле, находится с помощью *основного уравнения квантовой механики — уравнения Шредингера.*

Оставляя в стороне историю его открытия, запишем уравнение Шредингера для рассматриваемого случая сразу в готовом виде:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(x, y, z, t) \psi. \quad (3.1)$$

Это дифференциальное уравнение в частных производных. В нем i — мнимая единица; Δ — оператор Лапласа; m — масса частицы; $\psi(x, y, z, t)$ — волновая функция; $U(x, y, z, t)$ — потенциальная энергия частицы во внешнем силовом поле. Функция $U(x, y, z, t)$ берется из классической механики для каждого силового поля.

Конкретные задачи различаются тем или иным видом зависимости потенциальной энергии от координат и времени. При заданной функции $U(x, y, z, t)$ ищется общее решение уравнения Шредингера (3.1). Решение содержит некоторые произвольные функции координат и времени. Эти произвольные функции находятся и исключаются из общего решения в конкретных случаях с помощью начальных и граничных условий. Начальное условие

$$\psi(x, y, z, 0) = f(x, y, z)$$

определяет вид ψ -функции во всех точках пространства в момент времени $t=0$. В свою очередь граничные условия задают значения волновой функции во все моменты времени на границах некоторой области пространства или на бесконечности. Совокупность начальных и граничных условий вместе с условием нормиров-