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:

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

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 нормировки определяет волновую функцию — теперь уже частное решение уравнения Шредингера.

После того как ψ-функция найдена, возникает возможность статистически предсказать поведение микрочастицы. Так преломляется в микромире принцип причинности, известный из классической физики: *однозначная динамическая закономерность существует для ψ-функции, а через нее определяется статистическая закономерность для микрочастиц.*

Основное уравнение квантовой механики является линейным и однородным дифференциальным уравнением в частных производных. Отсюда следует важное в физическом плане заключение: если функции φ_i — некоторые частные решения уравнения, то любая их линейная комбинация тоже возможное решение уравнения. Это положение полностью согласуется с принципом суперпозиции, изложенным в § 2, п. 4. Можно сказать, что принцип суперпозиции есть следствие линейности и однородности уравнения Шредингера. Свойства уравнения (3.1) проявляются также в том, что его решения оказываются определенными с точностью до произвольного постоянного множителя. Эта неоднозначность устраняется с помощью условия нормировки (2.4). (Но решение и после нормировки можно умножить на произвольный постоянный фазовый множитель.)

По причинам, указанным выше, физический смысл имеют только непрерывные, однозначные и квадратично-интегрируемые решения уравнения Шредингера.

3.2. Стационарные состояния. Очень важным в теоретическом и практическом отношениях является случай движения частиц в стационарном потенциальном поле, когда потенциальная энергия не зависит от времени: $U = U(x, y, z)$. Если это условие выполняется, то уравнение Шредингера допускает разделение временной и пространственных переменных: уравнение распадается на два независимых уравнения.

Для доказательства последнего утверждения сделаем подстановку

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

в уравнении (3.1). Получаем

$$i\hbar\varphi \frac{df}{dt} = f\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\varphi. \tag{3.2}$$

Разделим уравнение (3.2) на произведение φf. Оно примет вид

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = \frac{1}{\varphi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\varphi. \tag{3.3}$$

Левая и правая части равенства (3.3) зависят от разных независимых переменных. Поэтому соотношение (3.3) выполняется тогда и только тогда, когда указанные части равны одной и той же постоянной. Полагаем

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = E, \tag{3.4}$$

$$\frac{1}{\varphi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U\right)\varphi=E. \qquad (3.5)$$

Теперь исходное уравнение распалось на два независимых уравнения для временной и координатной частей волновой функции. Уравнение (3.4) легко решается. Его общее решение имеет вид

$$f=Ce^{-i\omega t}, \quad \omega=\frac{E}{\hbar}. \qquad (3.6)$$

Обратим внимание на то обстоятельство, что зависимость от времени для функции состояния частицы, находящейся в стационарном потенциальном поле, всегда одна и та же: функция f не зависит от вида поля.

Уравнение (3.5) называется *стационарным уравнением Шредингера* или *уравнением Шредингера без времени*. Его обычно записывают в виде

$$\Delta\varphi+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(x, y, z)]\varphi=0. \qquad (3.7)$$

При такой записи отчетливо видно, что параметр разделения переменных E имеет размерность энергии. Его отождествляют с полной механической энергией частицы. (Доказательство этого положения будет дано позднее.) В постоянном поле энергия является сохраняющейся во времени величиной: E — константа и не зависит от времени.

Состояния частицы с *определенной* энергией называются *стационарными*. Они описываются волновыми функциями вида

$$\psi(x, y, z, t)=\varphi(x, y, z)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \qquad (3.8)$$

В таких состояниях плотность вероятности для положения частицы оказывается постоянной, не изменяющейся со временем: $w=|\psi|^2=$ $=|\varphi|^2$.

Пример 3.1. **Стационарное кулоновское поле.**

Рассмотрим электрон в поле ядра атома водорода. Потенциальная энергия электростатического взаимодействия электрона с ядром выражается формулой

$$U(x, y, z)=-\frac{\varkappa e^2}{r},$$

где r — расстояние от электрона до ядра. Это стационарное поле: в нем возможны состояния с определенной энергией. Так уравнение Шредингера приводит к следствию, совпадающему с постулатом Бора о стационарных состояниях.

Полезно заметить, что в нестационарных состояниях определенного значения энергия не имеет.

3.3. Плотность потока вероятности. Движению микрочастицы соответствует перераспределение плотности вероятности $|\psi|^2$ в пространстве. Вероятность как бы перетекает из одних мест в другие. Движение частиц в пространстве характеризуется с помощью специальной величины — плотности потока вероятности, которую можно найти, опираясь на основное уравнение квантовой механики.

Определим, как изменяется величина $w=|\psi|^2$ с течением времени:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{3.9}$$

Из уравнения Шредингера следует выражение для производной:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\Delta\psi-\frac{i}{\hbar}U\psi.$$

Выполняя операцию комплексного сопряжения, имеем

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{i\hbar}{2m}\Delta\psi^*+\frac{i}{\hbar}U\psi^*.$$

Подстановка производных $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ и $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$ в формулу (3.9) приводит к выражению

$$\frac{\partial w}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\Delta\psi-\psi\Delta\psi^*). \tag{3.10}$$

Легко проверить, что справедливо тождество

$$\nabla(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)=\psi\Delta\psi^*-\psi^*\Delta\psi.$$

Поэтому формула (3.10) может быть представлена в виде

$$\frac{\partial w}{\partial t}=-\operatorname{div}\vec{j}, \tag{3.11}$$

где

$$\vec{j}=\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi). \tag{3.12}$$

Эта величина и есть вектор плотности потока вероятности, так как выражение (3.11) совпадает по форме с законом непрерывности тока (см. ч. III, (1.6)).

Смысл названия становится ясным, если проинтегрировать уравнение (3.11) по некоторому объему V и применить теорему Гаусса. С одной стороны,

$$\int\limits_V\frac{\partial w}{\partial t}dV=\frac{d}{dt}\int\limits_V|\psi|^2dV=\frac{dW_V}{dt},$$

а с другой —

$$\int\limits_V\operatorname{div}\vec{j}\,dV=\oint\limits_S\vec{j}\,d\vec{S}.$$

Получаем равенство

$$\frac{dW_V}{dt}=-\oint\limits_S\vec{j}\,d\vec{S}. \tag{3.13}$$

Отсюда следует, что убыль вероятности нахождения частицы в объеме V равна потоку вектора $\vec{j}$ через поверхность, ограничивающую объем.

В физике уравнения типа (3.11) выражают закон сохранения какой-нибудь величины. В данном случае речь идет о вероятности. В силу условия нормировки количество вероятности во всем пространстве сохраняется, вероятность лишь может перераспределяться между отдельными областями.

3.4. Закон сохранения числа частиц. Сохранение вероятности можно трактовать как сохранение числа частиц. В наиболее наглядной форме этот закон выступает, если допустить наличие в пространстве N независимых друг от друга одинаковых микрочастиц, находящихся в одном и том же квантовом состоянии.

Все частицы описываются одной и той же волновой функцией. Если $N \gg 1$, то величина

$$N\,|\psi|^2$$

равна плотности частиц в каждой точке пространства; интеграл

$$N \int_V |\psi|^2\, dV$$

определяет число частиц в объеме V; производная

$$\frac{d}{dt}\Big(N \int_V |\psi|^2\, dV\Big)$$

описывает изменение числа частиц в указанном объеме за единицу времени. Интеграл

$$N \oint_S j\, d\vec{S}$$

равен потоку частиц через поверхность, ограничивающую объем, а вектор $N\vec{j}$ есть плотность потока частиц. Поэтому равенство

$$\frac{d}{dt}\Big(N \int_V |\psi|^2\, dV\Big) = -N \oint_S \vec{j}\, d\vec{S}, \tag{3.14}$$

следующее из соотношения (3.13), выражает закон сохранения числа частиц в процессах, описываемых уравнением Шредингера: *частицы не исчезают и не появляются в любой области пространства, они лишь могут входить в заданную область и выходить из нее.*

Произведение $NjdS$ есть число частиц, проходящих в единицу времени через площадку dS, поставленную перпендикулярно потоку. Отношение $\frac{NjdS}{NdS}$ определяет вероятность прохождения частицей единичной по размерам площадки, поставленной перпендикулярно потоку (за единицу времени). Мы видим, что указанная вероятность равна модулю вектора плотности потока вероятности. Таким образом, этот вектор может содержать непосредственную информацию о движении частицы.

В заключение данного пункта укажем полезное соотношение. Любая комплексная функция может быть записана в виде (2.3):

$$\psi = Re^{i\alpha},$$

где R и α — действительные функции от координат и времени.

Мы предоставляем читателю возможность доказать, что функции состояния (2.3) соответствует вектор плотности потока вероятности:

$$\vec{j} = \frac{\hbar R^2}{m} \operatorname{grad} \alpha. \tag{3.15}$$

Формула (3.15) будет неоднократно использована в дальнейшем.

3.5. Волновая функция свободного движения частицы. Решим уравнение Шредингера для свободной частицы. В микромире частицу считают свободной, если внешние воздействия отсутствуют, т. е. $U(x, y, z, t) = 0$. Это тоже одно из стационарных полей, следовательно, энергия частицы сохраняется. Можно сразу перейти к уравнению Шредингера без времени. Для свободной частицы оно имеет вид

$$\Delta\varphi + k^2\varphi = 0, \tag{3.16}$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Положим

$$\varphi(x, y, z) = \varphi_1(x)\,\varphi_2(y)\,\varphi_3(z).$$

После подстановки имеем

$$\varphi_2\,\varphi_3\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \varphi_1\varphi_3\frac{d^2\varphi_2}{dy^2} + \varphi_1\varphi_2\frac{d^2\varphi_3}{dz^2} + k^2\varphi_1\varphi_2\varphi_3 = 0. \tag{3.17}$$

Чтобы разделить переменные, делим уравнение (3.17) на произведение $\varphi_1\varphi_2\varphi_3$. Получаем

$$\frac{1}{\varphi_1}\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} + \frac{1}{\varphi_2}\frac{d^2\varphi_2}{dy^2} + \frac{1}{\varphi_3}\frac{d^2\varphi_3}{dz^2} + k^2 = 0. \tag{3.18}$$

Поскольку функции φ_1, φ_2 и φ_3 зависят от разных переменных, равенство (3.18) выполняется только при условии, что все слагаемые постоянны. Примем

$$\frac{1}{\varphi_1}\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} = -k_x^2,$$

$$\frac{1}{\varphi_2}\frac{d^2\varphi_2}{dy^2} = -k_y^2,$$

$$\frac{1}{\varphi_3}\frac{d^2\varphi_3}{dz^2} = -k_z^2, \tag{3.19}$$

причем

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2. \tag{3.20}$$

Все три уравнения (3.19) однотипны. Поэтому достаточно решить одно из них. Выпишем уравнение для функции φ_1:

$$\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} + k_x^2\varphi_1 = 0.$$

Оно имеет два линейно независимых частных решения: $C_1e^{ik_xx}$ и

$C_2e^{-ik_xx}$. Отсюда видно, что исходное уравнение (3.16) допускает частные решения вида

$$\varphi = Ce^{i(k_xx+k_yy+k_zz)} = Ce^{i\vec{k}\vec{r}}.$$

Здесь $\vec{k}$ — постоянный вектор.

Введем другую сохраняющуюся величину — вектор импульса $\vec{p}=\hbar\vec{k}$. В таком случае решение

$$\varphi(x,\ y,\ z) = Ce^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \tag{3.21}$$

описывает частицу с импульсом $\vec{p}$ и энергией E. Связь энергии и импульса дается формулой (3.16). Как и в классической механике, $E=\frac{p^2}{2m}$.

Если учесть временно́й множитель (3.6), то получим полную функцию состояния:

$$\varphi(x,\ y,\ z,\ t) = Ce^{i(\vec{k}\vec{r}-wt)} = Ce^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)}. \tag{3.22}$$

Это плоская монохроматическая волна, которая совпадает с волной де Бройля (1.15). Такое совпадение, конечно, не случайно, поскольку при разработке квантовой механики с самого начала использовалась гипотеза де Бройля.

Плотность вероятности для координат частицы при свободном движении равна: $w=|C|^2$, т. е. имеется равная вероятность обнаружить частицу в любой точке пространства.

Особенность волновой функции (3.22): для нее не выполняется условие нормировки (2.5). В данном случае

$$\int |\psi|^3\, dV = \infty.$$

Физически это может быть вызвано тем, что абсолютно свободных частиц не существует в природе. Поэтому понятие о свободном движении — некоторая идеализация реального положения дел, допустимая потому, что всегда возможны состояния, весьма близкие к свободному.

В принципе мы могли бы записать функции состояния для «почти свободного движения» и пользоваться только ими. Однако математически проще применение функций (3.22). Разработаны такие способы их использования в квантовой механике, которые позволяют избежать ошибок и обойти возникающие математические трудности. В частности, применяются специальные условия нормировки. Один из возможных методов описан ниже, другой указан в формуле (7.2).

Пример 3.2. **Вычисление плотности потока вероятности.**

Вычислим с помощью формул (3.22) и (3.15) плотность потока вероятности для свободной частицы:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m}|C|^2 \operatorname{grad}(\vec{k}\vec{r}) = \frac{\hbar\vec{k}}{m}|C|^2 = \frac{\vec{p}}{m}|C|^2. \tag{3.23}$$

Постоянную C подберем так, чтобы значение $\vec{j}$ было равно числу частиц, пересекающих за единицу времени единичную площадку, перпендикулярную вектору $\vec{k}$. Плотность потока равна $n\vec{v}$, где $\vec{v}$ — скорость, а n — концентрация частиц. Полагая $\vec{j}=n\vec{v}$, имеем $|C|^2=n$.

§ 4. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

4.1. Состояния с неопределенным значением импульса. Волновая функция (3.21) описывает состояния свободно движущейся