



Ю.Лембра

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1983

ТАРТУСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Кафедра теоретической физики

Ю.Лембра

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Допущено Министерством высшего и среднего
специального образования Эстонской ССР
в качестве учебного пособия для студентов
по специальности „Физика“.

ТАРТУ 1983

Утверждено на заседании совета физико-химического
факультета ТГУ 21 апреля 1982 года

Рецензировано П. Хелленурме

Перевод с эстонского Т. Васильченко, Ю. Лембра

KUSTUTATUD

Anh.
Tartu Riikliku
Raamatukogu

7864

Предисловие

Во всесоюзной программе по атомной физике (1977 г. издания) в рамках курса общей физики для студентов III курса физических специальностей включена глава, посвященная физическим основам квантовой механики. В сопроводительном письме к программе выдвигается требование о том, чтобы студентов познакомить с основными понятиями квантовой механики. Считается необходимым сформировать у них умение подходить с позиций квантовой механики к описанию явлений микромира.

К сожалению, на сегодняшний день отсутствует такой учебник, который бы полностью соответствовал всесоюзной программе. Правда, существует учебник атомной физики Шпольского /1, 2/. Однако он не охватывает всех вопросов программы. К тому же, материал в этом учебнике представлен несколько расплывчато, а в некоторых вопросах (например, момент импульса) нет единого подхода.

В условиях современной научно-технической революции важен и объем учебника, который бы был в соответствии с реальным бюджетом времени студента. На основе методических исследований оптимальный объем учебника должен равняться примерно одной четверти или одной трети количества часов, отведенных для лекций по предмету. Большой объем учебника /1, 2/ (около 900 страниц), как видно, никак не соответствует такому требованию при малом количестве часов для обучения атомной физике (51 час).

В данном учебном пособии сделана попытка представить главу о физических основах квантовой механики курса атомной физики в рамках программы с учетом бюджета времени студента. Учебное пособие составлено на основе лекций, прочитанных студентам III курса физического отделения ТГУ. Студентам предложено руководство, позволяющее подходить к описанию явлений микромира на базе квантовой механики. Подход, выбранный автором несколько лет назад, ближе всего к последнему изданию учебника по общей физике Савельева /3/, который содержит главу, посвященную квантовой механике. В отличие от учебника /3/, метод изложения которого местами декларативно лаконичен, в данном учебном пособии мы постарались более подробно остановиться на выработке квантовомеханических понятий.

§ I. Гипотеза де Бройля

Воображения и интуиция помогают мысли осуществить великие завоевания.

Л. де Бройль.

В начале нынешнего столетия физики занимались исследованием корпускулярно-волнового дуализма света. В 1924 г. французский физик Л. де Бройль выдвинул гипотезу, что дуализм не только характеризует оптические явления, но и обладает универсальным значением. Л. де Бройль обратил внимание на то, что в оптике, вплоть до открытия фотоэффекта не учитывался корпускулярный аспект. Он предполагал, что при исследовании частиц вещества (электронов, протонов, атомов и т.д.) была допущена ошибка обратного типа, а именно: не учитывался волновой аспект.

Для построения своей гипотезы де Бройль исходил из следующих соображений. Он использовал полученные в начале прошлого столетия Гамильтоном результаты, показывавшие, что основные уравнения механики и геометрической оптики можно представить математически в одном и том же виде. Таким образом, существует некоторое соответствие между механикой и геометрической оптикой. Также хорошо известно соответствие между геометрической и волновой оптикой. Геометрическая оптика является предельным случаем волновой оптики, когда частота света становится особенно большой. Исходя из этих соображений де Бройль предположил, что частицы обладают волновыми свойствами, которые надо описывать с помощью новой физической теории — волновой механики. Здесь де Бройль предположил, что между волновой механикой и волновой оптикой имеется соответствие, аналогичное соответствию между обычной механикой и геометрической оптикой. Также он, аналогично соответствию между волновой и геометрической оптикой, предпо-

ложил, что волновая механика является более общей теорией, из которой в предельном случае вытекает обычная механика. Так получился следующий четырехугольник соответствий:

$$\begin{array}{cc} \text{механика} \quad (a) & \text{геометрическая оптика} \\ (d) | & | (b) \\ \text{волновая механика} \quad (c) & \text{волновая оптика.} \end{array}$$

Позже волновую механику стали называть квантовой механикой.

Приступим к детальному рассмотрению гипотезы де Бройля в случае свободной частицы. По де Бройлю, в корпускулярном аспекте частица характеризуется энергией E и импульсом p , в волновом аспекте — частотой ν и длиной волны λ . Поскольку оба аспекта характеризуют одну и ту же частицу, между ними должна существовать определенная связь. Де Бройль постулировал эту связь при помощи двух равенств:

$$\left. \begin{array}{l} E = h\nu \\ p = \frac{h}{\lambda} \end{array} \right\} \quad (I.1)$$

где h — постоянная Планка ($h = 6,626196 \cdot 10^{-34}$ Дж·с).

В дальнейшем вместо длины волны λ чаще будем использовать волновое число

$$k = \frac{1}{\lambda} \quad (I.2)$$

Отсюда можем, исходя из системы (I.1), записать

$$\left. \begin{array}{l} E = h\nu \\ p = h k \end{array} \right\} \quad (I.3)$$

Свободную частицу де Бройль описал в волновом аспекте с помощью плоской волны:

$$\Psi = A e^{2\pi i (kx - \nu t)} \quad (I.4)$$

где A — амплитуда, x — координата и t — время. Функция Ψ называется волновой функцией. Физический смысл этой функции объясним позже. Но сначала отметим одно упрощенное следст-

ние: если частицы нет, то волновая функция равняется нулю; если частица существует, то волновая функция отлична от нуля.

Представим волновую функцию свободной частицы в виде, в котором волновое число и частота выражаются через импульс и энергию. Таким образом, из выражения (I.4) с помощью выражений (I.1) и (I.2) получим волновую функцию свободной частицы в том виде, в котором это обычно представляется в квантовой механике:

$$\Psi = A e^{i(\rho x - Et)} \quad (I.5)$$

где постоянная

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (I.6)$$

называется постоянной Дирака^I. Символ \hbar читается "аш пере-черкнутое". Численное значение $\hbar = 1,054592 \cdot 10^{-34}$ Дж.с.

Напомним, что де Бройль пытался представить свою гипотезу универсальной. Поэтому выражения (I.1) и (I.4) построены так, чтобы получить согласие с ранее рассмотренным случаем света. Выражение (I.4) при этом отражает непосредственно соответствие (с) в вышеприведенном четырехугольнике.

Заметим также в связи с универсальным характером гипотезы де Бройля, что в этой гипотезе пытались отразить и тот случай, когда частицы движутся с большими скоростями. Поэтому в выражении (I.1) энергия и импульс принимаются в смысле теории относительности, т.е.

$$\left. \begin{aligned} E &= mc^2 \\ \rho &= m v. \end{aligned} \right\} \quad (I.7)$$

Здесь m - масса движения

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (I.8)$$

I В научной литературе наряду с \hbar постоянную \hbar называют также постоянной Планка. В учебной литературе все же полезнее для обеих постоянных использовать разные названия.

где m_0 - масса покоя, v - скорость движения частицы и c - скорость света в вакууме.

С целью дальнейшего использования выпишем также выражение, из которого вытекает зависимость энергии E от импульса p :

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}. \quad (1.9)$$

§ 2. Свойства волн де Бройля

Для начала найдем связь между волновым числом и частотой для волны де Бройля. Для этого исходим из выражения (1.9) и выражаем энергию и импульс через частоту и волновое число с помощью выражения (1.3). Так находим:

$$\nu = \sqrt{(hc)^2 + \left(\frac{m_0 c}{h}\right)^2}. \quad (2.1)$$

Проведем здесь сравнение с исследованием световых явлений. У фотонов (световых частиц) отсутствует масса покоя. Приняв в выражении (2.1) $m_0 = 0$, получим при помощи выражения (1.2) известный из курса оптики результат: $\lambda \cdot \nu = c$.

Перейдем к нахождению фазовой скорости волны де Бройля. Как известно, фазовая скорость волны - это скорость распространения поверхности постоянной фазы. В формуле (1.4) фазой служит аргумент экспоненциальной функции без мнимой единицы. Выражение для поверхности постоянной фазы получим, приравняв это выражение к константе:

$$2\pi(kx - \nu t) = const. \quad (2.2)$$

Если из выражения (2.2) взять производную по времени, то \dot{x} будет представлять фазовую скорость волны. Используя для этого обозначение c' , найдем $2\pi(kc' - \nu) = 0$, так как производная константы - нуль. Отсюда получим:

$$c' = \frac{\nu}{k}. \quad (2.3)$$

Здесь фазовая скорость волны де Бройля выражается через величины волнового аспекта. При помощи выражений (1.3) перейдем к величинам корпускулярного аспекта. Из выражения (2.3) вытекает:

$$c' = \frac{c^2}{v} \quad (2.4)$$

Так как $v < c$, то из выражения (2.4) вытекает, что фазовая скорость волны де Бройля больше, чем скорость света в вакууме. Результат не противоречит теории относительности, так как фазовая скорость не характеризует скорости распространения энергии.

Для сравнения вычислим групповую скорость волны де Бройля. Для этого используем следующий метод. Складываем плоские волны (1.4) в узком участке спектра $(k_0 - \varepsilon, k_0 + \varepsilon)$, где k_0 - фиксированное волновое число и ε - малая положительная величина. Получим сложную волну, которая называется волновым пакетом и выражается так:

$$\Phi = \int_{k_0 - \varepsilon}^{k_0 + \varepsilon} \alpha(k) e^{2\pi i (kx - vt)} dk \quad (2.5)$$

Функция $\alpha(k)$ учитывает тот факт, что при получении сложной волны плоские волны могут иметь различные амплитуды.

При помощи простого алгебраического преобразования выражение (2.5) представим в виде:

$$\Phi = \int_{k_0 - \varepsilon}^{k_0 + \varepsilon} \alpha(k) e^{2\pi i [(k - k_0)x - (v - v_0)t] + k_0 x - v_0 t} dk \quad (2.6)$$

где v_0 - частота, соответствующая волновому числу k_0 (см. выражение (2.1)).

Взяв в выражении (2.6) экспоненциальный множитель, постоянный относительно k , перед знаком интеграла, получим,

$$\Phi = B e^{2\pi i (k_0 x - v_0 t)} \quad (2.7)$$

где

$$B = \int_{k_0 - \varepsilon}^{k_0 + \varepsilon} \alpha(k) e^{2\pi i [(k - k_0)x - (v - v_0)t]} dk \quad (2.8)$$

Из выражения (2.7) следует, что медленно изменяющаяся величину B можно рассматривать как амплитуду сложной волны.

Исследуем сначала, с какой скоростью распространяется амплитуда с фиксированным волновым числом k . Для этого надо составить уравнение для соответствующей поверхности постоянной амплитуды. Если k — постоянная, то выражение (2.8) показывает, что требование постоянства амплитуды сводится к требованию постоянства выражения в квадратных скобках:

$$(k - k_0)x - (v - v_0)t = \text{const.} \quad (2.9)$$

Если в этом выражении взять производную по времени, то \dot{x} и будет скоростью распространения амплитуды с фиксированным волновым числом. Так мы получим:

$$\dot{x} = \frac{v - v_0}{k - k_0}. \quad (2.10)$$

Разложим v в ряд Тейлора:

$$v = v_0 + \left(\frac{dv}{dk}\right)_0 (k - k_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2v}{dk^2}\right)_0 (k - k_0)^2 + \dots, \quad (2.11)$$

где индекс нуль указывает на величины, которые взяты при значении аргумента $k = k_0$.

Так как ξ — малая величина, $|k - k_0|$ также мала. Поэтому в первом приближении из выражения (2.11) можно учитывать только два первых члена. Исходя из этого, получим из выражения (2.10)

$$\dot{x} = \left(\frac{dv}{dk}\right)_0. \quad (2.12)$$

Этот результат не зависит от волнового числа k : амплитуды с различными волновыми числами движутся с одинаковой скоростью. Следовательно, с такой же скоростью движется и вся амплитуда волнового пакета. Такую скорость называют групповой скоростью волны.

Учитывая, что выбор волнового числа k был произвольным, можно в вышеприведенном выражении (2.12) отбросить индекс нуль и представить выражение для групповой скорости

следующим образом:

$$u = \frac{d\nu}{dk} . \quad (2.13)$$

Сравним выражения (2.3) и (2.13) из чисто формальных соображений. Смысл фазовой скорости известен уже из элементарного курса физики. Физический смысл групповой скорости сложнее. Формально мы получаем выражение для групповой скорости (2.13) из выражения для фазовой скорости (2.3), если перед частотой и волновым числом написать знаки дифференциалов.

В выражении (2.13) групповая скорость волны де Бройля выражается через величины волнового аспекта. При помощи выражения (1.3) перейдем к величинам корпускулярного аспекта:

$$u = \frac{dE}{dp} . \quad (2.14)$$

Стоящую здесь производную можно легко найти, исходя из выражения (1.9):

$$u = \frac{pc^2}{E} . \quad (2.15)$$

Пользуясь выражением (1.7) получаем интересный результат:

$$u = v . \quad (2.16)$$

Выражение (2.16) показывает, что групповая скорость волны де Бройля равна скорости движения частицы. Полученный результат показывает, что гипотеза де Бройля, которая казалась сначала несколько искусственной, должна иметь физический смысл. Все-таки приходится учитывать, что исходя из гипотезы де Бройля частицам были присвоены совершенно новые свойства – волновые. Но ответ на основные вопросы физики дает эксперимент.

§ 3. Экспериментальная проверка гипотезы де Бройля

Впервые гипотеза де Бройля получила экспериментальное подтверждение в опыте американских физиков К.Д. Дэвиссона и Л.Х. Джермера, проведенном в 1927 году.

Схема опыта Дэвиссона-Джермера изображена на рисунке I.

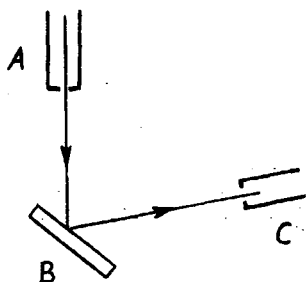


Рис. I.

Поток электронов, произведенный электронной пушкой *A*, падает на никелевый монокристалл *B*. Часть отразившихся от кристалла электронов попадает на коллектор *C*, соединенный с гальванометром. Коллектор можно сдвигать относительно монокристалла под разными углами. Уже первые опыты показали, что существует известный отбор: гальванометр показывал ток только при определенных положениях коллектора. Результат был полностью аналогичен отражению рентгеновских лучей от монокристалла. Из курса оптики нам известно, что отражение рентгеновских лучей от монокристаллов происходит только в том

случае, когда выполняется условие Вульфа-Брэгга:

$$2d \sin \theta = n \lambda, \quad (3.1)$$

где d - расстояние между атомными плоскостями, θ - угол дифракции ($\theta = \frac{\pi}{2} - \varphi$, φ - угол падения), λ - длина волны излучения, n - целое число.

Напомним, что в курсе оптики формула (3.1) была выведена исходя из общих свойств волновых явлений. Так что, если волновые свойства частиц (электронов, атомов и т.д.) действительно существуют, то выражение (3.1) можно использовать и в том случае, когда под λ понимается длина волны де Бройля. Для вычисления этой волны можно использовать соотношение (1.1), откуда

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (3.2)$$

где p - импульс частицы.

Импульс частицы можно найти, если известна кинетическая энергия. В опытах Дэвиссона-Джермера кинетическая энергия $W_{кин}$ определяется ускоряющим напряжением U в электронной пушке. Так как в описанных опытах применялись напряжения порядка нескольких десятков вольт, связь между кинетической энергией и импульсом описывается ньютоновской механикой:

$$W_{кин} = \frac{p^2}{2m_0}. \quad (3.3)$$

Отсюда

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 W_{кин}}}. \quad (3.4)$$

Кинетическая энергия электрона выражается через напряжение известным образом:

$$W_{кин} = eU, \quad (3.5)$$

где e - абсолютное значение заряда электрона. Так мы получим в конце концов следующее выражение для расчета длины волны де Бройля в условиях опыта Дэвиссона-Джермера:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 e U}} \quad (3.6)$$

Заменяв в выражении (3.6) универсальные постоянные h и e , а также массу покоя электрона численными значениями, получим следующее простое выражение для нахождения длины волны электрона де Бройля:

$$\lambda (\text{Å}) = \frac{12,25}{\sqrt{U (В)}} \quad (3.7)$$

где λ выражается в ангстремах и U - в вольтах.²

Взяв, соответственно условиям опыта Дэвиссона-Джермера $U \approx 10 В$, найдем из выражения (3.7) для порядка величины длины волны де Бройля электрона ангстрем. Такой же порядок величины расстояния между атомными плоскостями в кристалле. Таким образом, если волновые свойства электрона действительно существуют, они должны проявляться в опыте Дэвиссона-Джермера.

Зная ускоряющее напряжение в электронной пушке, можно на основе выражения (3.7) найти длину волны де Бройля электрона. Сделав анализ на основании условий Вульфа-Брэгга, уже в первых опытах обнаруживалось согласие теории и эксперимента.

Для детального анализа в последующих опытах Дэвиссона-Джермера используется несколько отличная от первоначальной методика, для которой учитываются возможности условия Вульфа-Брэгга. В первоначальных опытах поступили аналогично опытам с рентгеновским излучением, где в формуле (3.1) предпо-

² Выражение (3.7) нельзя путать с выражением для вычисления коротковолновой границы рентгеновского излучения:

$\lambda_{min} (\text{Å}) = 12,39/U$ (кэВ), где U - напряжение между катодом и антикатодом рентгеновской трубки, выраженное в килоэлектронвольтах. Это получается из выражения: $\lambda_{min} = hc/eU$ после подстановки численных значений универсальных постоянных.

лагали $\lambda = \text{const}$. Тогда отражение происходит только при определенных углах дифракции, синус которых удовлетворяет условию:

$$\sin \theta_n = \frac{n \lambda}{2d}. \quad (3.8)$$

В случае волны де Бройля электрона длина волны выражается формулой (3.6). Поскольку ускоряющее напряжение U легко изменить, то, следовательно, легко изменить и длину волны λ . Поэтому целесообразно в эксперименте держать θ постоянным. При таком предположении отражение электронов возникает при определенных длинах волн де Бройля λ_n , которые согласно формуле (3.1) удовлетворяют условию:

$$\lambda_n = \frac{2d \sin \theta}{n}. \quad (3.9)$$

Учитывая выражение (3.6) мы можем условие (3.9) записать следующим образом:

$$\sqrt{U_n} = \frac{n h}{2d \sin \theta \sqrt{2em_0}}, \quad (3.10)$$

где U_n — напряжение, соответствующее длине волны λ_n .

Выражение (3.10) и является основой методики, на основании которой Дэвиссон и Джермер проделали детальный анализ. Из этой формулы вытекает, что отражение электронов от кристалла происходит только в том случае, когда напряжение в электронной пушке имеет определенное значение U_n . Иначе: гальванометр регистрирует силу потока i только в случае определенных значений напряжения. Для анализа результата опыта целесообразно нарисовать график, где абсциссой будет квадратный корень из напряжения и ординатой — сила тока. Если теория верна, то на этом графике должны быть острые максимумы при определенных значениях абсцисс, удовлетворяющих условию (3.10). Так как n является целым числом, то промежуток между абсциссами двух соседних максимумов должен быть $\sqrt{U_{n+1}} - \sqrt{U_n}$. Пользуясь формулой (3.10), найдем

$$\sqrt{U_{n+1}} - \sqrt{U_n} = \frac{h}{2d \sin \theta \sqrt{2em_0}}. \quad (3.11)$$

Отсюда видим, что вышеназванный промежуток между абсциссами не зависит от целого числа n . Поэтому на графике, составленном описанным способом, расстояния между соседними максимумами одинаковы. Это действительно подтверждается опытом (см. рисунок 2).

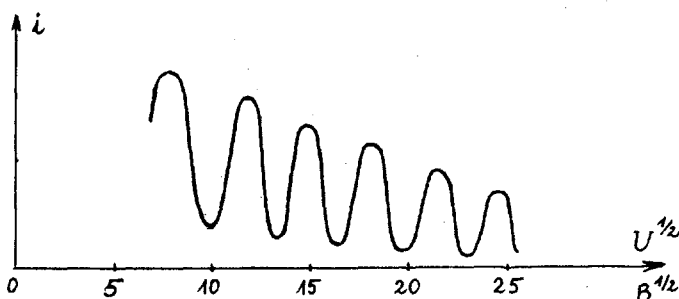


Рис. 2

Из графика (\sqrt{V}, i) можно непосредственно найти значения выражения, стоящего в левой части формулы (3. II). Значение правой части можно найти, если измерить угол θ . При этом предполагается, что d известно из рентгеноструктурного анализа. Этот анализ подтверждает справедливость формулы (3. II). Таким образом, в опыте Дэвиссона-Джермера открыты волновые свойства электронов.

В 1928 году, независимо друг от друга, советский физик П. С. Тартаковский и английский физик Г. П. Томсон проделали опыты с электронами по методике ранее проведенных опытов Дебая-Шеррера с рентгеновскими лучами. В этих опытах пучок электронов с фиксированной скоростью попадал на поликристаллическую пластинку. На фотопластинке, лежащей за ней, получена дифракционная картина. Такая запечатленная на фотопласт-

тинке дифракционная картина называется электронограммой.

При анализе результатов опытов Томсона и Тартаковского также, как и в опытах Дэвиссона-Джермера исходим из выражения для длины волны де Бройля электрона (3.2). Но при выражении импульса через кинетическую энергию, появилось одно уточнение. Чтобы пройти металлическую пластинку, энергия электрона должна быть достаточно велика (10 кэВ и больше). Поэтому, для получения точных результатов надо рассчитать кинетическую энергию, исходя из теории относительности:

$$W_{кин} = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2, \quad (3.12)$$

Выразив здесь импульс через кинетическую энергию и подставив результат в формулу (3.2), получим

$$\lambda = \frac{h c}{\sqrt{W_{кин} (2 m_0 c^2 + W_{кин})}}. \quad (3.13)$$

Учитывая выражение (3.5), получим из формулы (3.13) следующее правило для расчета длины волны де Бройля электрона в условиях опытов Томсона и Тартаковского

$$\lambda = \frac{h c}{\sqrt{e U (2 m_0 c^2 + e U)}}. \quad (3.14)$$

Проделав анализ опытов на основании формулы (3.14), получим хорошее соответствие с теорией. На сегодняшний день техника исследования электронограмм развита настолько, что с их помощью можно измерять даже параметры кристаллической решетки. Такой способ исследования строения веществ называется электронографией.

Таким образом, существование волновых свойств электрона можно считать экспериментально доказанным. Возникает вопрос, есть ли волновые свойства у других частиц. Для того, чтобы ответить на него, необходимо проделать опыты и с другими частицами. В 1929 г. немецкий физик О. Штерн с сотрудниками

проделал опыт, в котором пучок атомов гелия или молекул водорода попадал на монокристалл фторида лития. Анализ этих опытов был несколько сложнее, чем анализ ранее описанных в этом параграфе экспериментов. Причина заключалась в том, что скорость атомов или молекул в пучке не была постоянной. Чтобы оценить порядок, за скорость атомов и молекул примем наиболее вероятную скорость теплового движения:

$$v = \sqrt{\frac{2kT}{m_a}} \quad (3.15)$$

где k - постоянная Больцмана, T - абсолютная температура и m_a - масса атома или молекулы.

Пользуясь формулами (3.2) и (3.15), получим оценку длины волны де Бройля молекулы в опытах Штерна

$$\lambda \approx \frac{h}{\sqrt{2kTm_a}} \quad (3.16)$$

Заменяя в выражении (3.16) универсальные постоянные их численными значениями, получим:

$$\lambda (\text{Å}) \approx 30,4 \sqrt{\frac{m_p}{m_a \cdot T(K)}} \quad (3.17)$$

где λ выражается в ангстремах, T - в кельвинах, а m_p - масса протона.

Например, в случае молекул водорода в выражении (3.17) надо взять $m_a = 2m_p$; если $T = 300 \text{ K}$, то $\lambda \approx 1,2 \text{ Å}$. Приведенный пример указывает на то, что в случае температур, легко реализуемых на практике, длины волн де Бройля для легких атомов или молекул одного порядка с расстояниями между атомными плоскостями в кристаллической решетке. Поэтому можно надеяться в опытах на успех. Так это и было: в опыте обнаружили волновые свойства атомов и молекул.

У нейтронов также обнаружили волновые свойства. Нейтроны в ядерном реакторе подчиняются распределению Максвелла. По-

этому, для оценки результатов можно применять формулу (3.17), где под m_a понимается масса нейтрона m_n . Так как $m_n \approx m_p$, то в случае $T = 300 \text{ K}$ получим $\lambda \approx 1,8 \text{ \AA}$. Поэтому при обычных температурах длина волны де Бройля соизмеряется с межплоскостными расстояниями в кристаллической решетке и волновые свойства нейтронов четко проявляются. В настоящее время техника анализа дифракционных картин медленных нейтронов разработана настолько, что позволяет измерять параметры кристаллической решетки. Такой способ исследования строения вещества называется нейтронографией.

Описанные опыты позволяют с уверенностью утверждать, что волновые свойства частиц действительно существуют. Гипотеза де Бройля оказалась продуктивной. Заодно подчеркнем, что открытые на основе этой гипотезы волновые свойства нашли и практическое применение (электроннография и нейтронография).

Наконец, рассмотрим еще одну существенную деталь. В опытах Дэвиссона-Джермера, Томсона, Тартановского и др. интенсивность пучка электронов была настолько большой, что сквозь опытную установку одновременно проходило большое число электронов. Могло сложиться впечатление, что дифракционная картина вызвана взаимодействием большого числа электронов. Чтобы разъяснить этот вопрос, советские физики Л.М. Биберман, Н.Г. Сушкин и В.А. Фабрикант проделали в 1949 г. опыт, в котором промежуток времени между двумя последовательными попаданиями электронов в опытную установку превышал в $\sim 10^4$ раз промежуток времени, которое необходимо электрону для прохождения опытной установки. В таком случае в опытную установку электроны попадали по одному. В течение длительного времени экспозиции в опыте получалась дифракционная картина, распределение интенсивности которой не отличалось от полученных прежде. Отсюда можно сделать важное заключение, что волновые свойства присущи отдельным частицам. Так, например, волновые свойства проявляются и у одиночного электрона в атоме водорода.

§ 4. Статистическое толкование волн де Бройля

На основании полученного в § 2 заключения, что групповая скорость волны де Бройля равна скорости движения частицы (см. выражение (2.16)), появилось толкование, согласно которому частица отождествлялась с волновым пакетом. Легко убедиться, что такое простое толкование неверно. Напомним, что результат (2.16) получается в случае, если мы в разложении в ряд (2.11) учитываем только 2 первых члена. Если же учитывать и последующие члены, то из выражения (2.10) получается, что амплитуды с разными волновыми числами распространяются с разными скоростями. Это означает, что со временем волновой пакет расплывается. Но из эксперимента известно свойство постоянства частицы, т.е. частица сама по себе не расплывается. Поэтому приведенное выше простое толкование неверно.

Попытаемся найти другое толкование волн де Бройля. Для этого вернемся к представленному в § I четырехугольнику соответствий де Бройля. Вспомним некоторые общеизвестные из оптики факты и постараемся на основе соответствия (с) из четырехугольника де Бройля эти факты путем разумного обобщения перенести в квантовую механику.

Из курса оптики известно, что если волна падает на границу раздела двух сред, в которых фазовые скорости волны различны, то волна делится: 1) одна волна распространяется обратно в первую среду (она называется в оптике отраженной волной); 2) вторая волна распространяется во второй среде (преломленная волна). Если на границу раздела двух сред попадает частица, раздвоения не происходит: частица или возвращается в первую среду или переходит во вторую. Мы подошли к идее статистического толкования волн де Бройля. Параметры волны де Бройля в первой среде должны позволить найти вероятность попадания частицы в первую среду и аналогично параметры волны де Бройля во второй среде позволяют найти вероятность попадания частицы во вторую среду.

Возникает вопрос, какие именно параметры волны де Бройля

указывают на вероятность нахождения частицы в том или ином месте. Чтобы ответить на этот вопрос, вернемся вновь к курсу оптики. Напомним, что плотность энергии электромагнитного поля (энергия поля на единицу объема) пропорциональна квадрату амплитуды вектора поля A_{γ}^2 . Такое толкование получаем исходя из волнового аспекта. Чтобы получить толкование в корпускулярном аспекте, воспользуемся величиной ω_{γ} на основании следующего определения: $\omega_{\gamma} dV$ равно вероятности того, что фотон находится в элементе объема dV . Величина ω_{γ} называется плотностью вероятности нахождения фотона. Выражение $\omega_{\gamma} dV$ как вероятность безразмерно. Из $[dV] = \mu^3$ следует, что $[\omega_{\gamma}] = \mu^{-3}$. Отсюда плотность вероятности — размерная величина. Исходя из толкования в корпускулярном аспекте плотность энергии пропорциональна плотности вероятности нахождения фотона. Если теперь вспомнить то, что выше сказано о плотности энергии в волновом аспекте, получим следующий результат:

$$\omega_{\gamma} \sim A_{\gamma}^2, \quad (4.1)$$

что дает возможность естественного обобщения.

Теперь естественно ввести для произвольной частицы величину ω , дав ей следующее определение: ωdV равно вероятности нахождения частицы в элементе объема dV . Величину ω называют плотностью вероятности нахождения частицы. Подчеркиваем, что это размерная величина: $[\omega] = \mu^{-3}$. Следовательно, ω является аналогом величины ω_{γ} в выражении (4.1). Спрашивается, какой аналог у величины A_{γ} . Естественно взять за этот аналог амплитуду A волны де Бройля (1.4). Мы получим связь:

$$\omega \sim A^2. \quad (4.2)$$

Формула (4.2.) и дает ответ на вышеназванный вопрос, как вероятность связана с параметрами волны де Бройля. Из связи

³ Мы используем в этом параграфе индекс γ , ставящийся у обозначения величины, характеризующей свет.

(4.2) видно, что плотность вероятности нахождения частицы пропорциональна квадрату амплитуды волны де Бройля.

Так как до сих пор физический смысл амплитуды волны де Бройля не был конкретизирован, можно в формуле (4.2) считать коэффициент пропорциональности равным единице:

$$\omega = A^2. \quad (4.3)$$

Величину A^2 можно представить при помощи (I.4) и иначе:

$$A^2 = \bar{\psi} \bar{\psi}^* = |\bar{\psi}|^2, \quad (4.4)$$

с помощью чего найдем

$$\omega = \psi^* \psi = |\psi|^2. \quad (4.5)$$

Для уточнения отметим, что этот результат получен исходя из волновой функции свободной частицы (I.4). Выражение (4.5) имеет более общий вид, чем выражение (4.3). Поэтому М. Борн предположил, что формула (4.5) позволяет рассчитать плотность вероятности нахождения частицы в произвольном состоянии. Расчеты показывают, что здесь имеется согласие с экспериментом. Это соответствие и является единственным подтверждением формулы (4.5).

В связи с выражением (4.5) рассмотрим детально еще одну проблему. Если умножить волновую функцию на множитель $e^{i\alpha}$, где α — произвольное вещественное число, то плотность вероятности не изменится. Поэтому волновые функции ψ и $\psi e^{i\alpha}$ описывают одно и то же состояние. Для сравнения напомним аналогичную ситуацию из электростатики. Потенциалы φ и $\varphi + c \cos \alpha$ описывают одно и то же электрическое поле.

Проинтегрируем плотность вероятности нахождения частицы по какому-то конечному объему (V). Так получим вероятность того, что частица находится в этом объеме:

$$W_{(V)} = \int_{(V)} \omega dV. \quad (4.6)$$

Если мы проинтегрируем выражение (4.6) по всему пространству, то вероятность $W_{(V)}$ станет равной 1, так как час-

тица явно находится в какой-то точке пространства:

$$\int \omega dV = 1. \quad (4.7)$$

Здесь мы будем следовать часто применяющемуся в физической литературе порядку, где в интегралах по всему пространству опускают символ объема.

Пользуясь формулой (4.5), получим из выражения (4.7):

$$\int |\psi|^2 dV = 1. \quad (4.8)$$

Это условие называется условием нормировки волновой функции.

Уточним, что принципиально не обязательно ввести условие нормировки волновой функции на единицу, т.е. не обязательно подчинять волновую функцию условию (4.8). Важным при этом является то, что $|\psi|^2$ пропорциональна плотности вероятности нахождения частицы. В общем случае отношение величин $|\psi|^2$ в различных точках пространства определяет относительную вероятность соответствующих координат. Формула для вычисления $W(V)$ в таком случае выглядит так:

$$W(V) = \frac{\int_V |\psi|^2 dV}{\int |\psi|^2 dV}. \quad (4.9)$$

В числителе интегрируется по конечному объему (V), в знаменателе - по всему пространству. Поэтому волновую функцию можно представить произвольно довольно широко: волновые функции ψ и $c\psi$, где c - произвольное постоянное комплексное число, описывают одно и то же состояние.

§ 5. Принцип суперпозиции

Из исследований механических явлений известно, что при сложении двух волн возникает новая волна. То же характерно и для электромагнитных волн. С открытием волновых свойств частиц экспериментальным путем (см. опыт Дэвиссона-Джермера и т.д.) было естественно предположить, что у волн, описывающих

Состояние частицы, свойства в известной степени аналогичны ранее известным свойствам волн. Так приходим к принципу суперпозиции в квантовой механике: если система может находиться в состояниях, описываемых волновыми функциями ψ_1 и ψ_2 , то она может находиться и в состоянии, которое описывается волновой функцией ψ , полученной из ψ_1 и ψ_2 с помощью линейной комбинации

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \quad (5.1)$$

где c_1 и c_2 — произвольные комплексные числа, не зависящие от времени. Оправданием изложенного принципа является факт, что сделанные на его основе расчеты хорошо согласовались с данными эксперимента.

Хотя математическая форма выражения принципа суперпозиции в квантовой механике напоминает соответствующий результат из классической физики, в квантовой механике существует нечто, что отличается от сложения волн в классической физике. Если в классической физике волна складывается с себе подобной, то получается волна, амплитуда которой в два раза больше, чем у первоначальной. Если же по квантовомеханическому принципу суперпозиции (5.1) взять $c_1 = c_2 = 1$ и $\psi_1 = \psi_2$, получим $\psi = 2\psi_1$. Но из § 4 следует, что волновая функция $2\psi_1$ описывает то же состояние, что и волновая функция ψ_1 . Итак, сложение волновой функции с себе подобной в квантовой механике не привело к образованию нового состояния. По классической механике может существовать состояние, в котором амплитуда колебаний везде равна нулю. Но если волновая функция во всех точках равна нулю, то состояние отсутствует вообще.

В связи с принципом суперпозиции вводится требование, что операторы, используемые в квантовой механике, являются так называемыми линейными операторами. Так как здесь мы в нашем курсе впервые встречаем операторы, то сперва излагаем некоторые основные понятия.

Два оператора \hat{A} и \hat{B} называются равными

$$A = B, \quad (5.2)$$

если в случае произвольной функции f выполняется условие

$$\hat{A}f = \hat{B}f. \quad (5.3)$$

Сумма и разность двух операторов \hat{A} и \hat{B} определяется следующим образом:

$$(\hat{A} \pm \hat{B})f = \hat{A}f \pm \hat{B}f. \quad (5.4)$$

Произведение двух операторов \hat{A} и \hat{B} определяется следующим образом:

$$\hat{A}\hat{B}f = \hat{A}(\hat{B}f). \quad (5.5)$$

Произведение $\hat{A}\hat{B}$ означает, что вначале на функцию действуют оператором \hat{B} , а затем на результат оператором \hat{A} . В общем случае операторы не коммутируют, т.е. $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Конкретные примеры приведем в § 10.

Оператор \hat{L} называется линейным, если выполняется условие

$$\hat{L}(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2) = \alpha_1 \hat{L}f_1 + \alpha_2 \hat{L}f_2, \quad (5.6)$$

где f_1 и f_2 - произвольные функции, а α_1 и α_2 - произвольные комплексные постоянные.

В частном случае, когда $\alpha_2 = 0$, получаем из формулы (5.6)

$$\hat{L}(\alpha_1 f_1) = \alpha_1 \hat{L}f_1. \quad (5.7)$$

Из выражения (5.7) видно, что постоянную можно вынести за знак линейного оператора.

Из выражений (5.4), (5.5) и (5.6) следует, что сумма, разность и произведение двух линейных операторов также являются линейными операторами.

Для наглядности рассмотрим некоторые примеры линейных операторов. Предположим, что f_1 и f_2 - функции точки пространства $P(x, y, z)$. Например, линейным оператором является умножение на аргумент x , т.е. $\hat{L} = x$. Линейным оператором

является и оператор частной производной, например; $\hat{L} = \frac{\partial}{\partial x}$. Но квадратный корень явно не является линейным оператором.

Представим соображения, на основании которых введено требование линейности операторов в квантовой механике. Уравнение, которому удовлетворяет волновая функция ψ , можно без ограничений общности представить в виде:

$$\hat{N} \psi = 0, \quad (5.8)$$

где \hat{N} — какой-нибудь оператор, конкретный вид которого обусловлен физическими условиями. Построение этого оператора приведем позже (см. § 7).

Если существует состояние с волновой функцией ψ_1 , то выражение (5.8) должно удовлетворяться:

$$\hat{N} \psi_1 = 0. \quad (5.9)$$

Аналогично из существования состояния, описываемого волновой функцией ψ_2 , следует, что:

$$\hat{N} \psi_2 = 0. \quad (5.10)$$

На основе принципа суперпозиции существует и такое состояние, волновая функция которого: $c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$. Поэтому из выражения (5.8) следует:

$$\hat{N} (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = 0. \quad (5.11)$$

Умножим равенства (5.9) и (5.10) соответственно на постоянные c_1 и c_2 , сложим результаты и сравним с выражением (5.11). Так получим:

$$c_1 \hat{N} \psi_1 + c_2 \hat{N} \psi_2 = \hat{N} (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2). \quad (5.12)$$

Чтобы получить в выражении (5.12) согласие с волновыми функциями, описывающими всевозможные реально существующие состояния, оператор \hat{N} должен быть линейным оператором по определению (5.6).

§ 6. Принцип неопределенности

В классической физике частица в фиксированный момент времени находится в фиксированном месте и обладает при этом фиксированной скоростью. Местонахождение частицы в дальнейшем будем определять радиус-вектором \vec{r} , компоненты которого в декартовой системе координат соответственно обозначим через x, y, z . Вместо скорости введем импульс \vec{p} . Так что, по классической физике, у частицы одновременно имеются фиксированные значения координат и компонентов импульса. Попробуем исследовать, какой результат даст в данной ситуации квантовая механика.

Допустим сначала, что имеем дело с состоянием, в котором координаты микрочастицы фиксированы. Для упрощения рассуждения рассмотрим одномерный случай. При этом, если координата частицы фиксирована, то ее состояние описывается в соответствии с формулой (4.5) такой волновой функцией, которая отлична от нуля только в одной точке или в непосредственной близости от этой точки. Попробуем сконструировать волну с заданными свойствами, исходя из сложения волн де Бройля (I.5). Параметром, характеризующим конкретную плоскую волну, можно выбрать импульс p , так как энергия вычисляется из формулы (I.9).

Простая геометрическая конструкция показывает, что при сложении двух плоских волн не может возникнуть волна с ожидаемыми свойствами. Невозможно получить этого и путем сложения трех или другого конечного числа плоских волн. Остается только такая возможность (на математическом доказательстве которой мы здесь не останавливаемся), что волну с заданными свойствами удастся сконструировать, если сложить бесконечное число плоских волн. Так как параметром, характеризующим плоскую волну, был выбран импульс p , то, следовательно, для получения волн с заданными свойствами придется учесть величины всех импульсов. Подводя итог, приходим к важному выводу: если микрочастица находится в состоянии, когда координата

та ее фиксирована, то ее импульс неопределен. В последующем обозначим этот вывод с помощью символа (I).

Начнем новое рассуждение с предположения, что фиксирован импульс частицы. Такое состояние описывает только одна волна де Бройля (I.5). Амплитуда этой волны A во всем пространстве отлична от нуля. На основании формулы (4.3) приходим к выводу, что частицу с равной степенью вероятности можно найти в любой точке пространства. Другими словами: координата частицы в этом случае является неопределенной. Отсюда получаем вывод: в состоянии, когда фиксирован импульс частицы, ее координата является неопределенной. Обозначим этот вывод с помощью символа (II).

Из выводов (I) и (II) получим важный для квантовой механики результат: у частицы отсутствуют состояния, при которых ее координата и импульс одновременно имеют определенные значения. В этом суть принципа неопределенности. Этот принцип был открыт немецким физиком В. Гейзенбергом. Принцип неопределенности еще раз иллюстрирует тот факт, что поведение микрочастицы существенно отличается от поведения макрочастиц. Способ описания макрочастиц с одновременно фиксированным значением координаты и импульса для микрочастиц совсем неприемлем.

Из принципа неопределенности вытекает, что для микрочастиц теряет смысл понятие траектории. Чтобы в этом убедиться, вспомним тот факт из классической механики, что импульс как вектор направлен по касательной к траектории. Допустим, например, что частица находится в какой-то точке P (см. рис. 3). Для построения траектории необходимо указать направление касательной. Учитывая вывод (I), положенный в основу принципа неопределенности, видим, что невозможно указать направление вектора \vec{p} и, таким образом, нельзя построить касательную к траектории. Значит, относительно микрочастицы понятие траектории неприемлемо.

В связи с полученным результатом выявляется один из недостатков теории Бора. Как известно, в этой теории использовали так называемые условия квантования, которые позволяли из всех возможных движений найти те, которые соответствуют

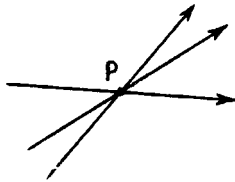


Рис. 3

стационарным состояниям. При выдвигении этих условий считалось само собой разумеющимся существование траектории у частиц. Так как у микрочастиц отсутствует траектория, то квантовые условия Бора теряют смысл. С другой стороны приходится все-таки учитывать то обстоятельство, что существование стационарных состояний было экспериментально подтверждено в опытах Франка-Герца. Таким образом, одной из задач квантовой механики является нахождение правильного метода вычисления стационарных состояний (см. § 8).

Рассмотрим проблему, которая возникла в первые годы развития квантовой механики, когда попытались взаимосвязанно применить принципы неопределенности и причинности. Принцип причинности — один из принципов научного познания. Его содержание состоит в следующем: если известно состояние системы в начальный момент $t = 0$, то из этого вытекает последующее поведение системы в любой произвольно взятый момент $t > 0$.

Припомним форму выражения принципа причинности в классической механике, согласно которой состояние системы определено, если известны координаты и импульсы частиц. Начальное состояние системы считается заданным, если известны координаты и импульсы всех ее частиц. Путем решения дифференциальных уравнений, составленных на основании II закона Ньютона, исходя из начальных условий можно найти координаты и импульсы частиц системы для любого момента времени $t > 0$. В этой форме находит свое выражение принцип причинности в классиче-

ской механике. Такой способ выражения его хотели вначале использовать и для микрочастиц. Но возникли трудности. По принципу неопределенности уже в начальный момент времени не существует таких состояний, когда координаты и импульсы имеют определенные значения. Становится невозможным нахождение их в последующие моменты времени. Создается впечатление, что принцип причинности не выполняется. Ошибка заключается в том, что к микрочастице пытались подойти с той же позиции, что и к макрочастице. Величиной, описывающей состояние микрочастицы, является ее волновая функция. Принцип причинности в этом случае выражается совсем иначе: если известно значение волновой функции частицы в начальный момент времени $t = 0$, то из этого следует значение волновой функции в любой момент времени $t > 0$. Уравнение, которое описывает изменение волновой функции, называется основным уравнением квантовой механики.

Математическую формулировку принципа неопределенности мы рассмотрим позже (§ 12). Студентам, которые хотят ознакомиться с философскими проблемами, связанными с этим принципом, советуем прочесть §§ 148–151 учебника /1/. Иллюстрации к тому, что понятие траектории неприемлемо для микрочастиц, можно найти и в учебнике /3/ в § 20.

§ 7. Уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера – основное уравнение квантовой механики в нерелятивистском случае, т.е. в случае, когда частица движется со скоростью, намного меньшей, чем скорость света в вакууме. Это уравнение было открыто в 1926 г. австрийским физиком Э. Шредингером. Так как уравнение Шредингера относится к основным уравнениям физики, то у него не может быть математического вывода. Критерием справедливости этого уравнения является соответствие результатов, полученных экспериментально, с результатами вычислений, выполненных при помощи его.

Ниже приведем ход рассуждений, на основании которых можно построить уравнение Шредингера. Рассмотрим два последова-

тельных момента времени ($t, t + dt$). Соответственно значения волновой функции в эти моменты обозначим через Ψ и $\Psi + d\Psi$. Так как промежуток времени дифференциально мал, то можно считать $d\Psi \sim dt$. Но этим нельзя ограничиться. Учитывая принцип причинности, величина $d\Psi$, как приращение волновой функции, в конце промежутка времени ($t, t + dt$) должна быть связана со значением волновой функции в начальный момент, т.е. значением ее в момент времени t . Волновую функцию в этот момент мы обозначили Ψ . Правилу, с помощью которого устанавливается влияние состояния Ψ на получение выражения $d\Psi$, выразим через оператор \hat{L} . На основании требований § 5 этот оператор \hat{L} должен быть линейным. Таким образом, можем считать приращение волновой функции пропорциональным величине $\hat{L}\Psi$. В конечном итоге получим:

$$d\Psi = \hat{L}\Psi dt. \quad (7.1)$$

Коэффициент пропорциональности в выражении (7.1) приравняем к единице, так как вид оператора \hat{L} еще не конкретизирован. Разделим полученное выражение (7.1) на дифференциал dt . Так как Ψ по правилу (4.5) описывает вероятность нахождения частицы (она может быть различной для различных точек пространства), то Ψ зависит не только от времени, но и от пространственных координат. Поэтому в левой части выражения (7.1) при делении на dt получаем фактически частную производную волновой функции по времени:

$$\frac{d\Psi}{dt} = \hat{L}\Psi. \quad (7.2)$$

Для нахождения идей, на основе которых можно сконструировать оператор \hat{L} , целесообразно исходить из волновой функции свободной частицы, которая выражается формулой (1.5). Взяв частную производную по времени, получим:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi. \quad (7.3)$$

Следовательно, в случае свободной частицы влияние оператора \hat{L} на волновую функцию таково, что волновая функция умножается на константу $(-\frac{iE}{\hbar})$, где E - энергия. Если теперь на основании четырехугольника из § I рассмотреть соответствие (а) и вспомнить, что в механике энергию описывает функция Гамильтона, то из соображений размерности целесообразно оператор \hat{L} представить в виде:

$$\hat{L} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}. \quad (7.4)$$

На основании соответствия (а) оператор \hat{H} называют оператором Гамильтона или гамильтонианом. Таким образом, из выражения (7.2) мы получим:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi. \quad (7.5)$$

Теперь вопрос сводится к тому, как найти идеи для конструирования оператора \hat{H} . Будем исходить опять из волновой функции свободной частицы (I.5), но возьмем частную производную по координате x . Результат представим в виде:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p \Psi. \quad (7.6)$$

Отсюда видно, что в случае свободной частицы влияние оператора $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ на волновую функцию таково, что волновая функция умножается на множитель p , который означает импульс. Поэтому оператор $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ следует рассматривать как оператор, описывающий импульс.

Используем снова соответствие (а) из четырехугольника в § I и вспомним, что в классической физике функция Гамильтона зависит от координат, компонентов импульса и времени. Учитывая произведенные выше соображения по поводу оператора $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, установили следующее правило для нахождения гамильтониана: исходят из функции Гамильтона в классической физике, оставляют в ней координаты и время неизменными, а компоненты импульса заменяют операторами:

$$\left. \begin{aligned} \hat{p}_x &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{p}_y &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{p}_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \right\} \quad (7.7)$$

Вид уравнения (7.5) с полученным таким образом гамильтонианом конкретизирован. Это и есть уравнение Шредингера. Подчеркиваем, что здесь не представлено строго математического вывода. Единственным обоснованием справедливости полученного уравнения служит обстоятельство, что вычисления выполненные на его основе дают результаты, находящиеся в соответствии с экспериментальными данными.

При решении уравнения Шредингера (7.5) мы можем найти волновую функцию Ψ . Квадрат модуля последней по формуле (4.5) равен плотности вероятности нахождения частицы. Иначе можно выразиться так: $|\Psi|^2 dV$ равно вероятности нахождения частицы в элементе объема dV . Для предупреждения ошибочных представлений подчеркиваем, что решение уравнения Шредингера не позволяет найти траекторию частицы по той простой причине, что у микрочастицы ее нет (см. § 6).

Приведем пример для построения гамильтониана, исходя из вида функции Гамильтона в классической физике:

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x, y, z, t), \quad (7.8)$$

где m - масса частицы, U - ее потенциальная энергия. Используя упомянутое выше правило, получим гамильтониан в виде:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + U(x, y, z, t). \quad (7.9)$$

Применяя формулу (7.7) найдем:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 \right] + U(x, y, z, t). \quad (7.10)$$

Преобразуем выражение, стоящее в квадратных скобках. Учтем по определению (5.5), что квадрат оператора \hat{A} означает последовательных два применения этого оператора: $\hat{A}^2 = \hat{A} \hat{A}$. Таким образом $(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})^2 = (\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})$. Так как $\frac{\hbar}{i}$ является константой, то влияние оператора $(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})^2$ состоит во взятии производной второго порядка и умножении полученного результата на константу $(\frac{\hbar}{i})^2$. Поэтому $(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Аналогично преобразовываются и два остальных оператора в формуле (7.10). В результате преобразования получаем:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z, t), \quad (7.11)$$

где

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (7.12)$$

- оператор Лапласа.

Подставляя гамильтониан из формулы (7.11) в выражение (7.5), получим уравнение Шредингера в виде:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z, t) \right) \hat{\Psi}. \quad (7.13)$$

Для преобразования этого уравнения используем формулу (5.4). Тогда уравнение Шредингера приобретет следующий вид:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(x, y, z, t) \Psi. \quad (7.14)$$

Из полученной формулы видно, что уравнение Шредингера является дифференциальным уравнением с частными производными второго порядка.

Вернемся к § 5. Сравнение уравнений (5.8) и (7.5) на основании формулы (5.4) показывает, что использованный в § 5 оператор выражается следующим образом:

$$\hat{N} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}. \quad (7.15)$$

Ранее мы представили правило для построения оператора \hat{H} . Значит на основании формулы (7.15) можно сконструировать и оператор \hat{N} . Это является ответом на вопрос, поставленный в § 5.

Когда имеем дело с различными физическими ситуациями, то потенциальная энергия, как функция U , имеет различный вид. В соответствии с этим, на основании формулы (7.14) мы получим и разные по виду уравнения Шредингера. В этом смысле наблюдается полная аналогия с классической механикой. Если потенциальная энергия выражается различно, то и выражения, описывающие силу, будут тоже различаться. Отсюда получаются неодинаковые по виду дифференциальные уравнения, выражающие II закон Ньютона.

Для примера рассмотрим гамильтониан электрона в водородоподобном атоме. Фактически водородоподобный атом является ионом, который получается из атома элемента с порядковым номером Z путем удаления $Z-1$ электронов. Водородоподобный атом состоит из ядра с зарядом Ze (e - элементарный заряд, $e > 0$) и электрона с зарядом $-e$. Потенциальная энергия в этом случае выражается так:

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (7.16)$$

где ϵ_0 - электрическая постоянная и r - расстояние от электрона до ядра. Выбрав за начало отсчета координат ядро, получим $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Таким образом, у нас конкретизирован вид функции U , входящей в уравнение (7.14). Уравнение Шредингера, описывающее движение электрона в водородоподобном атоме, будет следующим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = -\frac{Ze^2 \psi}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (7.17)$$

Если решить это уравнение, то $|\psi|^2 dV$ даст нам вероятность нахождения электрона в элементе объема dV .

В качестве другого примера рассмотрим линейный гармонический осциллятор, где потенциальная энергия частицы имеет

вид:

$$U = \frac{kx^2}{2}, \quad (7.18)$$

где k является постоянной.

С помощью формул (7.14) и (7.18) сможем получить уравнение Шредингера для линейного гармонического осциллятора в виде:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{kx^2 \Psi}{2}. \quad (7.19)$$

Формулы (7.17) и (7.19) конкретно иллюстрируют высказанное ранее положение. Если потенциальная энергия выражается различно, например, как в формулах (7.16) и (7.18), то тогда и уравнение Шредингера имеет различный вид, как в выражениях (7.17) и (7.19).

В качестве третьей иллюстрации рассмотрим движение свободной частицы. Тогда потенциальная энергия равняется нулю и уравнение Шредингера (7.14) имеет вид:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi. \quad (7.20)$$

Как можно установить непосредственной проверкой, решение уравнения (7.20) имеет вид:

$$\Psi = C e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)}. \quad (7.21)$$

Здесь C - постоянная, а \vec{p} и E - соответственно импульс и энергия частицы, причем

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \quad (7.22)$$

В частном случае, когда ось Ox направлена по вектору \vec{p} , получим без (7.21) ранее известную формулу (1.5). Так конечно это должно быть, поскольку простой случай движения

свободной частицы (волна де Бройля) служил часто в наших выкладках прообразом при формировании более сложных понятий.

Важными являются физические условия, которым должно удовлетворять решение уравнения Шредингера Ψ , как волновая функция. Эти условия в случаях, часто встречающихся в практике, следующие:

I. Если потенциальная энергия всюду конечна, то Ψ должна быть всюду однозначна, конечна и непрерывна вместе с непрерывными первыми производными по координатам.

Требование однозначности волновой функции связано с тем, что на основании формулы (4.5) по $|\Psi|^2$ можно определить плотность вероятности нахождения частицы. В качестве иллюстрации приведем на рисунке 4 а противоположный пример для одномерного случая.

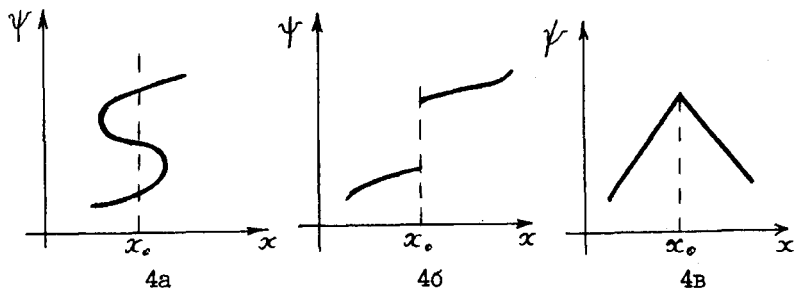


Рис. 4

Волновая функция не может иметь такой вид, так как в точке $x = x_0$ невозможно определить плотность вероятности нахождения частицы.

Требование конечности функции тоже объяснимо на основании формулы (4.5), как и требование непрерывности. Последнее проиллюстрируем рисунком 4 б, где приведен противоположный случай. Волновая функция не может иметь такой вид, так как из-за нарушения непрерывности в точке $x = x_0$ невозможно определить плотность вероятности нахождения частицы в этой точке.

Требование непрерывности частных производных волновой

функции по координатам вводится из-за следующих соображений. Уравнение Шредингера (7.14), как основное уравнение волновой механики, должно выполняться в любой момент времени и в любой точке пространства. Значит, должны существовать требуемые в этом уравнении частные производные второго порядка по координатам. А они, как известно, могут существовать лишь при условии непрерывности первых производных. Как иллюстрацию, рассмотрим противоположный пример на рисунке 4 в. Представленная функция однозначна, конечна и непрерывна, но в точке $x = x_0$ ее производная по x не является непрерывной. Значит, такая функция не может быть волновой функцией.

2. Пусть потенциальная энергия U всюду конечна, за исключением поверхности S , где она становится бесконечной. За пределами этой поверхности выполняются требования, предъявленные в случае I, но на поверхности S волновая функция обращается в нуль и на этой поверхности первые производные функции, взятые по координате, могут не быть непрерывными.

Для обоснования будем исходить из того, что на поверхности S невозможно написать уравнение Шредингера (7.14), так как U там превращается в бесконечную. Поскольку уравнение Шредингера является основным уравнением волновой механики, то, следовательно, частица не может находиться на поверхности S . Отсюда следует на основании формулы (4.5), что на поверхности S волновая функция должна обратиться в нуль. Из-за того, что потенциальная энергия U становится на поверхности S бесконечной, не обязательно требуется в формуле (7.14) существование частных производных второго порядка на этой поверхности. Поэтому первые частные производные могут не быть непрерывными.

3. Пусть потенциальная энергия всюду конечна, за исключением точки P , в которой она обращается в бесконечную. Вне данной точки продолжает выполняться требование, приведенное в случае I. В точке P волновая функция может превращаться в бесконечность, но характер превращения в бесконечность определяется условием конечности вероятности. Для анализа обратимся к рисунку 5, где вокруг точки P , служащей центром, нарисован шар с радиусом χ . Обозначим произволь-

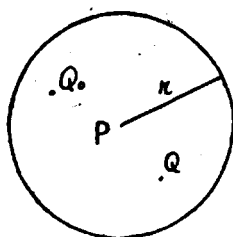


Рис. 5

ную точку шара Q . Плотность вероятности нахождения частицы является функцией этой точки. На основании § 4 $w(Q)dV$ равна вероятности нахождения частицы в элементе объема dV , окружающего точку Q . Если выражение $w(Q)dV$ проинтегрировать по всему шару, то получим вероятность $W(r)$, что частица находится в этом шаре:

$$W(r) = \int_{(\text{шар})} w(Q) dV. \quad (7.23)$$

Перейдем к пределу, если $r \rightarrow 0$. Тогда шар стягивается к точке P . Так как U становится бесконечной в точке P , то частица не может находиться в этой точке. Следовательно,

$$W(r) \rightarrow 0, \quad \text{если } r \rightarrow 0. \quad (7.24)$$

Применим к интегралу (7.23) теорему о среднем значении:

$$W(r) = \frac{4\pi r^3}{3} w(Q_0), \quad (7.25)$$

где Q_0 — какая-то конкретная точка шара.

Если $r \rightarrow 0$, то $Q_0 \rightarrow P$. Из выражений (7.24) и (7.25) получим таким образом:

$$r^3 w(P) \rightarrow 0, \quad \text{если } r \rightarrow 0. \quad (7.26)$$

Учитывая формулу (4.5), получим отсюда:

$$r^3 |\Psi(r)|^2 \rightarrow 0, \text{ если } r \rightarrow 0 \quad (7.27)$$

Условие (7.27) и определяет характер превращения волновой функции в бесконечность в точке P , где потенциальная энергия превращается в бесконечность. Например, волновая функция может обратиться в бесконечность, как $\frac{1}{r}$, но не может обратиться в бесконечность, как $\frac{1}{r^2}$.

§ 8. Стационарные состояния

Рассмотрим особо значимый с точки зрения практики частный случай, если гамильтониан не зависит от времени. Ищем решение уравнения Шредингера (7.5) методом разделения переменных в виде:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \cdot u(t). \quad (8.1)$$

Здесь множитель Ψ зависит только от координат x, y, z , которые являются компонентами радиуса-вектора \vec{r} , а множитель u зависит только от времени. Обращаем внимание на распространенную в учебниках по атомной физике традицию обозначать полную волновую функцию прописной греческой буквой Ψ , а ее зависящий от координат множитель строчной буквой ψ .

Подставляем Ψ из выражения (8.1) в уравнение (7.5)

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi u) = \hat{H}(\Psi u), \quad (8.2)$$

где для краткости не приведены аргументы Ψ и u .

В левой части выражения (8.2) Ψ не зависит от времени, поэтому ее можно вынести из-под знака производной. Поскольку u зависит только от времени, то частная производная превращается в данном случае в полную производную:

$$-\frac{\hbar}{i} \Psi \frac{du}{dt} = \hat{H}(\Psi u). \quad (8.3)$$

При преобразовании правой части выражения (8.3) учтем предположение, сделанное ранее, о том, что гамильтониан не зависит от времени. Припомним из § 5, что операторы квантовой механики линейны. В таком случае величина u выступает как константа по отношению к оператору \hat{H} и мы можем на основании выражения (5.7) написать u перед знаком оператора:

$$-\frac{\hbar}{i} \psi \frac{du}{dt} = u \hat{H} \psi. \quad (8.4)$$

Применим для выражения (8.4) стандартный прием метода разделения переменных: разделим выражение на произведение ψu . Таким путем получим:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{1}{u} \frac{du}{dt} = \frac{\hat{H} \psi}{\psi}. \quad (8.5)$$

Левая часть выражения (8.5) зависит только от времени, правая — только от пространственных координат. Учтем, что результат (8.5) получен из уравнения Шредингера, которое, как основное уравнение квантовой механики, должно выполняться в любой момент времени и в любой точке пространства. В связи с этим равенство (8.5) действительно лишь при условии, что его левая и правая части по отдельности равны константе. Обозначим эту константу, которую называют константой разделения переменных, символом A . Таким путем получим:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{1}{u} \frac{du}{dt} = A. \quad (8.6)$$

$$\frac{\hat{H} \psi}{\psi} = A. \quad (8.7)$$

Уравнение (8.6) элементарно интегрируется:

$$u = C e^{-\frac{iAt}{\hbar}}, \quad (8.8)$$

где C — константа. Подставим полученное выражение для u из (8.8) в формулу (8.1):

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-\frac{iAt}{\hbar}}. \quad (8.9)$$

Так как ψ у нас до сих пор неопределена, то мы отнесли константу C к определению функции ψ . В связи с линейностью оператора \hat{A} уравнение (8.7) удовлетворяется и тогда, когда вместо ψ взята новая функция, полученная из прежней путем умножения на константу.

Сделаем попытку раскрыть физический смысл константы A . Чтобы найти руководящую идею, сравним выражение (8.9) с волновой функцией свободной частицы в виде (I.5). Сравнение показывает, что в случае свободной частицы константа A равна энергии частицы E . Отсюда возникает идея, что и в общем случае константа есть энергия. Эту идею поддерживает формула (8.7). Запишем ее в виде:

$$\hat{A} \psi = E \psi. \quad (8.10)$$

Уравнение (8.10) напоминает задачу на нахождение собственной функции и собственного значения оператора в математике. Если выполняется условие

$$\hat{L} \psi = \lambda \psi, \quad (8.11)$$

где λ — константа и ψ — конечная, однозначная и непрерывная функция, не равная тождественно нулю, то константу λ называют собственным значением оператора \hat{L} , а функцию ψ — собственной функцией оператора \hat{L} . В качестве иллюстрации отметим, что если оператор \hat{L} влияет на произвольную функцию g , то получаем, вообще говоря, функцию нового типа, которая необязательно должна быть в пропорциональной зависимости от первоначальной. Собственная же функция, характеризующая оператор, является функцией определенного типа, также и собственное значение оператора является константой, которая определяется свойствами самого оператора.

Вернемся к выражению (8.10). Учтем из четырехугольника § I соответствие (α). Припомним из § 7, что гамильтониан был построен на основании классической функции Гамильтона, которая описывает энергию. В данном параграфе мы имеем дело с частным случаем, когда гамильтониан не зависит от времени. По правилу, приведенному в § 7, такой гамильтониан получается из функции Гамильтона, которая не зависит от времени. Если же функция Гамильтона не зависит от времени, то в классической механике это означает, что энергия частицы постоянна. Все вышесказанное поддерживает идею, что константа разделения переменных равна энергии частицы: $A = E$. Вычисления, проведенные на основании таких предположений, дали результаты, которые оказались в соответствии с экспериментальными данными.

На основании вышесказанного получим из формул (8.9) и (8.10):

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (8.12)$$

$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (8.13)$$

где E — энергия частицы.

Состояния, для которых волновая функция имеет выражение вида (8.12), в квантовой механике называются стационарными состояниями. Энергия в стационарных состояниях постоянна. Сравнение показывает, что введенное в теории Бора определение стационарных состояний находится в соответствии с определением, данным в квантовой механике.

Вычислим на основании формул (4.5) и (8.12) плотность вероятности нахождения частицы для стационарных состояний:

$$w = |\psi(\vec{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}|^2 = |\psi(\vec{r})|^2 \cdot |e^{-\frac{iEt}{\hbar}}|^2. \quad (8.14)$$

Обозначим

$$\alpha = -\frac{Et}{\hbar}. \quad (8.15)$$

Как математический объект, α - действительное число. В этом случае получим независимо от значения α :

$$|e^{i\alpha}| = |\cos \alpha + i \sin \alpha| = 1 \quad (8.16)$$

Учитывая формулы (8.15) и (8.16), найдем из выражения (8.14):

$$\omega = |\psi(\vec{r})|^2 \quad (8.17)$$

Формула (8.17) показывает, что плотность вероятности нахождения частицы в стационарных состояниях не зависит от времени.

Резюмируем схему нахождения стационарных состояний: волновая функция выражается формулой (8.12), где функцию $\psi(\vec{r})$ и константу E следует находить из уравнения (8.13). Эта схема заменяет схему Бора, базирующуюся на квантовых условиях. О том, что эти условия некорректны, ранее было сказано в § 6.

Поскольку проблема вычисления стационарных состояний сводится к решению уравнения (8.13), то это уравнение стали называть уравнением Шредингера для стационарных состояний. Часто уравнение (8.13) называют просто уравнением Шредингера, а $\psi(\vec{r})$ просто волновой функцией.

Для описания стационарных состояний обычно пользуются следующей терминологией. Стационарное состояние с минимальной энергией называется основным состоянием. Все остальные состояния называются возбужденными. Стационарные состояния изображают графически в виде схемы уровней энергий (рис.6). Уровни энергии располагаются тем выше, чем выше энергия состояния. При этом расстояние между уровнями на основании определения должно быть пропорционально разнице энергий этих состояний. Самый нижний уровень соответствует основному состоянию. Этот уровень называют основным уровнем. Все остальные уровни носят название возбужденных уровней. Так на рисунке 6 E_1 является основным уровнем, а E_2, E_3, E_4, \dots - возбужденными.

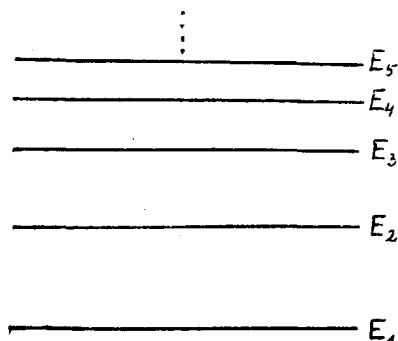


Рис. 6.

Если частица в стационарном состоянии и ее энергия равна E_k , то часто говорят, что частица находится на уровне E_k . Во избежание ошибочных мнений следует подчеркнуть, что здесь слово "находится" употребляется исключительно в рамках схемы уровней энергии. Здесь нет ничего общего с нахождением частицы в пространстве.

В связи с выражением (8.13) обращаем внимание на тот факт, что энергия является собственным значением гамильтониана. Результаты измерения энергии находят свое выражение в атомных спектрах. Отсюда зародилась идея о том, что значения измеренных физических величин в квантовой механике выражаются собственными значениями определенного вида оператора. Эту идею мы развернем в трех последующих параграфах.

§ 9. Свойства эрмитовых операторов

Линейный оператор \hat{L} называют эрмитовым (или самосопряженным), если выполняется условие:

$$\int v^* \hat{L} u \, d\tau = \int u \hat{L}^* v^* \, d\tau, \quad (9.1)$$

где u и v — две произвольные функции, аргументами которых являются действительные числа. Интегрировано по всей области изменения аргументов. Звездочка означает комплексное сопряжение. В качестве иллюстрации приведем пример, где u и v являются функциями точки обычного трехмерного пространства. Аргументы этих функций обозначим, как обычно, через x, y, z ; $d\tau$ тогда означает в формуле (3.1) произведение $dx dy dz$. Конкретный пример $u = x + 4iy + 3z$ говорит о том, что с помощью аргументов, выраженных действительными числами, можно составить функции, имеющие комплексные значения.

Допустим, что функция u является собственной функцией эрмитового оператора. Тогда на основании формулы (8.11) можно написать:

$$\hat{L} u = \lambda u, \quad (9.2)$$

где λ — собственное значение. Умножим это выражение на функцию u^* и проинтегрируем по всей области определения:

$$\int u^* \hat{L} u d\tau = \int \lambda u^* u d\tau. \quad (9.3)$$

Учитывая, что $\lambda = \text{const}$ и $\int |u|^2 d\tau \neq 0$ (так как собственная функция тождественно нулю не равняется) сможем найти:

$$\lambda = \frac{\int u^* \hat{L} u d\tau}{\int |u|^2 d\tau}. \quad (9.4)$$

Образум из выражения (9.4) комплексно сопряженное выражение:

$$\lambda^* = \frac{\int u \hat{L}^* u^* d\tau}{\int |u|^2 d\tau}. \quad (9.5)$$

Учитывая, что оператор \hat{L} является эрмитовым, и, положив в формуле (9.1) $u = v$, увидим, что знаменатели в выражениях (9.4) и (9.5) одинаковы. Значит:

$$\lambda = \lambda^*. \quad (9.6)$$

Выражение (9.6) показывает, что собственные значения эрмитовых операторов являются действительными числами. Поэтому в квантовой механике эрмитовы операторы служат операторами физических величин (ср. § 8).

Пусть в формуле (9.1) в роли ψ выступает u_n , являющаяся собственной функцией оператора \hat{L} , которая соответствует собственному значению λ_n . Кроме того, пусть в роли ψ будет собственная функция u_m , соответствующая собственному значению λ_m . На основании формулы (8.II) получим:

$$\hat{L} u_n = \lambda_n u_n \quad (9.7)$$

$$\hat{L} u_m = \lambda_m u_m \quad (9.8)$$

Таким путем найдем из формулы (9.1)

$$\int u_m^* \hat{L} u_n d\tau = \int u_n \hat{L}^* u_m^* d\tau. \quad (9.9)$$

Для преобразования левой части этого выражения используем формулу (9.7). Для преобразования правой части возьмем сначала из формулы (9.8) комплексное сопряжение:

$$\hat{L}^* u_m^* = \lambda_m^* u_m^* = \lambda_m u_m^*, \quad (9.10)$$

где мы использовали также условие (9.6). Таким образом, из формулы (9.9) получим:

$$(\lambda_n - \lambda_m) \int u_n u_m^* d\tau = 0. \quad (9.11)$$

Предполагая, что $\lambda_n \neq \lambda_m$, получим:

$$\int u_n u_m^* d\tau = 0. \quad (9.12)$$

Формула (9.12) выражает условие ортогональности собственных функций эрмитового оператора, соответствующих различным собственным значениям. В этом выражении понятия "ортогональный", которое в обычной геометрии означает "перпендикулярный", употребляется в переносном смысле. В курсе математического анализа обобщается известное из высшей алгебры скалярное произведение двух векторов. Интеграл такого типа, как в формуле (9.12), представляет собой скалярное произведение двух функций. Если это произведение равно нулю, то, по аналогии с векторной алгеброй (там скалярное произведение взаимно перпендикулярных векторов равно нулю), называют эти функции ортогональными.

Обратимся к анализу интеграла $\int |u_n|^2 d\tau$. Так как собственная функция тождественно нулю не равняется, то $\int |u_n|^2 d\tau \neq 0$. Здесь следует различить два случая:

- а) интеграл является конечным,
- б) интеграл расходится.

Можно показать, что появление случая а) или б) зависит от спектра оператора. Под этим термином понимают множество собственных значений оператора. Название термина дано по аналогии с оптическими спектрами. Если собственные значения оператора выражаются дискретными величинами, то говорят, что его спектр дискретный. Если собственные значения оператора имеют непрерывные значения в определенном промежутке, то спектр называют непрерывным. Оказывается, что в случае дискретного спектра реализуется возможность а), а в случае непрерывного спектра — возможность б).

Если $\int |u_n|^2 d\tau$ конечен, то тогда u_n в бесконечности должно обратиться в нуль. Если это условие не выполняется, то интеграл расходится. Если теперь в роли u_n выступит собственная функция гамильтониана, то из условия (8.17) выясняется, что частица не может двигаться бесконечно далеко. Таким образом, движение частицы происходит в ограниченной области пространства. Движение такого рода называют финитным движением. В случае б) функция u_n на бесконечности отлична от нуля, и, в силу условия (8.17), частицу можно обнаружить в бесконечно большой области пространства (инфинитное движение).

Дальнейшие рассуждения построим на примере дискретного спектра. Анализ непрерывного спектра приводится в цикле теоретической физики. В случае дискретного спектра можно $\int |u_n|^2 d\tau$ без ограничения общности нормировать на единицу:

$$\int |u_n|^2 d\tau = 1. \quad (9.13)$$

Формула (9.13) выражает условие нормировки собственной функции эрмитового оператора.

Пользуясь символом Кронекера:

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1, & \text{если } n = m \\ 0, & \text{если } n \neq m \end{cases}, \quad (9.14)$$

можно условия (9.12) и (9.13) обобщить следующим образом:

$$\int u_n u_m^* d\tau = \delta_{nm}. \quad (9.15)$$

Условие (9.15) называется условием ортонормировки собственных функций эрмитового оператора.

Можно показать, что произвольную функцию f можно разложить в ряд по собственным функциям эрмитового оператора:

$$f = \sum_n b_n u_n, \quad (9.16)$$

где b_n является постоянной.

Легко получить правило для нахождения коэффициентов разложения. Для этого умножим выражение (9.16) на функцию u_m^* , где m произвольный индекс, и интегрируем по всей области определения:

$$\int u_m^* f d\tau = \sum_n b_n \int u_n u_m^* d\tau \quad (9.17)$$

Интеграл, находящийся в правой части выражения (9.17), можно заменить при помощи формулы (9.15) символом Кронекера:

$$\int u_m^* f d\tau = \sum_n b_n \delta_{nm} . \quad (9.18)$$

Учитывая определение (9.14), видим, что в сумме только одно слагаемое отлично от нуля, а именно, то, у которого индекс суммирования n равен фиксированному индексу m .

Таким образом:

$$\int u_m^* f d\tau = b_m . \quad (9.19)$$

Так как m был произвольно выбранный индекс, то выражение (9.19) можно использовать и для вычисления множителя b_n :

$$b_n = \int u_n^* f d\tau . \quad (9.20)$$

Образуем, исходя из выражения (9.16), интеграл

$$\int |f|^2 d\tau = \sum_{n,m} b_n b_m^* \int u_n u_m^* d\tau . \quad (9.21)$$

Интеграл, находящийся справа, можно заменить на основании условия ортонормировки (9.15):

$$\int |f|^2 d\tau = \sum_{n,m} b_n b_m^* \delta_{nm} . \quad (9.22)$$

С помощью символа Кронекера можно, например, легко вычислить сумму по индексу m . В этой сумме отличен от нуля только тот член, у которого индекс суммирования $m = n$. Так в выражении (9.22) в правой части останется только сумма по индексу n :

$$\int |f|^2 d\tau = \sum_n b_n b_n^* , \quad (9.23)$$

из чего следует

$$\int |f|^2 d\tau = \sum_n |b_n|^2 . \quad (9.24)$$

Отсюда получаем следующий интересный результат. Если функция f нормирована, то коэффициенты разложения в ряд удовлетворяют условию:

$$\sum_n |b_n|^2 = 1. \quad (9.25)$$

Исследуем вопрос о том, каким образом можно из имеющихся эрмитовых операторов образовать новые эрмитовые операторы. Непосредственная проверка, основанная на формуле (9.1) показывает, что сумма и разность двух эрмитовых операторов тоже является эрмитовым оператором. Если умножить эрмитов оператор \hat{L} на вещественную постоянную α , то получаем, на основании выражения (9.1), тоже эрмитов оператор. Однако $\alpha i \hat{L}$ уже не является эрмитовым оператором. Можно показать, что произведение двух эрмитовых операторов \hat{L} и \hat{M} лишь тогда является эрмитовым оператором, когда эти операторы коммутируют, т.е.

$$\hat{L} \hat{M} = \hat{M} \hat{L}. \quad (9.26)$$

Позже (в § II) мы убедимся, что коммутационные свойства операторов имеют важное физическое толкование.

Целесообразно ввести понятие коммутатора двух операторов \hat{L} и \hat{M} следующим образом:

$$[\hat{L}, \hat{M}] = \hat{L} \hat{M} - \hat{M} \hat{L}. \quad (9.27)$$

Если два оператора коммутируют, то тогда коммутатор $[\hat{L}, \hat{M}]$ равен нулю.

Из определения коммутатора (9.27) вытекают следующие свойства коммутатора:

$$[\hat{L}, \hat{M}] = -[\hat{M}, \hat{L}] \quad (9.28)$$

$$[\hat{L}, \hat{M} + \hat{N}] = [\hat{L}, \hat{M}] + [\hat{L}, \hat{N}]. \quad (9.29)$$

Можно показать, что коммутатор двух эрмитовых операторов \hat{L} и \hat{M} можно выразить в виде:

$$[\hat{L}, \hat{M}] = i\hat{K}, \quad (9.30)$$

где \hat{K} - эрмитов оператор.

§ 10. Примеры эрмитовых операторов

Для начала убедимся в том, что операторы $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$, введенные в § 7 для описания компонентов импульса (см. формулы (7.7)), являются эрмитовыми.

Начнем с оператора \hat{p}_x . Возьмем интеграл, который в левой части формулы (9.1), и преобразуем его следующим образом:

$$\begin{aligned} \int v^* \hat{p}_x u d\tau &= \int v^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) u d\tau = \frac{\hbar}{i} \int v^* \frac{\partial u}{\partial x} d\tau = \\ &= \frac{\hbar}{i} \int v^* \frac{\partial u}{\partial x} dx dy dz = \frac{\hbar}{i} \int \left(\int v^* \frac{\partial u}{\partial x} dx \right) dy dz. \end{aligned} \quad (10.1)$$

Для интеграла, который взят по x , применим метод интегрирования по частям:

$$\int v^* \hat{p}_x u d\tau = \frac{\hbar}{i} \int \left(uv^* \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} - \int u \frac{\partial v^*}{\partial x} dx \right) dy dz. \quad (10.2)$$

Проинтегрированную часть проанализируем следующим образом. Если имеем дело с функциями, описывающими финитное движение, то они на бесконечности обратятся в нуль. В случае инфинитного движения эти функции в бесконечности не равняются нулю, но по физическому смыслу они должны в случае $x = -\infty$ и $x = +\infty$ иметь равные значения. Поэтому проинтегрированная часть после подстановки пределов обратится в нуль:

$$\int v^* \hat{p}_x u d\tau = -\frac{\hbar}{i} \int u \frac{\partial v^*}{\partial x} d\tau. \quad (10.3)$$

Учитывая, что $\hbar = \hbar^*$, $x = x^*$ и $i^* = -i$, можно выражение (10.3) далее преобразовать так:

$$\int V^* \hat{p}_x u d\tau = \int u \left(\frac{\hbar}{i} \right)^* \frac{\partial V^*}{\partial x^*} d\tau = \int u \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^* V d\tau. \quad (10.4)$$

Выражение в последних скобках по формуле (7.7) есть \hat{p}_x . Отсюда:

$$\int V^* \hat{p}_x u d\tau = \int u \hat{p}_x^* V^* d\tau. \quad (10.5)$$

Выражение (10.5) показывает, что оператор \hat{p}_x удовлетворяет определению эрмитового оператора (9.1). Аналогично можно убедиться, что операторы \hat{p}_y и \hat{p}_z являются тоже эрмитовыми операторами.

На основании полученных результатов легко убедиться в том, что гамильтониан, введенный в формуле (7.9), тоже является эрмитовым оператором. Сначала исследуем оператор $\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$, входящий в формулу (7.9). Оператор \hat{p}_x^2 определяется, как $\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x \hat{p}_x$. Каждый оператор коммутирует сам собой (см. формулу (9.27)). Поэтому на основании правила, приведенного в конце § 9 \hat{p}_x^2 тоже является эрмитовым оператором. По этой же причине операторы \hat{p}_y^2 и \hat{p}_z^2 тоже будут эрмитовыми. Сумма этих трех эрмитовых операторов, также по правилу (§ 9) будет эрмитовым оператором. Если ее умножить на вещественную константу $\frac{1}{2m}$, то снова (по § 9) получим эрмитовый оператор. Потенциальная энергия U , входящая в гамильтониан, по своему физическому смыслу имеет значения, выражающиеся в вещественных числах. Рассматривая оператор \hat{U} , как умножение на потенциальную энергию, нетрудно убедиться, что выполняется требование определения эрмитового оператора (9.1). Так как слагаемые гамильтониана (7.9) оба являются эрмитовыми операторами, значит и сам гамильтониан является таковым.

Для дальнейшего применения необходимо знать коммутатор $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ где \hat{x} - оператор координаты, который определен следующим образом:

$$\hat{x} f = x f, \quad (10.6)$$

где f - произвольная функция.

Исходя из определения коммутатора (9.27), получим:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = \hat{x} \hat{p}_x - \hat{p}_x x. \quad (10.7)$$

Поскольку мы впервые соприкасаемся с вычислением коммутатора, то рассмотрим ход рассуждений детально. Подействуем коммутатором $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ на произвольную функцию f . Учитывая формулы (5.4) и (10.7), получим:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] f = \hat{x} \hat{p}_x f - \hat{p}_x \hat{x} f. \quad (10.8)$$

Пользуясь формулами (7.7) и (10.6), придем к выражению:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] f = \hat{x} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x} \right) - \hat{p}_x (x f). \quad (10.9)$$

Применив снова формулы (7.7) и (10.6), получим:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] f = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x f). \quad (10.10)$$

Теперь остается только вычислить частную производную произведения $x f$ по x . Из формулы (10.10) найдем:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] f = - \frac{\hbar}{i} f. \quad (10.11)$$

Используя определение равенства двух операторов (5.3), получим искомый коммутатор:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = - \frac{\hbar}{i}. \quad (10.12)$$

Если воспользоваться свойствами коммутатора (9.28), то из формулы (10.12) следует:

$$[\hat{\rho}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}. \quad (10.13)$$

Полученные формулы (10.12) и (10.13) являются хорошей иллюстрацией общетеоретического положения (9.30). Возьмем, например, формулу (10.12), которую можно преобразовать в такой вид:

$$[\hat{x}, \hat{\rho}_x] = i\hbar. \quad (10.14)$$

Сравнение с формулой (9.30) показывает, что $\hat{K} = \hbar$. Здесь действие оператора \hat{K} на какую-либо функцию означает умножение этой функции на вещественную константу \hbar . Отсюда следует, что условие эрмитовости (9.1) выполняется.

По аналогии с вычислением коммутатора $[\hat{x}, \hat{\rho}_x]$ производится вычисление и остальных коммутаторов $[\hat{y}, \hat{\rho}_y]$ и $[\hat{z}, \hat{\rho}_z]$. Результатом также является $-\frac{\hbar}{i}$. Результат вычисления таких коммутаторов может быть представлен формулой:

$$[\hat{x}_j, \hat{\rho}_j] = -\frac{\hbar}{i}, \quad (10.15)$$

где индекс $j = 1, 2, 3$ и $\hat{x}_1 = \hat{x}, \hat{x}_2 = \hat{y}, \hat{x}_3 = \hat{z}, \hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_x, \hat{\rho}_2 = \hat{\rho}_y, \hat{\rho}_3 = \hat{\rho}_z$.

Найдем коммутатор $[\hat{x}, \hat{\rho}_y]$. Будем опираться на определение операторов (7.7) и (10.6). Результат получается просто. Действие оператора $\hat{x} \hat{\rho}_y$ означает, что сначала нужно взять частную производную по y и умножить ее на константу $\frac{\hbar}{i}$, а полученный результат умножить еще раз на аргумент x . Действие оператора $\hat{\rho}_y x$ означает, что сначала нужно помножить функцию на x , после этого надо взять производную по y и результат умножить на константу $\frac{\hbar}{i}$. Поскольку x и y являются независимыми переменными, то действие операторов $\hat{x} \hat{\rho}_y$ и $\hat{\rho}_y x$ одинаково; значит эти операторы коммутируют. Полученные результаты и аналогичные для коммутаторов $[\hat{x}, \hat{\rho}_z]$

и др. можно обобщать, учитывая формулу (10.15), следующим образом:

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = -\frac{\hbar}{i} \delta_{jk}, \quad (10.16)$$

где δ_{jk} означает символ Кронекера.

Для лучшего запоминания полученного результата (10.16) подчеркнем следующее. Если операторы координат и компонентов импульса являются "одноименными" (например, \hat{y} и \hat{p}_y), то коммутатор равен $-\frac{\hbar}{i}$; если они "разноименные" (например, \hat{x} и \hat{p}_x), то коммутатор равняется нулю.

Опираясь на определение (10.6) можно найти:

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0. \quad (10.17)$$

Опираясь на определение (7.7), можно найти:

$$[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0. \quad (10.18)$$

Если $j = k$, то результат (10.18) очевиден, так как каждый оператор коммутирует сам с собой. Если $j \neq k$, то на основании выражения (7.7) причиной выполнения формулы (10.18) служит равенство смешанных производных второго порядка.

§ II. Описание физических величин с помощью операторов

В конце § 8 мы высказали идею, что с позиции квантовой механики измеренные значения физических величин выражаются через собственные значения определенных операторов. Значения этих измеренных величин являются вещественными числами. В § 9 мы убедились, что собственные значения эрмитовых операторов тоже вещественные числа. Поэтому в квантовой механике эрмитовые операторы используют для описания физических вели-

чин. Далее возникает вопрос о конструировании таких операторов. Рассмотрим здесь два случая:

- а) физические величины, имеющие классический аналог;
- б) физические величины, для которых отсутствует классический аналог.

В случае а) возникает мысль сконструировать операторы аналогично тому, как гамильтониан получили на основании функции Гамильтона. Действительно, наблюдается соответствие с экспериментом, если при конструировании оператора исходить из соответствующей формулы классической механики, оставляя неизменными координаты и время, но заменяя компоненты импульсов операторами по правилу (7.7). Обобщению таким способом поддаются только те формулы, которые в ходе описанной выше подстановки дают эрмитовые операторы. Для проверки используются правила, приведенные в конце § 9.

В случае б) нет иной возможности, как исходить из обобщения результатов эксперимента и при конструировании оператора следить, чтобы выполнялись требования линейности (§ 5) и эрмитовости (§ 9). Такой величиной, которая не имеет классического аналога, является, например, спин электрона.

Примером случая а) рассмотрим момент импульса. Из классической механики известно, что компоненты этого вектора выражаются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} L_x &= y p_z - z p_y \\ L_y &= z p_x - x p_z \\ L_z &= x p_y - y p_x, \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.1})$$

где x, y, z - компоненты радиуса-вектора и p_x, p_y, p_z - компоненты импульса.

Попробуем применить ранее сформулированное правило для конструирования оператора x - компонента момента импульса. Операторы, соответствующие координатам y и z , определены аналогично формулой (10.6), так же как и для координаты x . Операторы, соответствующие компонентам импульса p_z и p_y , можно взять из формулы (7.7). В выражении классической физи-

ки (II.1) вначале стоит произведение $y p_z$. Ему в соответствии с правилами должен соответствовать оператор $\hat{y} \hat{p}_z$. Взяв в формуле (10.16) $j = 2$ и $k = 3$, убедимся, что операторы \hat{y} и \hat{p}_z коммутируют. Значит, на основании правила, приведенного в конце § 9, $\hat{y} \hat{p}_z$ является эрмитовым оператором. Аналогично можно убедиться в том, что $\hat{z} \hat{p}_y$ тоже эрмитов оператор. На основании выражения (II.1) для конструирования оператора \hat{L}_x необходимо взять разность, которая так же по правилу § 9 является эрмитовым оператором. Таким образом \hat{L}_x является эрмитовым оператором, служащим для описания x - компоненты момента импульса. Поступая аналогично и далее, мы получим окончательное выражение для операторов компонентов момента импульса в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y \\ \hat{L}_y &= \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z \\ \hat{L}_z &= \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x. \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.2})$$

Если воспользоваться формулами (10.6) и (7.7), то этот результат можно записать и в таком виде:

$$\left. \begin{aligned} \hat{L}_x &= \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{L}_y &= \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.3})$$

Изучение микрочастиц показало, что существует несколько видов моментов импульса. Для различения их описанный выше момент импульса, имеющий аналог в классической механике, называется орбитальным моментом импульса. Операторы орбитального момента импульса выражаются в виде (II.2) или (II.3).

В качестве иллюстрации представляем таблицу I, где перечислены простейшие операторы квантовой механики. Они сконструированы по правилу, представленному для случая а).

Изложим положение квантовой механики, на основании кото-

Таблица I

Простейшие операторы квантовой механики

Физическая величина	Обозначение или определение в классической механике	Оператор в квантовой механике
Координаты	x, y, z	$\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z$
Компоненты импульса	p_x, p_y, p_z	$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$
Компоненты момента импульса	$L_x = y p_z - z p_y$ $L_y = z p_x - x p_z$ $L_z = x p_y - y p_x$	$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} (y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y})$ $\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} (z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z})$ $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} (x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x})$
Кинетическая энергия	$T = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$	$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$
Потенциальная энергия	$U(x, y, z)$	$\hat{U} = U(x, y, z)$
Полная энергия	$E = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x, y, z)$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z)$

формальный
момент
импульса

рого результаты измерений приводятся в соответствие с собственными значениями оператора.

Рассмотрим физическую величину, которую описывает оператор \hat{L} . Пусть его собственные функции будут $u_1, u_2, \dots, u_n, \dots$ и собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$. Пусть нам задано состояние, которое описывается нормированной волновой функцией ψ . Разложим ее в ряд по собственным функциям оператора \hat{L} :

$$\psi = \sum_n \alpha_n u_n, \quad (II.4)$$

где коэффициенты вычисляются по формуле:

$$\alpha_n = \int u_n^* \psi d\tau \quad (II.5)$$

(смотри формулу (9.20)). Содержание положения состоит в том, что в состоянии, волновая функция которого ψ , измеренным значением физической величины является одно из собственных значений $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$. При этом вероятность появления конкретного результата измерения λ_n равна $|\alpha_n|^2$.

Обоснованием этого положения служит то обстоятельство, что получаются результаты, находящиеся в соответствии с экспериментом. Формулировка положения довольно длинная, но по содержанию оно простое. Если имеем дело с общим случаем, когда волновая функция выражается формулой (II.4), то различные собственные функции оператора \hat{L} входят в сумму с разным "весом", который характеризуется коэффициентом α_n . Теперь понятно, что вероятность появления конкретного значения λ_n должно определяться через коэффициент α_n . Вероятность должна выражаться положительным числом. Простейшим действием для получения положительной величины из комплексного числа α_n является умножение на комплексно сопряженное число. Так получим $\alpha_n \alpha_n^*$, что равняется $|\alpha_n|^2$. Представленную выше интерпретацию поддерживает то обстоятельство, что сумма величин $|\alpha_n|^2$ на основании формулы (9.25) равна единице.

На этом мы заканчиваем рассмотрение основных принципов квантовой механики. Существует еще один принцип, который касается систем, состоящих из одинаковых частиц. Оставим его на рассмотрение в цикле теоретической физики.

Сделаем маленькое отступление в связи с учебным планом физической специальности. Изложенный выше учебный материал соответствует в структуре квантовой механики как науки приблизительно тому материалу классической механики курса общей физики, на который в дальнейшем опирается курс теоретической механики. Например, знать из квантовой механики только уравнение Шредингера означает то же самое что из классической механики усвоить лишь II закон Ньютона. Представленный здесь материал потребовал больших затрат времени из-за того, что понятия, описывающие микрочастицы, не имеют опоры в повседневном жизненном опыте, который значительно помогает при изучении понятий, относящихся к макроскопическим телам.

Вернемся назад к положению, которое установило соответствие между результатами измерений и собственными значениями оператора. Так как вероятность появления конкретного результата измерений λ_n есть $|\alpha_n|^2$, то можно легко вычислить среднее значение $\langle L \rangle$ физической величины, соответствующей оператору \hat{L} , для состояния, описываемого волновой функцией ψ :

$$\langle L \rangle = \sum_n \lambda_n |\alpha_n|^2. \quad (II.6)$$

Из практических соображений преобразуем выражение $\langle L \rangle$ в такой вид, чтобы волновая функция ψ входила в него в явном виде.

Сначала запишем выражение (II.6) в другой форме:

$$\langle L \rangle = \sum_n \lambda_n \alpha_n \alpha_n^*. \quad (II.7)$$

Величину α_n^* заменим по формуле (II.5):

$$\langle L \rangle = \sum_n \alpha_n \int \psi^* \lambda_n u_n d\tau. \quad (\text{II.8})$$

Величину $\lambda_n u_n$ заменим через выражение (9.7):

$$\begin{aligned} \langle L \rangle &= \sum_n \alpha_n \int \psi^* \hat{L} u_n d\tau = \\ &= \int \sum_n \alpha_n \psi^* \hat{L} u_n d\tau = \int \psi^* \sum_n \alpha_n \hat{L} u_n d\tau. \end{aligned} \quad (\text{II.9})$$

Сумму $\sum_n \alpha_n \hat{L} u_n$ преобразуем на основании свойств и линейного оператора (5.6):

$$\langle L \rangle = \int \psi^* \hat{L} \left(\sum_n \alpha_n u_n \right) d\tau. \quad (\text{II.10})$$

На основании формулы (II.4) мы имеем в круглых скобках волновую функцию ψ . Таким образом, мы пришли к искомому результату:

$$\langle L \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi d\tau. \quad (\text{II.11})$$

Если функция ψ - одна из собственных функций оператора \hat{L} , например, $\psi = u_m$, то при разложении (II.4) все коэффициенты - нули, за исключением α_m , равного единице. Таким образом, $|\alpha_m|^2 = 1$ и физическая величина имеет определенное значение.

Если функция ψ является собственной функцией двух операторов \hat{L} и \hat{M} , то в этом состоянии у двух физических величин существуют определенные значения λ_m и μ_m . При этом:

$$\left. \begin{aligned} \hat{L} u_m &= \lambda_m u_m \\ \hat{M} u_m &= \mu_m u_m \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.12})$$

Исследуем, что свойственно операторам \hat{L} и \hat{M} , имеющим общую систему собственных функций (т.е. полагаем, что (II.12) действует при произвольном m). С помощью формулы (II.12) получим:

$$\hat{M} \hat{L} u_m = \hat{M}(\lambda_m u_m) = \lambda_m \hat{M} u_m = \lambda_m \mu_m u_m \quad (\text{II.13})$$

$$\hat{L} \hat{M} u_m = \hat{L}(\mu_m u_m) = \mu_m \hat{L} u_m = \mu_m \lambda_m u_m. \quad (\text{II.14})$$

Отсюда получим с помощью формул (5.4) и (9.27):

$$[\hat{L}, \hat{M}] u_m = 0. \quad (\text{II.15})$$

Воспользуемся тем обстоятельством, что произвольную функцию f можно разложить в ряд по собственным функциям эрмитового оператора. Подействуем коммутатором $[\hat{L}, \hat{M}]$ на произвольную функцию f в выражении (9.16):

$$[\hat{L}, \hat{M}] f = [\hat{L}, \hat{M}] \sum_m b_m u_m. \quad (\text{II.16})$$

Поскольку коммутатор является линейным оператором (§ 5 и 9), то на основании свойства линейного оператора (5.6) получим:

$$[\hat{L}, \hat{M}] f = \sum_m b_m [\hat{L}, \hat{M}] u_m. \quad (\text{II.17})$$

Из выражения (II.15) следует, что каждый член этой суммы равен нулю. Так как функция f произвольная, то на основании выражений (5.2) и (5.3):

$$[\hat{L}, \hat{M}] = 0. \quad (\text{II.18})$$

Напомним, что эта формула получена, исходя из выражения (II, I2). Этим мы показали, что, если у двух операторов есть общие собственные функции, то эти операторы коммутируют. Физическое толкование математического предположения состоит в том, что у двух физических величин имеются одновременно определенные значения. Так мы подошли к следующему физическому результату: если у двух физических величин одновременно имеются определенные значения, то операторы, описывающие эти физические величины, коммутируют.

Можно доказать и обратную теорему: если два оператора коммутируют, то у них есть одинаковые собственные функции. Здесь физическое толкование математического утверждения состоит в том, что у двух физических величин одновременно имеются определенные значения.

С практической точки зрения последний результат особенно ценен. Коммутаторы операторов сравнительно легко вычисляются (см. примеры § 10). Если коммутатор окажется нулем, то две физические величины могут иметь одновременно определенные значения. Если коммутатор отличается от нуля, то соответствующие операторы не имеют общих собственных функций (если собственные функции были бы общими, то согласно выше доказанному должны были бы эти операторы коммутировать). Следовательно, если коммутатор не равен нулю, то у двух физических величин нет определенных значений одновременно.

В качестве конкретного примера рассмотрим коммутатор (10.12), который отличен от нуля. В связи с этим у координаты x и x - компонента импульса нет одновременно определенных значений. По формуле (10.16) у координаты x' и y - компонента импульса могут существовать определенные значения.

§ 12. Соотношение неопределенности

Рассмотрим две физические величины, описываемые некоммутирующими операторами \hat{K} и \hat{M} . В таком случае в общей формуле (9.30) оператор \hat{K} отличен от нуля.

Образует новые операторы:

$$\left. \begin{aligned} \hat{\Delta L} &= \hat{L} - \langle L \rangle \\ \hat{\Delta M} &= \hat{M} - \langle M \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (12.1)$$

где ломанные скобки означают средние значения (см. формулу (II.6)). Операторы $\hat{\Delta L}$ и $\hat{\Delta M}$ описывают отклонения физических величин от средних значений, поэтому их можно называть операторами отклонения.

Припомним из § 9, что разность двух эрмитовых операторов является также эрмитовым оператором. Поэтому операторы $\hat{\Delta L}$ и $\hat{\Delta M}$ тоже являются эрмитовыми.

Найдем, исходя из формул (9.27) и (12.1), коммутатор операторов отклонения:

$$[\hat{\Delta L}, \hat{\Delta M}] = (\hat{L} - \langle L \rangle)(\hat{M} - \langle M \rangle) - (\hat{M} - \langle M \rangle)(\hat{L} - \langle L \rangle). \quad (12.2)$$

Имея в виду то, что операторы \hat{L} и \hat{M} не коммутируют, после раскрытых скобок получим:

$$[\hat{\Delta L}, \hat{\Delta M}] = [\hat{L}, \hat{M}]. \quad (12.3)$$

В правой части выражения (12.3) использован на основании формулы (9.27) коммутатор $[\hat{L}, \hat{M}]$.

Опираясь на выражение (9.30), найдем из формулы (12.3):

$$[\hat{\Delta L}, \hat{\Delta M}] = i\hat{k}. \quad (12.4)$$

Введем произвольный вещественный параметр α и образуем интеграл:

$$J(\alpha) = \int |(\alpha \hat{\Delta L} - i \hat{\Delta M})\psi|^2 d\tau, \quad (12.5)$$

где ψ - волновая функция и интегрируется по всей области определения.

Поскольку подынтегральная функция является неотрицательной, выполняется условие:

$$J(\alpha) \geq 0. \quad (I2.6)$$

Используя свойство комплексного числа $z \quad |z|^2 = z z^*$ и формулу (5.4), приведем выражение (I2.5) к виду:

$$J(\alpha) = \int u (\alpha \hat{\Delta L}^* \psi^* + i \hat{\Delta M}^* \psi^*) d\tau, \quad (I2.7)$$

где

$$u = (\alpha \hat{\Delta L} - i \hat{\Delta M}) \psi. \quad (I2.8)$$

Из-за постоянства мнимой единицы i , выражение (I2.7) можно преобразовать следующим образом:

$$J(\alpha) = \int u \alpha \hat{\Delta L}^* \psi^* d\tau + i \int u \hat{\Delta M}^* \psi^* d\tau. \quad (I2.9)$$

В связи с тем, что операторы $\hat{\Delta L}$ и $\hat{\Delta M}$ являются эрмитовыми, а параметр α - вещественное число, то, исходя из формулы (9.1) можно выражение (I2.9) преобразовать дальше:

$$J(\alpha) = \int \psi^* \alpha \hat{\Delta L} u d\tau + i \int \psi^* \hat{\Delta M} u d\tau. \quad (I2.10)$$

Объединим снова оба интеграла и вспомним определение u по (I2.8):

$$J(\alpha) = \int \psi^* (\alpha \hat{\Delta L} + i \hat{\Delta M}) (\alpha \hat{\Delta L} - i \hat{\Delta M}) \psi d\tau. \quad (I2.11)$$

Перемножив операторы, находящиеся между ψ^* и ψ , получим, учитывая формулу (9.27), следующее:

$$J(\alpha) = \int \psi^* (\alpha^2 \hat{\Delta L}^2 + i\alpha [\hat{\Delta M}, \hat{\Delta L}] + \hat{\Delta M}^2) \psi d\tau. \quad (12.12)$$

Опираясь на формулы (5.4), (11.11) и (12.4), получим:

$$J(\alpha) = \alpha^2 \langle (\Delta L)^2 \rangle + \alpha \langle K \rangle + \langle (\Delta M)^2 \rangle, \quad (12.13)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \langle (\Delta L)^2 \rangle &= \int \psi^* \hat{\Delta L}^2 \psi d\tau \\ \langle (\Delta M)^2 \rangle &= \int \psi^* \hat{\Delta M}^2 \psi d\tau \end{aligned} \right\} \quad (12.14)$$

$$\langle K \rangle = \int \psi^* \hat{K} \psi d\tau. \quad (12.15)$$

В теории вероятностей величины $\langle (\Delta L)^2 \rangle$ и $\langle (\Delta M)^2 \rangle$ называются дисперсиями, а положительные значения квадратных корней из этих выражений называют средним квадратичным отклонением.

В силу условий (12.6) квадратный трехчлен (12.13) является неотрицательным. В таком случае коэффициенты этого трехчлена должны удовлетворять неравенству, которое известно еще из курса средней школы:

$$\langle (\Delta L)^2 \rangle \cdot \langle (\Delta M)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle K \rangle^2 \quad (12.16)$$

Неравенство (12.16) называется соотношением неопределенности для физических величин, описываемых операторами \hat{L} и \hat{M} .

Для интерпретации возьмем положительное значение квад-

ратного корня из выражения (I2.I6):

$$\sqrt{\langle(\Delta L)^2\rangle} \cdot \sqrt{\langle(\Delta M)^2\rangle} \geq \frac{1}{2} |\langle K \rangle|. \quad (I2.I7)$$

Нами было сделано предположение, что операторы \hat{L} и \hat{M} не коммутируют, значит оператор \hat{K} отличается от нуля. Рассмотрим сначала случай, если $\hat{K} = const$. Тогда из формулы (I2.I5) следует, что $\langle K \rangle \neq 0$. В связи с этим на основании формулы (I2.I7) существует определенная связь между средними квадратичными отклонениями физических величин, описываемых операторами \hat{L} и \hat{M} . Если, например, одна величина имеет определенное значение (ее среднее квадратичное отклонение равно нулю), то среднее квадратичное отклонение второй величины становится бесконечно большим. Это говорит о том, что вторая величина является неопределенной.

Если оператор \hat{K} не является константой, то в соответствии с формулой (I2.I5) в общем $\langle K \rangle$ отличается от нуля и существует связь между средними квадратичными отклонениями, как ранее указывалось. Но могут существовать частные состояния (для которых волновая функция ψ имеет специальный вид), когда интеграл в формуле (I2.I5) обращается в нуль. Для таких состояний $\langle K \rangle = 0$ и отсутствует связь между средними квадратичными отклонениями.

§ I3. Примеры на соотношение неопределенности

Выберем в общем соотношении неопределенности (I2.I7) операторы \hat{L} и \hat{M} следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \hat{L} &= \hat{x} \\ \hat{M} &= \hat{p}_x, \end{aligned} \right\} \quad (I3.I)$$

где \hat{x} и \hat{p}_x соответственно операторы координаты x и компонента импульса. Оператор \hat{K} для этого случая вычислен

нами в § 10, где было найдено, что $\hat{k} = k = \text{const}$. (см. формулу 10.14). В связи с этим из выражения (12.17) получим:

$$\sqrt{\langle(\Delta x)^2\rangle} \sqrt{\langle(\Delta p_x)^2\rangle} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (13.2)$$

Это неравенство называют соотношением неопределенности Гейзенберга, по имени немецкого физика, который впервые обнаружил соотношения такого типа в 1927 году.

Из формулы (13.2) видим, что в состоянии, в котором x - компонент импульса частицы имеет определенное значение, ее координата x является неопределенной и наоборот: в состоянии, в котором координата x частицы имеет определенное значение x - компонент импульса является неопределенным. Аналогичные соотношения неопределенности получим и для других координатных осей на основании формулы (10.15) и (12.17). Выпишем их все вместе:

$$\left. \begin{aligned} \sqrt{\langle(\Delta x)^2\rangle} \sqrt{\langle(\Delta p_x)^2\rangle} &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \sqrt{\langle(\Delta y)^2\rangle} \sqrt{\langle(\Delta p_y)^2\rangle} &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \sqrt{\langle(\Delta z)^2\rangle} \sqrt{\langle(\Delta p_z)^2\rangle} &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \right\} \quad (13.3)$$

В более популярном изложении обозначают обычно $\sqrt{\langle(\Delta x)^2\rangle} \equiv \Delta x$, $\sqrt{\langle(\Delta p_x)^2\rangle} \equiv \Delta p_x$ и т.д. Эти величины называют просто неопределенностями координаты и соответствующего компонента импульса. Кроме этого, в популярном изложении обычно записывают формулу (13.3) приближенно с точностью до порядка величины в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p_x &\approx \hbar \\ \Delta y \cdot \Delta p_y &\approx \hbar \\ \Delta z \cdot \Delta p_z &\approx \hbar \end{aligned} \right\} \quad (13.4)$$

Формулы (I3.4) позволяют следующую интерпретацию. Если при измерениях координата x частицы оказывается в промежутке длиной Δx , то величину x — компонента импульса можно найти в промежутке длиной $\Delta p_x \approx \frac{\hbar}{\Delta x}$ и т.д. При этом может возникнуть частный случай, когда с некоторой точностью одновременно выполняются условия:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\Delta x}{|x|} \ll 1, \quad \frac{\Delta p_x}{|p_x|} \ll 1 \\ \frac{\Delta y}{|y|} \ll 1, \quad \frac{\Delta p_y}{|p_y|} \ll 1 \\ \frac{\Delta z}{|z|} \ll 1, \quad \frac{\Delta p_z}{|p_z|} \ll 1. \end{aligned} \right\} \quad (\text{I3.5})$$

Если выполняются условия (I3.5), то с некоторой точностью одновременно фиксируемы координаты и компоненты импульса. Это — ситуация, характерная для классической механики. При таких условиях в рамках некоторой точности можно говорить и о траектории частицы.

По аналогии с соотношением неопределенности между координатами и компонентами импульса частицы существует соотношение неопределенности между временем и энергией. Энергию описывает гамильтониан (§ 7). Для получения соотношения неопределенности между временем и энергией следует исходить из коммутатора $[\hat{H}, t]$. Для нахождения такого коммутатора существенное значение имеет полученный из уравнения Шредингера (7.5) результат о том, что действие оператора \hat{H} на волновую функцию дает тот же результат, что и действие оператора $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$. Далее ход рассуждений аналогичен вычислениям коммутатора $[\hat{p}_x, \hat{\lambda}]$. Результат отличается от представленного в формуле (I0.I3) лишь по знаку. Но это отличие знака не играет существенной роли, так как в общем виде в соотношении неопределенности (I2.I6) стоит $\langle k \rangle^2$. Выпишем результат в форме, подобной (I3.4). Получим соотношение неопределенности для энергии и времени в следующем виде:

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar. \quad (\text{I3.6})$$

Здесь ΔE — промежуток значений энергии, куда откладываются измеренные значения, Δt — промежуток времени, в который осуществляют измерения. Поскольку процесс измерения энергии какого-либо состояния может происходить лишь в промежутке времени Δt , который не превышает времени жизни такого состояния τ , то в соответствии с формулой (13.6) неточность измерения энергии состояния составляет $\sim \frac{\hbar}{\tau}$. Эту величину обычно называют шириной уровня энергии (обозначается через Γ). Следовательно,

$$\Gamma \approx \frac{\hbar}{\tau}. \quad (13.7)$$

Отметим, что на основе общего соотношения неопределенности (12.16) удалось решить проблему дуализма света. Если рассматривать свет на базе квантовой теории электромагнитного поля, то оказывается, что оператор числа фотонов и оператор фазы поля не коммутируют. Исходя из формулы (12.16), получается следующее соотношение неопределенности для электромагнитного поля:

$$\Delta n \cdot \Delta \varphi \approx 1, \quad (13.8)$$

где Δn и $\Delta \varphi$ соответственно неопределенности числа фотонов и фазы поля.

В состоянии, для которого $\Delta n = 0$, число фотонов имеет определенное значение. Другими словами, это означает проявление корпускулярного аспекта света. Из формулы (13.8) следует теперь, что $\Delta \varphi \rightarrow \infty$, т.е. фаза поля при этом неопределенна. Иначе говоря, это означает, что не наблюдается волновой аспект. Аналогично, когда $\Delta \varphi = 0$ (на передний план выходит волновой аспект), $\Delta n \rightarrow \infty$ (корпускулярный аспект остается незамеченным).

Обратимся к конкретным примерам, иллюстрирующим соотношение неопределенности Гейзенберга.

Пример I. Пусть пуля, масса которой $m = 10$ г, движется со скоростью $v = 10^3 \frac{м}{с}$, и определена эта скорость с относительной погрешностью $\eta = 10^{-6}$. Возьмем ось x в на-

правлении движения пули. Неопределенность импульса Δp_x в данных условиях равна $\eta m v$. Найдем, исходя из первой формулы системы (I3.4), неопределенность координаты пули:

$$\Delta x \approx \frac{\hbar}{m v \eta} . \quad (\text{I3.9})$$

Подставляя численные значения величин, получим $\Delta x \approx 10^{-29}$ м. Очевидно, такой результат не представляет ограничения для практического определения места нахождения пули. Таким образом, в данном случае можно практически достичь состояния, когда $\frac{\Delta x}{\lambda} \ll 1$. Если учесть, что приведенное значение η позволяет считать и $\frac{\Delta p}{p} \ll 1$, то выполняются условия классической физики (I3.5). Этот результат связан с тем обстоятельством, что для процессов, происходящих с макроскопическими телами, постоянная Планка имеет ничтожно малую величину.

Пример 2. Рассмотрим электрон в атоме водорода. Для оценки Δx можно выбрать величину порядка размеров атома: $\Delta x \approx 10^{-10}$ м. Найдем из формулы (I3.4) неопределенность импульса электрона и после этого в целях наглядности неопределенность скорости:

$$\Delta v_x \approx \frac{\hbar}{m \Delta x} . \quad (\text{I3.10})$$

Из формулы (I3.10) найдем $\Delta v_x \approx 10^6$ м/с. Для сравнения вспомним, что порядок скорости электрона в атоме имеет такую же величину $v \approx 10^6$ м/с (такую оценку получаем на основании теории Бора). Следовательно, в нашем случае $\frac{\Delta v_x}{v} \approx 1$. Условия (I3.5) здесь не выполняются. Значит классическая механика для описания поведения электрона в атоме неприемлема.

Пример 3. Проанализируем опыт Резерфорда, в котором атомы бомбардировали α - частицами. Кинетическая энергия этих частиц $W_{кин.} \approx 1 \text{ МэВ}$. Чтобы с помощью α - частиц изучать строение атома, неопределенность их координат не может быть больше, чем размер атома. Следовательно, верхним

пределом выбираем $\Delta x \approx 10^{-10}$ м. Пользуясь формулой (13.10), куда теперь надо подставлять массу α - частицы, получим $\Delta v \approx 10^3$ м/с. Сравним эту неопределенность с величиной самой скорости частиц, которую можно определить, исходя из кинетической энергии. Так как $W_{кин.} \approx 1 \text{ МэВ}$ значительно меньше энергии покоя частицы ($\sim 4 \cdot 10^3 \text{ МэВ}$), то можно использовать ньютоновскую механику, откуда

$$v = \sqrt{\frac{2 W_{кин.}}{m}} \quad (13.11)$$

Подставляя сюда массу α - частицы и используемый в опыте порядок величины энергии, получим $v \approx 10^7$ м/с. Сравнение с ранее приведенной величиной Δv показывает, что $\frac{\Delta v}{v} \approx 10^{-4}$. Следовательно, при интерпретации опыта Резерфорда можно исходить в известных пределах из классической механики.

Представляет определенный интерес вычисление длины волны де Бройля α - частицы в данных условиях. Из формулы (3.2) получим $\lambda \approx 10^{-14}$ м. Эта длина волны значительно меньше, чем размер атома $\alpha \approx 10^{-10}$ м. Здесь выполняется условие:

$$\lambda \ll \alpha, \quad (13.12)$$

т.е. длина волны де Бройля частицы значительно меньше, чем характеристический размер системы. В таком случае, как мы убедились выше, вполне можно использовать классическую механику. В соответствии (d) из четырехугольника § I условие (13.12) описывает переход от квантовой механики к классической механике. Здесь имеется полная аналогия с соответствием (б). Как известно, переход от волновой оптики к геометрической возможен при малых длинах волн, т.е. должно выполняться условие (13.12), где λ означает длину волны света.

§ 14. Свойства момента импульса

Операторы компонентов орбитального момента импульса у нас уже определены ранее выражениями (II.2).

Вычислим, исходя из них, на основании формулы (9.27) коммутатор:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) - (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y). \quad (14.1)$$

Раскроем скобки, имея в виду, что операторы в общем случае не коммутируют. В связи с этим придется сохранить прежний порядок сомножителей после открытия скобок. Таким образом получим:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \hat{y}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y - \hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y. \quad (14.2)$$

Проанализируем члены выражения с одинаковым обозначением. Начнем с тех, которые подчеркнуты одной пунктирной линией. Из формул (10.16) и (10.18) следует, что здесь все операторы коммутируют друг с другом. Поэтому при умножении с ними можно обращаться, как с обычными числами. Эти члены очевидно взаимно уничтожаются. Члены, подчеркнутые двумя пунктирными линиями, на основании формул (10.16) - (10.18) содержат множители, которые все коммутируют друг с другом. Значит, и эти члены взаимно уничтожаются. В первом члене выражения, подчеркнутого одной волнистой линией, множители \hat{z} и \hat{p}_x коммутируют (см. формулу (10.16)), $j = 3, k = 1$. Следовательно, можно \hat{p}_x написать перед \hat{z} , т.е. $\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y$; операторы \hat{p}_z и \hat{p}_x коммутируют (см. формулу (10.18)), так получим $\hat{y}\hat{p}_x\hat{p}_z\hat{z}$. Аналогично приводится к виду $\hat{x}\hat{p}_z\hat{p}_y\hat{z}$ и другой член выражения, подчеркнутый одной волнистой линией. Тем же методом можно преобразовать члены, подчеркнутые двой-

ной волнистой линией, так, чтобы в конце произведения получились множители $\hat{z}\hat{p}_z$. Результат следующий:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hat{y}\hat{p}_x\hat{p}_z\hat{z} - \hat{x}\hat{p}_y\hat{p}_z\hat{z} - \hat{y}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_z + \hat{x}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_z = \\ &= \hat{y}\hat{p}_x(\hat{p}_z\hat{z} - \hat{z}\hat{p}_z) + \hat{x}\hat{p}_y(\hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z}). \end{aligned} \quad (I4.3)$$

В круглых скобках мы имеем коммутаторы (см. формулу (9.27)):

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{y}\hat{p}_x[\hat{p}_z, \hat{z}] + \hat{x}\hat{p}_y[\hat{z}, \hat{p}_z]. \quad (I4.4)$$

Первый из них можно записать на основании формулы (9.28) в виде $[\hat{z}, \hat{p}_z]$. Тогда имеем:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)[\hat{z}, \hat{p}_z]. \quad (I4.5)$$

Опираясь на формулу (10.16) (где $j = k = 3$), получим:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x). \quad (I4.6)$$

В круглых скобках на основании формулы (11.2) содержится оператор \hat{L}_z . Следовательно:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar L_z \quad (I4.7)$$

Так как на основании выражения (I4.7) коммутатор $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$ отличен от нуля, то отсюда следует (смотри конец текста § II), что x - и y - компоненты орбитального момента импульса не могут иметь одновременно определенных значений.

Аналогичным способом можно получить коммутаторы и для других компонентов орбитального момента импульса. Результаты получаются из формулы (I4.7) путем циклической перестановки индексов. Выпишем их вместе с ранее приведенными:

$$\left. \begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y \end{aligned} \right\} \quad (14.8)$$

Формулы (14.8) используются в квантовой механике для обобщения. На их основании дается общее определение момента импульса. Моментом импульса называют вектор, компоненты которого описывают эрмитовы операторы \hat{I}_x , \hat{I}_y и \hat{I}_z , удовлетворяющие условиям:

$$\left. \begin{aligned} [\hat{I}_x, \hat{I}_y] &= i\hbar \hat{I}_z \\ [\hat{I}_y, \hat{I}_z] &= i\hbar \hat{I}_x \\ [\hat{I}_z, \hat{I}_x] &= i\hbar \hat{I}_y \end{aligned} \right\} \quad (14.9)$$

Из формул (14.9) следует, что все три компонента момента импульса не имеют одновременно определенных значений (см. текст в конце § II).

Составим оператор, описывающий квадрат момента импульса:

$$\hat{I}^2 = \hat{I}_x^2 + \hat{I}_y^2 + \hat{I}_z^2. \quad (14.10)$$

Вычислим коммутатор $[\hat{I}^2, \hat{I}_z]$. На основании формулы (9.27) и (14.10) получим:

$$[\hat{I}^2, \hat{I}_z] = \hat{I}_x^2 \hat{I}_z + \hat{I}_y^2 \hat{I}_z - \hat{I}_z \hat{I}_x^2 - \hat{I}_z \hat{I}_y^2. \quad (14.11)$$

Сделаем преобразования следующего характера, которые опишем детально на примере первого члена выражения. С помощью определения произведения операторов можно $\hat{I}_x^2 \hat{I}_z$ представить в виде $\hat{I}_x \hat{I}_x \hat{I}_z$. Заменяем произведение $\hat{I}_x \hat{I}_z$ из третьей формулы системы (14.9) через $\hat{I}_z \hat{I}_x$. Таким образом, приведем к выражению:

$$\hat{I}_x^2 \hat{I}_z = \hat{I}_x \hat{I}_z \hat{I}_x - i\hbar \hat{I}_x \hat{I}_y. \quad (14.12)$$

Преобразовав аналогичным образом остальные члены выражения (I4.II), после вычитания из суммы первых двух членов суммы последних двух получим простой результат:

$$[\hat{I}^2, \hat{I}_z] = 0. \quad (I4.I3)$$

Формула (I4.I3) показывает, что квадрат момента импульса и его одна составляющая могут одновременно иметь определенные значения (см. снова § II).

Так как операторы \hat{I}^2 и \hat{I}_z коммутируют, они имеют общие собственные функции (§ II):

$$\left. \begin{aligned} \hat{I}^2 \psi &= \lambda \hbar^2 \psi \\ \hat{I}_z \psi &= m \hbar \psi \end{aligned} \right\} \quad (I4.I4)$$

где общую собственную функцию обозначили символом ψ , а собственные значения — $\lambda \hbar^2$ и $m \hbar$ (см. формулу (8.II)). На основании § II $\lambda \hbar^2$ и $m \hbar$ соответственно являются измеряемыми значениями величин квадрата момента импульса и одной из его проекций.

Из определения момента импульса (I4.9) следует, что компонент момента импульса имеет такую же размерность, что и постоянная \hbar . Следовательно, в формуле (I4.I4) λ и m являются безразмерными постоянными.

Интерес представляет то обстоятельство, что входящие в уравнения (I4.I4) константы λ и m , характеризующие собственные значения, можно найти без решения уравнения, опираясь лишь на определение момента импульса (I4.9). Доказательство этого утверждения проводят в цикле теоретической физики. Мы же ограничимся лишь изложением результатов.

Вычисление показывает, что постоянная λ выражается так:

$$\lambda = j(j+1), \quad (I4.I5)$$

где j — или неотрицательное целое число

$$j = 0, 1, 2, \dots \quad (I4.I6)$$

или полуцелое положительное число:

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \quad (14.17)$$

Целые или полуцелые числа, которые характеризуют собственные значения операторов физических величин, называют квантовыми числами.

Квантовое число j определяет измеряемое значение величины квадрата момента импульса в виде $j(j+1)\hbar^2$ (см. формулу (14.15) и текст после формулы (14.14)). Для наглядности можно сказать, что длина вектора момента импульса есть $\hbar \sqrt{j(j+1)}$.

При данном j квантовое число m имеет следующие значения:

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (14.18)$$

Если j является целым числом, то по формуле (14.18) и m будет также целым числом. Если j является полуцелым, то и m будет таким же. Например, если $j = \frac{3}{2}$, то $m = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$.

Обращаем внимание на то, что в случае полуцелых значений j квантовое число m не может быть равным нулю. Приведенный пример проиллюстрируем на рисунке 7, где момент импульса измерен в единицах \hbar . Начертим сначала окружность с радиусом $\sqrt{j(j+1)} \approx 1,94$ (показана пунктиром). Конец вектора момента импульса должен лежать на этой окружности, а возможные способы ориентирования вектора определяются так, чтобы на оси z образовались проекции $-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$. Явление, состоящее в том, что вектор момента импульса может быть ориентирован в пространстве только определенным образом, называется пространственным квантованием.

Следует подчеркнуть следующее обстоятельство. Квантовое число j , которое описывает абсолютную величину момента импульса, является неотрицательным. Квантовое число m , которое описывает значение проекции момента импульса, может быть как положительным, так и отрицательным, или нулем (последняя

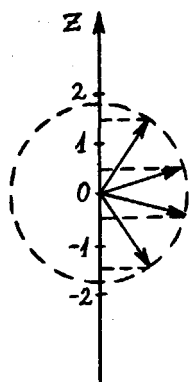


Рис. 7.

возможность реализуется только при целочисленных значениях j).

Положение о том, что у трех компонентов момента импульса нет одновременно определенных значений и что у квадрата момента импульса и одного компонента могут определенные значения быть (см. формулы (I4.9) и (I4.13)), можно показать наглядно. На основании сказанного ясно, что у вектора момента импульса не может быть определенного направления в пространстве. Но одновременно существует определенное значение длины вектора и ее проекции, например, на ось z . Обозначим этот факт на основании формул (I4.14) и (I4.15) следующим образом:

$$|\vec{I}| = \hbar \sqrt{j(j+1)} \quad (\text{I4.19})$$

$$I_z = m \hbar \quad (\text{I4.20})$$

Неопределенность двух других проекций, описывается наглядно за счет того, что один конец вектора \vec{I} находится в вершине конуса, а другой движется равномерно вдоль конуса так, что

на оси z , являющейся одновременно и осью конуса, образуется проекция $m\hbar$ (см. рис. 8). Образующая конуса и ось z составляют при этом угол θ , который подчиняется условию:

$$\cos \theta = \frac{m}{\sqrt{\lambda}} = \frac{m}{\hbar \sqrt{j(j+1)}} \quad (14.21)$$

Коротко говорят, что вектор \vec{I} прецессирует вокруг оси z .

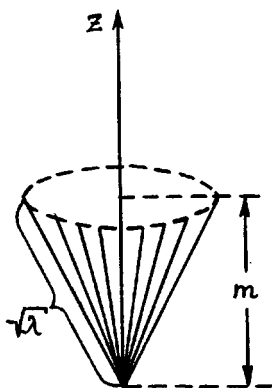


Рис. 8.

§ 15. Сложение моментов импульсов

Допустим, что нам надо сложить моменты импульсов двух частиц, или моменты различной природы у одной частицы (например, орбитальный и собственный (спиновый) моменты электрона). Обозначим операторы складываемых моментов импульсов соответственно через $\hat{I}_{1x}, \hat{I}_{1y}, \hat{I}_{1z}$ и $\hat{I}_{2x}, \hat{I}_{2y}, \hat{I}_{2z}$. Квантовые числа, описывающие абсолютные значения этих моментов

импульса, обозначим через j_1 и j_2 , а квантовые числа, описывающие проекции, обозначим соответственно через m_1 и m_2 . Составим операторы:

$$\left. \begin{aligned} \hat{I}_x &= \hat{I}_{1x} + \hat{I}_{2x} \\ \hat{I}_y &= \hat{I}_{1y} + \hat{I}_{2y} \\ \hat{I}_z &= \hat{I}_{1z} + \hat{I}_{2z} \end{aligned} \right\} \quad (15.1)$$

Исходя из формулы (9.27) и (15.1), вычислим коммутаторы:

$$\begin{aligned} [\hat{I}_x, \hat{I}_y] &= (\hat{I}_{1x} + \hat{I}_{2x})(\hat{I}_{1y} + \hat{I}_{2y}) - \\ &- (\hat{I}_{1y} + \hat{I}_{2y})(\hat{I}_{1x} + \hat{I}_{2x}). \end{aligned} \quad (15.2)$$

После открытия скобок можно члены выражения, исходя из понятия коммутатора (9.27), сгруппировать следующим образом:

$$[\hat{I}_x, \hat{I}_y] = [\hat{I}_{1x}, \hat{I}_{1y}] + [\hat{I}_{1x}, \hat{I}_{2y}] + [\hat{I}_{2x}, \hat{I}_{1y}] + [\hat{I}_{2x}, \hat{I}_{2y}]. \quad (15.3)$$

Первый и четвертый коммутаторы в правой части равенства можно найти по первой формуле из системы (14.9):

$$\left. \begin{aligned} [\hat{I}_{1x}, \hat{I}_{1y}] &= i\hbar \hat{I}_{1z} \\ [\hat{I}_{2x}, \hat{I}_{2y}] &= i\hbar \hat{I}_{2z}. \end{aligned} \right\} \quad (15.4)$$

Далее проанализируем коммутатор $[\hat{I}_{1x}, \hat{I}_{2y}]$. Сначала рассмотрим случай, когда имеет место сложение моментов импульсов двух частиц. Тогда \hat{I}_{1x} зависит только от координат или параметров первой частицы, \hat{I}_{2y} — только от координат или параметров второй. Так как координаты или параметры двух частиц являются независимыми переменными, то их операторы коммутируют. Если имеем дело с моментами разной природы одной частицы, то \hat{I}_{1x} зависит только от параметров, характе-

ризующих момент первой природы, а \hat{I}_{2y} - только от параметров другой природы. Эти параметры являются независимыми переменными. Значит, операторы в этом случае коммутируют. На этом же основании коммутатор $[\hat{I}_{2x}, \hat{I}_{2y}]$ также равен нулю.

Учитывая вышесказанное, с помощью формул (I5.1), (I5.3) и (I5.4) найдем:

$$[\hat{I}_x, \hat{I}_y] = i\hbar \hat{I}_z. \quad (I5.5)$$

Аналогично можно получить и другие коммутаторы $[\hat{I}_y, \hat{I}_z]$ и $[\hat{I}_z, \hat{I}_x]$. Сравнивая эти результаты с квантовомеханическим определением момента импульса (I4.9) приходим к выводу, что операторы, образованные на основании формулы (I5.1) действительно описывают момент импульса в квантовомеханическом смысле.

Для результирующего момента импульса остаются в силе все результаты предыдущего параграфа, так как они получены на основании выражения (I4.9). Так мы можем абсолютное значение результирующего момента импульса описать квантовым числом j и проекцию квантовым числом m , при этом остаются в силе формулы (I4.15) и (I4.18).

С практической точки зрения возникает вопрос, как найти квантовые числа j и m для результирующего момента, если известны соответствующие квантовые числа j_1, j_2 и m_1, m_2 моментов-слагаемых.

Начнем с исследования сложения проекций. Сначала на основании второго уравнения системы (I4.14) выпишем:

$$\left. \begin{aligned} \hat{I}_{1z} \psi_1 &= m_1 \hbar \psi_1 \\ \hat{I}_{2z} \psi_2 &= m_2 \hbar \psi_2, \end{aligned} \right\} \quad (I5.6)$$

где ψ_1 и ψ_2 - собственные функции складываемых моментов.

Применим теперь оператор \hat{z} - компонента результирующего момента импульса к произведению $\psi_1 \psi_2$ и используем формулу (5.4):

$$\hat{I}_z \psi_1 \psi_2 = \hat{I}_{1z} \psi_1 \psi_2 + \hat{I}_{2z} \psi_1 \psi_2. \quad (15.7)$$

В первом члене правой части выражения \hat{I}_{1z} действует лишь на функцию ψ_1 (из соображений, аналогичных тем, которые высказаны в тексте между формулами (15.4) и (15.5)), во втором члене \hat{I}_{2z} действует только на ψ_2 . Поэтому, учитывая формулу (15.6), получим

$$\hat{I}_z \psi_1 \psi_2 = (m_1 + m_2) \hbar \psi_1 \psi_2. \quad (15.8)$$

Из выражения (15.8) видим, что $(m_1 + m_2) \hbar$ является собственным значением \hat{I}_z — компонента результирующего момента импульса. Сравнив формулу (15.8) со вторым уравнением системы (14.14), получим правило сложения проекций момента импульса:

$$m = m_1 + m_2. \quad (15.9)$$

Здесь проекции момента импульса измерены в единицах \hbar .

Нахождение квантового числа j гораздо сложнее. Целесообразно сначала рассмотреть конкретный численный пример, для которого возьмем $j_1 = 1$ и $j_2 = \frac{5}{2}$. На основании правила (14.18) найдем значения квантовых чисел m_1 и m_2 :

$$m_1 = -1, 0, 1$$

$$m_2 = -\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}.$$

Составим таблицу 2, в которой на местах пересечения рядов и столбцов напишем числа m по правилу (15.9).

Так как в рядах и в столбцах таблицы представлены все возможные значения m_1 и m_2 , то в местах пересечения их получим все возможные значения m . Начиная с первого ряда и переходя к третьему столбцу, можем убедиться, что существует следующий набор квантовых чисел m : $-\frac{7}{2}, -\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}$. На основании правила (14.18) данному набору проекций

Таблица 2

$m_2 \backslash m_1 =$	- 1	0	1
- $\frac{5}{2}$	- $\frac{7}{2}$	- $\frac{5}{2}$	- $\frac{3}{2}$
- $\frac{3}{2}$	- $\frac{5}{2}$	- $\frac{3}{2}$	- $\frac{1}{2}$
- $\frac{1}{2}$	- $\frac{3}{2}$	- $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$	- $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$
$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$
$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{7}{2}$

соответствует $j = \frac{3}{2}$. Следующим шагом возьмем второй ряд, начиная со значения $m = -\frac{5}{2}$ и увеличивая его на единицу, направимся по второму столбцу. Так получим второй набор квантовых чисел для m : $-\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$. Этому набору по правилу (I4.18) соответствует $j = \frac{5}{2}$. В первом столбце осталась еще совокупность чисел m : $-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$. Отсюда $j = \frac{3}{2}$. Этим мы доказали, что если $j_1 = 1$ и $j_2 = \frac{5}{2}$, то $j = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}$. Обратим внимание на то, что наибольшее значение j является суммой j_1 и j_2 , а наименьшее - их разностью.

Проанализировав общий случай при составлении таблицы, можно получить следующий результат:

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2 + 1|, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2. \quad (\text{I5.10})$$

Здесь j может иметь отличающиеся друг от друга на единицу значения, начиная со значения $|j_1 - j_2|$ до значения $j_1 + j_2$. Припомним, что квантовое число j , которое находится по формуле (I5.10), характеризует абсолютное значение результирующего момента импульса в виде $k\sqrt{j(j+1)}$. Правило (I5.10) называется правилом сложения абсолютных значений моментов импульса.

На основании формулы (I5.10) видим, что абсолютное значение результирующего момента импульса может иметь только определенные дискретные значения. Результат существенно отличается от сложения моментов импульса в классической механике. В классической механике абсолютные значения результирующего момента импульса могут принимать непрерывные значения от разности до суммы абсолютных значений складываемых моментов импульса.

Наконец, рассмотрим сложение моментов импульса на основании наглядной модели, приведенной в предыдущем параграфе. Операторной схеме (I5.1) соответствует в этой модели схема сложения векторов

$$\vec{I} = \vec{I}_1 + \vec{I}_2, \quad (\text{I5.11})$$

где на основании формулы (I4.19):

$$\left. \begin{aligned} |\vec{I}| &= k\sqrt{j(j+1)} \\ |\vec{I}_1| &= k\sqrt{j_1(j_1+1)} \\ |\vec{I}_2| &= k\sqrt{j_2(j_2+1)}. \end{aligned} \right\} \quad (\text{I5.12})$$

Сложение векторов (I5.11) представим сначала с помощью обычного правила параллелограмма (см. рис. 9). Так как векторы \vec{I}_1 и \vec{I}_2 дают определенные проекции на направление вектора \vec{I} , то на основании результатов предыдущего параграфа их проекции на другие оси неопределенны. Чтобы это отразить, векторы \vec{I}_1 и \vec{I}_2 должны прецессировать вокруг результирующего вектора \vec{I} .

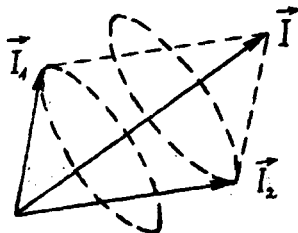


Рис. 9.

§ 16. Свойства орбитального момента импульса

В качестве примера применения результатов двух предыдущих параграфов рассмотрим орбитальный момент импульса. Операторы, описывающие его компоненты, возьмем на основании формулы (II.3). Там использованы декартовы координаты (x, y, z) . В интересах практического применения часто бывает более целесообразным вместо них использовать сферические координаты r, θ, φ , где при этом:

$$\left. \begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi \\ z &= r \cos \theta. \end{aligned} \right\} \quad (16.1)$$

Если преобразовать производные по x, y, z , приведенные в формуле (II.3), на основании выражений (16.1), то получим следующие результаты:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi} \quad (16.2)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (16.3)$$

Для получения формулы (I6.2) использовали формулу (I4.I0) применительно к орбитальному импульсу. Оператор $\Delta_{\theta, \varphi}$ является частью оператора Лапласа, зависящей от углов:

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (\text{I6.4})$$

Особенно прост оператор \hat{L}_z , в случае которого второе уравнение системы (I4.I4) легко интегрируется:

$$\psi = C e^{im\varphi}, \quad (\text{I6.5})$$

где C не содержит аргумента φ .

По физическому содержанию ψ должна быть однозначной. В сферических координатах это выражается следующим образом:

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi). \quad (\text{I6.6})$$

Из формул (I6.5) и (I6.6) получим:

$$e^{2\pi im} = 1. \quad (\text{I6.7})$$

Переписав ее в виде:

$$\cos 2\pi m + i \sin 2\pi m = 1, \quad (\text{I6.8})$$

приходим к выводу, что для орбитального момента импульса m является целочисленной. Из формулы (I4.I8) следует, что и j тоже должна быть целочисленной.

Целое число, которое определяет абсолютное значение орбитального момента импульса, называют орбитальным квантовым числом (употребляют также термин азимутальное квантовое число). Стандартным обозначением орбитального квантового числа является буква l . На основании формулы (I4.I9) $\sqrt{l(l+1)} \hbar$ есть абсолютное значение орбитального момента импульса.

Целое число, определяющее проекцию орбитального момента импульса, называют орбитальным магнитным квантовым числом (обозначение m_l). Происхождение этого названия объясним позже (§ 23). На основании формулы (I4.20) $m_l \hbar$ является проекцией орбитального момента импульса.

Таким образом в формулах § I4 будем в случае орбитального момента импульса брать $j = l$ и $m = m_l$. Тогда из формулы (I4.16) получим:

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad (I6.9)$$

Формула (I4.18) приобретает вид:

$$m_l = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l. \quad (I6.10)$$

В интересах дальнейших практических применений отметим, что в курсе методов математической физики показано, что в случае орбитального момента импульса в системе (I4.14) в роли функции ψ выступает сферическая функция $Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$:

$$\left. \begin{aligned} \hat{L}^2 Y_{lm_l}(\theta, \varphi) &= l(l+1)\hbar^2 Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \\ \hat{L}_z Y_{lm_l}(\theta, \varphi) &= m_l \hbar Y_{lm_l}(\theta, \varphi). \end{aligned} \right\} \quad (I6.11)$$

Зависимость функции $Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$ от φ такая, как в формуле (I6.5), зависимость же от θ намного сложнее; здесь мы ее не будем записывать, но в примерах применения приведем в качестве иллюстрации необходимые графики (см. § 22).

Если необходимо сложить два орбитальных момента, то следует в формуле (I5.10) брать $j = l$, $j_1 = l_1$ и $j_2 = l_2$. Здесь l_1 и l_2 — орбитальные квантовые числа отдельных частиц, а l — орбитальное квантовое число системы. Из формулы (I5.10) получим:

$$l = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, \dots, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2. \quad (I6.12)$$

Так как l_1 и l_2 на основании формулы (I6.9) неотрицатель-

ные целые числа, то и орбитальное квантовое число системы по правилу (I6.I2) тоже будет таковым. Для информации отметим, что орбитальное квантовое число системы в атомной спектроскопии обычно обозначается прописной буквой L .

§ I7. Движение частицы в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме

Исходя из графического изображения потенциальной энергии введем следующую терминологию. Область пространства, в которой полная энергия частицы меньше, чем потенциальная энергия, называется потенциальным барьером. Область пространства, окруженная потенциальными барьерами, в которой полная энергия частицы больше, чем потенциальная энергия, называется потенциальной ямой. Например, на рисунке IO а в области $x < a$ и

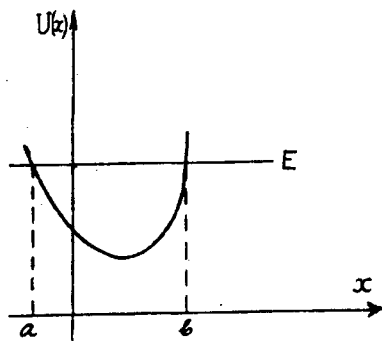


Рис. IO а

$x > b$ существует потенциальный барьер, так как там полная энергия E меньше, чем потенциальная энергия $U(x)$. Область $a < x < b$ является потенциальной ямой. На рисунке IO б в области $x > a$ полная энергия больше, чем потенциальная, но область не называют потенциальной ямой, так как она не окружена потенциальными барьерами.

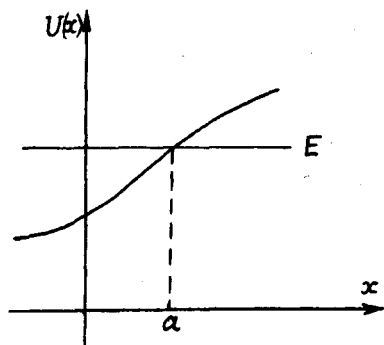


Рис. 10,б

Исследуем движение частицы в одномерном поле, где потенциальная энергия удовлетворяет условиям (см. рис. 11,а):

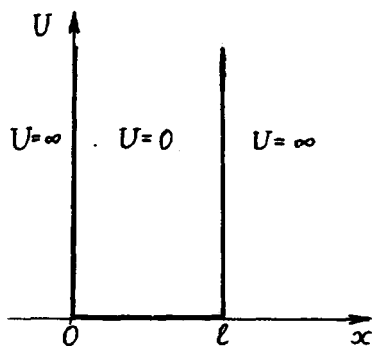


Рис. 11,а

$$U(x) = \left\{ \begin{array}{l} \infty, \text{ если } x \leq 0 \\ 0, \text{ если } 0 < x < \ell \\ \infty, \text{ если } x \geq \ell \end{array} \right. \quad (I7.1)$$

В соответствии с формулой (I7.1) для каждой конечной энергии E в области $x < 0$ и $x > \ell$ существует бесконечно высокий потенциальный барьер. В связи с этим, можно сказать, что в области $0 < x < \ell$ существует бесконечно глубокая потенциальная яма. Точнее говоря, рис. II а изображает бесконечно глубокую одномерную прямоугольную потенциальную яму.

На основании формул (7.II) и (I7.1) можно утверждать, что в данной проблеме гамильтониан не зависит от времени. Следовательно, существуют стационарные состояния. Полная волновая функция выражается с помощью формулы (8.I2) следующим образом:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (I7.2)$$

где ψ и E следует находить в соответствии с формулами (7.II), (8.I3) и (I7.1) из уравнения:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \psi = E \psi. \quad (I7.3)$$

В выражении гамильтониана, который находится в скобках, вместо частной производной взята полная производная, так как ψ зависит только от аргумента x . При решении уравнения (I7.3) потенциальную энергию следует брать из формулы (I7.1).

Решение уравнения (I7.3) позволяет на основании формулы (8.I7) найти плотность вероятности нахождения частицы. Иными словами: $|\psi|^2 dx$ равна вероятности того, что координата частицы находится в промежутке $(x, x + dx)$.

Из формулы (I7.1) видим, что потенциальная энергия становится бесконечной на поверхностях $x = 0$ и $x = \ell$, пере-

секающихся с осью x . Частица не может находиться на этих плоскостях (см. § 7). Таким образом, частица заперта в потенциальной яме, изображенной на рисунке II а. В силу условия 2) из § 7 должны выполняться равенства:

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(l) = 0. \quad (I7.4)$$

Частица может находиться там, где потенциальная энергия не является бесконечной. Исходя из этого, можно на основании формулы (I7.1) уравнение (I7.3) представить в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E \psi. \quad (I7.5)$$

Обозначим

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}; \quad (I7.6)$$

тогда уравнение примет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0. \quad (I7.7)$$

Исследуем сперва частный случай, когда $k = 0$. Согласно формуле (I7.6) в этом случае энергия $E = 0$. Уравнение (I7.7) имеет общее решение:

$$\psi = \alpha + \beta x, \quad (I7.8)$$

где α и β являются постоянными.

Используя граничные условия (I7.4), найдем из формулы (I7.8), что $\alpha = \beta = 0$. Таким образом в случае $k = 0$ волновая функция равняется тождественно нулю. Это однако на основе формулы (8.17) противоречит предположению, что частица

находится в потенциальной яме. Другими словами: в потенциальной яме отсутствует состояние, в котором энергия частицы равна нулю.

Перейдем к рассмотрению случая, когда $k \neq 0$. Уравнение (I7.7) имеет общее решение

$$\psi = a'e^{ikx} + b'e^{-ikx}, \quad (I7.9)$$

где a' и b' — постоянные.

Пользуясь граничными условиями (I7.4), найдем с помощью формулы (I7.9) сначала, что

$$b' = -a', \quad (I7.10)$$

а затем, что

$$a' \sin kl = 0. \quad (I7.11)$$

Из условия (I7.10) формула (I7.9) дает нам:

$$\psi = A \sin kx, \quad (I7.12)$$

где $A = 2a'$

Иследуем теперь условие (I7.11). Если $a' = 0$, то по формуле (I7.12) функция ψ тождественно равняется нулю. Это находится в противоречии с формулой (8.17) при предположении, что частица находится в потенциальной яме. Следовательно, необходимо на основании формулы (I7.11) требовать, что:

$$\sin kl = 0. \quad (I7.13)$$

Синус равен нулю, если его аргумент в целое число раз кратен π :

$$k l = n \pi, \quad (I7.14)$$

где n - целое число. Поскольку наш анализ действует в случае $k \neq 0$, то n не может равняться нулю.

Подставляя величину k из формулы (I7.14) в решение (I7.12), получим

$$\psi = A \sin \frac{n \pi x}{l}. \quad (I7.15)$$

Без ограничения общности это целое число n можно считать положительным. Если n - отрицательное, то $n = -|n|$ и в правой части формулы (I7.15) получим: $-A \sin \frac{|n| \pi x}{l}$. Здесь целое число, стоящее в аргументе, является положительным. Так как A до сих пор не определено, то множитель (-1) можно отнести к определению константы. Значит можно взять:

$$n = 1, 2, 3 \dots \quad (I7.16)$$

В связи с полученным результатом удобно рассмотреть следующее наглядное представление условия (I7.14). Путем сравнения формул (I.5), (8.12) и (I7.9) можно величине k сопоставлять величину $\frac{p}{\hbar}$. Эта величина однако согласно формуле (I.1) равна $\frac{2\pi}{\lambda}$, где λ - длина волны де Бройля. Таким образом получим из условия (I7.14):

$$n \frac{\lambda}{2} = l. \quad (I7.17)$$

Формула (I7.17) показывает, что на ширину потенциальной ямы укладывается целое число полуволин де Бройля.

Учитывая результат (I7.16), видим из формулы (I7.14), что константа k может иметь только дискретные значения. Это, в свою очередь, показывает на основании формулы (I7.6), что энергия частицы в потенциальной яме может принимать

только дискретные значения:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 m e^2} \quad (17.18)$$

Энергия по формуле (8.13) является собственным значением гамильтониана. В связи с этим, на основании определения, данного в § 14, целое число n следует называть квантовым числом. Учитывая определения, данные в § 8 и область изменения квантового числа n (см. формулу (17.6)), видим из выражения (17.18), что для основного состояния $n = 1$, а для возбужденных состояний $n > 1$.

Уровни энергии, определенные выражением (17.18), изображены на рисунке II 6. Здесь E_1 — основной уровень, остальные уровни являются возбужденными уровнями.

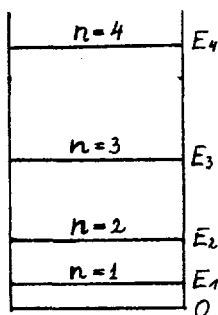


Рис. II, 6

Вычислим, пользуясь формулой (17.18), расстояние между соседними уровнями. По формуле (17.18) энергия — монотонная функция квантового числа n . Поскольку по формуле (17.16) соседние значения n отличаются на единицу, то разность энергий соседних уровней:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 (2n+1)}{2 m l^2}. \quad (I7.19)$$

Если n велико, то из формулы (I7.19) получим:

$$\Delta E_n \approx \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{m l^2}. \quad (I7.20)$$

Сравнение формул (I7.18) и (I7.20) показывает, что в случае больших квантовых чисел n выполняется условие $\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2}{n}$, т.е. происходит относительное сближение уровней энергии. Другими словами: в случае больших квантовых чисел n квантовая механика дает результаты, совпадающие с результатами классической механики. В этом находит свое выражение принцип соответствия, который был сформулирован Н.Бором так: в случае больших квантовых чисел результаты квантовой механики должны совпадать с результатами классической механики. В физике принцип соответствия имеет более универсальное значение. Например, при малых скоростях совпадают результаты классической механики Ньютона и теории относительности Эйнштейна.

Постоянную в формуле (I7.15) найдем из условий нормировки:

$$\int_0^l |\psi|^2 dx = |A|^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n \pi x}{l} dx = 1. \quad (I7.21)$$

Вычисляя интеграл, получим $|A|^2 = \frac{2}{l}$. Так как на основании результатов § 4 постоянная нормировки определена точностью множителя $e^{i\alpha}$ (α — постоянное вещественное число), то можно без ограничения общности выбрать константу A положительной: $A = \sqrt{\frac{2}{l}}$. Таким образом получим из формулы (I7.15) нормированную волновую функцию:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n \pi x}{l}. \quad (I7.22)$$

На основании результатов § 9 полученные волновые функции удовлетворяют условиям ортонормировки

$$\int_0^l \psi_n \psi_m dx = \delta_{nm}. \quad (I7.23)$$

В отличие от общей формулы (9.15) в данном интеграле не нужно пользоваться знаком комплексного сопряжения для второй функции, так как на основании (I7.22) в нашем примере волновые функции являются вещественными.

В качестве иллюстрации на рисунке I2 а представлены функции ψ_n для первых четырех значений n .

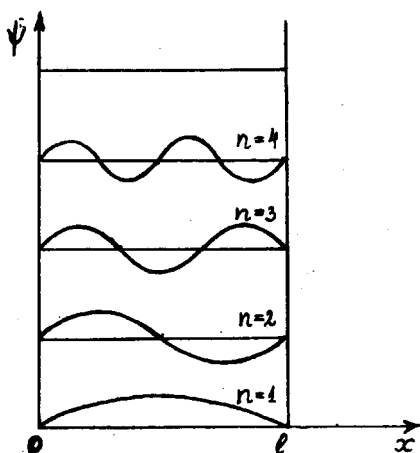


Рис. I2,а

Плотность вероятности $w = |\psi|^2$, вычисленная на основании формул (8.17) и (I7.22), для этих же состояний изображена на рисунке I2 б. Как видно из этого рисунка, результаты квантовой механики существенно отличаются от результатов

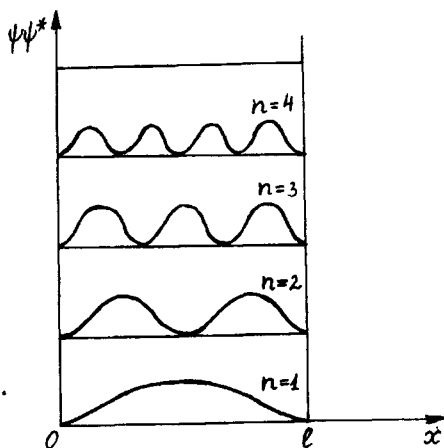


Рис. II,6

классической механики. По представлениям классической механики все положения частицы равновероятны, и в соответствии с этим должно быть $w = \frac{1}{l} = \text{const} \neq 0$. По квантовой механике не может, например, частица в состояниях с $n = 2$ и $n = 4$ находиться в середине потенциальной ямы ($x = \frac{l}{2}$).

Анализ формулы (I7.22) показывает (и это иллюстрирует рисунок I2,а), что волновая функция ψ_n , соответствующая уровню E_n превращается в потенциальной яме $(n - 1)$ раз в нуль (не учитывается обращение ψ_n в нуль на краях потенциальной ямы). Здесь находит отражение частный случай так называемой осцилляционной теоремы: если расположить значения энергии $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$ дискретного спектра для одномерного движения в возрастающем порядке ($E_1 < E_2 < \dots < E_n < \dots$), то волновая функция $\psi_n(x)$, соответствующая уровню энергии E_n обращается $(n - 1)$ раз в нуль при конечных значениях x . Если частица может находиться только на конечном отрезке оси x , то названные $n - 1$ нули волновой функции будут находиться внутри этого отрезка. Детальным анализом данной тео-

ремы занимаются в цикле теоретической физики.

Введем вместо x новую переменную x' по формуле

$$x' = x - \frac{\ell}{2}. \quad (I7.24)$$

Этот аргумент изменяется в промежутке: $-\frac{\ell}{2} \leq x' \leq \frac{\ell}{2}$. Середина ямы имеет координату $x' = 0$.

Обозначим волновую функцию, выраженную в штрихованной переменной через $\psi_n(x')$, т.е. имеем

$$\psi_n(x') = \psi_n\left(x' + \frac{\ell}{2}\right). \quad (I7.25)$$

Теперь получим с помощью формулы (I7.22):

$$\psi_n(x') = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{n\pi x'}{\ell} & n - \text{четное} \\ \sqrt{\frac{2}{\ell}} \cos \frac{n\pi x'}{\ell} & n' - \text{нечетное} \end{cases} \quad (I7.26)$$

Здесь в первой и второй формулах опущены несущественные множители $(-1)^{n/2}$ и $(-1)^{(n-1)/2}$ соответственно (см. § 4).

В связи с записью (I7.26) часто вводят квантовое число n' по формуле

$$n' = n - 1. \quad (I7.27)$$

Таким образом основное состояние имеет $n' = 0$, а для возбужденных состояний $n' > 0$.

Введем еще обозначение

$$\psi_n'(x') = \psi_{n'+1}(x'). \quad (I7.28)$$

Тогда получим из (I7.26) и (I7.27):

$$\psi_{n'}'(x') = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{(n'+1)\pi x'}{\ell} & n' - \text{нечетное} \\ \sqrt{\frac{2}{\ell}} \cos \frac{(n'+1)\pi x'}{\ell} & n' - \text{четное} \end{cases} \quad (17.29)$$

Теперь удобно познакомиться с оператором инверсии (обычно обозначается через \hat{P}). В одномерном случае этот оператор определяется так:

$$\hat{P}f(x') = f(-x'), \quad (17.30)$$

где $f(x')$ — произвольная функция аргумента x' .

Если подействовать оператором инверсии на функцию $\psi_{n'}'(x')$, то получим из (17.29):

$$\hat{P}\psi_{n'}'(x') = (-1)^{n'} \psi_{n'}'(x'). \quad (17.31)$$

Если n' является четным, то функция $\psi_{n'}'$ является четной функцией. При этом принято говорить, что четность волновой функции есть $+1$. Если же волновая функция является нечетной, то говорят, что ее четность равна -1 . В курсе теоретической физики доказывается, что четность волновой функции имеет определенное значение, если гамильтониан не изменяется под действием оператора инверсии.

Наконец, рассмотрим три численных примера.

В первом примере выберем в роли m массу молекулы (порядка $\sim 10^{-27}$ кг) и $\ell \approx 0,1$ м. Это приблизительно соответствует ситуации, когда молекулы газа находятся в сосуде, у которого расстояние между стенками 10 см. Из формулы (17.20) получим при этих условиях разность энергий соседних уровней $\Delta E_n \approx 10^{-20} n^2 \text{ эВ}$. Исследуем, какова могла бы быть величина квантового числа n . Порядок величин энергии, соответствующей среднему значению кинетической энергии молекул газа равна $\sim kT$ (k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура). Приравнявая эту величину правой части выраже-

ния (17.18), получим для квантового числа n оценку:

$$n \approx \frac{\ell}{\hbar} \sqrt{k T m} . \quad (17.32)$$

Из этой формулы получим при комнатной температуре $n \approx 10^9$. Следовательно, порядок ΔE_n будет $10^{-20} \cdot 10^9 \text{ эВ} = 10^{-11} \text{ эВ}$. Напомним, что на основании результатов опыта Франка-Герца воспринимаются обычно дискретными такие энергетические уровни, расстояния между которыми порядка 1 эВ. В нашем примере они приблизительно в 10^{11} раз меньше. Так плотно расположенные энергетические уровни воспринимаются как сплошной спектр.

Во втором примере возьмем в роли m массу электрона, а ℓ оставим прежним (свободные электроны в металле). Формула (17.20) даст нам теперь $\Delta E_n \approx 10^{-16} \cdot n \text{ эВ}$. Далее можно, как и в предыдущем примере, убедиться, что уровни энергии располагаются очень плотно.

В третьем примере возьмем в роли m массу электрона, а ℓ возьмем порядка размеров атома ($\ell \approx 10^{-10}$ м). Из формулы (17.20) следует $\Delta E_n \approx 10^2 \cdot n \text{ эВ}$. По сравнению с предыдущими примерами, здесь особенно реально проявляется дискретность уровней энергии.

§ 18. Частица в бесконечно глубокой трехмерной потенциальной яме

Рассмотрим движение частицы в следующем особом поле. Потенциальная энергия равна нулю в прямоугольном параллелепипеде с ребрами a, b, c (см. рис. 13). Вне этого параллелепипеда пусть потенциальная энергия превращается в бесконечность.

Напомним из § 7, что частица не может находиться там, где потенциальная энергия бесконечна. Таким образом, в нашем примере частица заперта в бесконечно глубокой трехмерной потенциальной яме.

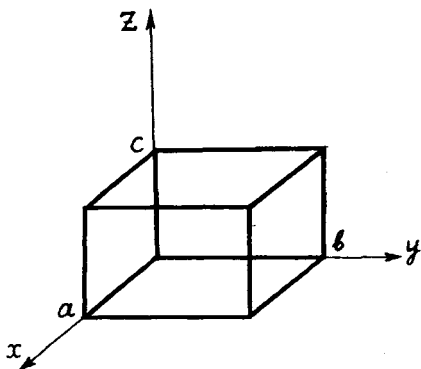


Рис. 13.

В соответствии с формулами (7.11) и (8.13) уравнение Шредингера для стационарных состояний в трехмерной потенциальной яме имеет следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = E \psi. \quad (18.1)$$

Так как частица не может выйти за пределы потенциальной ямы, то при решении уравнения (18.1) на основе формулы (8.17) надо учитывать следующие граничные условия:

$$\left. \begin{aligned} \psi(0, y, z) &= 0 \\ \psi(a, y, z) &= 0 \\ \psi(x, 0, z) &= 0 \\ \psi(x, b, z) &= 0 \\ \psi(x, y, 0) &= 0 \\ \psi(x, y, c) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (18.2)$$

Здесь первое условие показывает превращение волновой функции в нуль на грани $x = 0$, второе - на грани $x = a$ и т.д.

Найдем решение уравнения (I8.I) методом разделения переменных:

$$\psi(x, y, z) = u(x) \cdot v(y) \cdot w(z), \quad (I8.3)$$

где функции u , v и w зависят только от соответствующих аргументов x , y и z .

Подставив решение (I8.3) в уравнение (I8.I) и поделив все выражение на произведение $u \cdot v \cdot w$, получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{u''}{u} + \frac{v''}{v} + \frac{w''}{w} \right) = E, \quad (I8.4)$$

где штрих означает производную по тому аргументу, от которого соответствующая функция зависит. Например, $w'' = \frac{d^2 w}{dz^2}$.

Левая часть выражения (I8.4) является суммой трех членов, из которых первый зависит только от x , второй - только от y и третий - от z . Правая часть этого выражения является константой (см. § 8). Формула (I8.4) получена из уравнения Шредингера для стационарных состояний, которое действительно для произвольной точки (x, y, z) потенциальной ямы. Поэтому равенство (I8.4) может выполняться лишь при условии, что каждое слагаемое левой части является константой:

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{u''}{u} &= E_1 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{v''}{v} &= E_2 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{w''}{w} &= E_3. \end{aligned} \right\} \quad (I8.5)$$

Здесь E_1 , E_2 и E_3 - константы, между которыми существует следующая связь:

$$E_1 + E_2 + E_3 = E. \quad (18.6)$$

Представим уравнения (18.5) в виде:

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} &= E_1 u \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 v}{dy^2} &= E_2 v \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 w}{dz^2} &= E_3 w. \end{aligned} \right\} (18.7)$$

Выявляется полная аналогия этих уравнений с уравнением (17.5). Аналогия имеет место и в граничных условиях. Представим, например, детально первое граничное условие (18.2) на основании формулы (18.3):

$$u(0) \cdot v(y) \cdot w(z) = 0. \quad (18.8)$$

Учитывая ранее сказанное, оно должно выполняться в произвольной точке грани $x = 0$. Значит $u(0) = 0$.

Продолжая анализ этим же методом, получим:

$$\left. \begin{aligned} u(0) = 0, \quad v(0) = 0, \quad w(0) = 0 \\ u(a) = 0, \quad v(b) = 0, \quad w(c) = 0. \end{aligned} \right\} (18.9)$$

Здесь просматривается полная аналогия с граничными условиями предыдущего параграфа (17.4). Следовательно, мы можем использовать формулы предыдущего параграфа (17.16), (17.18) и (17.22). Учитывая это, найдем из формул (18.3) и (18.6) решения для задачи с трехмерной потенциальной ямой:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left[\left(\frac{n_1}{a} \right)^2 + \left(\frac{n_2}{b} \right)^2 + \left(\frac{n_3}{c} \right)^2 \right] \quad (18.10)$$

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \cdot \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \cdot \sin \frac{n_3 \pi z}{c}, \quad (I8.II)$$

где квантовые числа n_1 , n_2 и n_3 определены следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} n_1 &= 1, 2, 3, \dots \\ n_2 &= 1, 2, 3, \dots \\ n_3 &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \right\} \quad (I8.I2)$$

Квантовые числа n_1 , n_2 и n_3 изменяются независимо друг от друга.

Волновые функции (I8.II) удовлетворяют условию нормировки:

$$\int_0^a \int_0^b \int_0^c (\Psi_{n_1, n_2, n_3})^2 dx dy dz = 1. \quad (I8.I3)$$

Интерес представляет анализ случая $a = b = c$. В этом случае частица находится в кубе. Обозначим длину ребра куба через ℓ . Из формул (I8.I0) и (I8.II) получим:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m\ell^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (I8.I4)$$

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{\ell^3}} \sin \frac{n_1 \pi x}{\ell} \sin \frac{n_2 \pi y}{\ell} \sin \frac{n_3 \pi z}{\ell}. \quad (I8.I5)$$

Основное состояние (см. § 8) возникает по формуле (I8.I2) тогда, когда n_1 , n_2 и n_3 приобретают минимально возможные значения $n_1 = n_2 = n_3 = 1$. Тогда энергия частицы по формуле (8.I4) будет:

$$E_{111} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2} \quad (18.16)$$

При выборе других троек квантовых чисел (n_1, n_2, n_3) мы получим возбужденные состояния. Для получения первого возбужденного уровня два квантовых числа остаются равными 1, а третье приравнивается к 2. Для этого имеется 3 возможности, которые характеризует таблица 3.

Таблица 3

n_1	n_2	n_3	$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$
2	1	1	6
1	2	1	6
1	1	2	6

При этом интересно отметить, что разным тройкам квантовых чисел по формуле (18.15) соответствуют разные волновые функции ψ_{211} , ψ_{121} и ψ_{112} , но энергия в этих состояниях по формуле (18.14) будет одинаковой:

$$E_{211} = E_{121} = E_{112} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2} \quad (18.17)$$

Такое положение возникает и при решении многих других задач квантовой **МЕХАНИКИ** (например, в водородоподобном атоме). Стали применять следующую терминологию. Разные состояния, которым соответствует одинаковая энергия, называются вырожденными состояниями. Число таких состояний с одинаковой энергией называется кратностью вырождения уровня энергии.

В рассмотренном нами выше примере основной уровень невырожденный, но первый уровень энергии – трехкратно вырожден, так как одному значению энергии соответствуют три разных функции состояния.

§ 19. Туннельный эффект в случае прямоугольного барьера

Рассмотрим одномерное движение частицы в поле, в котором потенциальная энергия выражается в виде (см. рис. 14):

$$U(x) = \left. \begin{array}{lll} 0, & \text{если } x \leq 0 & \text{I область} \\ U_0, & \text{если } 0 \leq x \leq \ell & \text{II область} \\ 0, & \text{если } x \geq \ell & \text{III область} \end{array} \right\} \quad (19.1)$$

Постановка проблемы пусть будет следующей. Допустим, что в I области частица движется в положительном направлении оси x . Зададим вопрос, возможно ли найти частицу в III области, если ее полная энергия удовлетворяет условию:

$$0 < E < U_0. \quad (19.2)$$

Условие (19.2) показывает, что при такой постановке проблемы II область служит потенциальным барьером. Исходя из рис. 14, такой барьер называется прямоугольным барьером. Величины U_0 и ℓ называются соответственно высотой и шириной барьера.

Проанализируем сначала вопрос на основе классической механики. Полная энергия частицы E — величина сохраняющаяся. В I области полная энергия чисто кинетическая. Во II области закон сохранения энергии выражается следующим образом:

$$\frac{P_x^2}{2m} + U_0 = E, \quad (19.3)$$

где P_x — импульс частицы. При условии (19.2) P_x является мнимым. Из этого следует, что частица не может попасть во II область. Следовательно, частицу невозможно обнаружить и в III области. Классическая механика на вышепоставленный вопрос дает отрицательный ответ. Можно сказать, что потенциал-

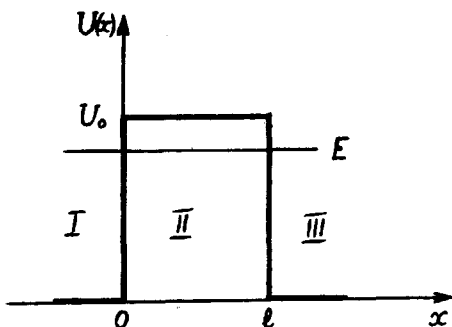


Рис. 14.

ный барьер препятствует перемещению частицы из I области во II область. Иными словами, с позиции классической механики потенциальный барьер непреодолим.

Чтобы найти ответ на вопрос с точки зрения квантовой механики, придется исходить из уравнения Шредингера. Если потенциальная энергия удовлетворяет условию (19.1), то гамильтониан не зависит от времени. Можно использовать результаты § 8. Волновая функция $\Psi(x, t)$ выражается в соответствии с формулой (8.12) следующим образом:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (19.4)$$

где энергию частицы E и функцию $\psi(x)$ находим на основании уравнения Шредингера для стационарных состояний (8.13):

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi. \quad (19.5)$$

С учетом формул (7.11) и (19.1) гамильтониан выражается следующим образом:

$$\hat{H} = \left. \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad \text{I область} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_0 \quad \text{II область} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad \text{III область,} \end{array} \right\} \quad (I9.6)$$

Поскольку гамильтониан по областям выражается различно, то целесообразно и уравнение (I9.5) выписать по областям:

$$\left. \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_I}{dx^2} = E \psi_I \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_0\right) \psi_{II} = E \psi_{II} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{III}}{dx^2} = E \psi_{III} \end{array} \right\} \quad (I9.7)$$

где индексы при ψ указывают конкретную область. В уравнениях (I9.7) E везде одинакова, так как будучи собственным значением гамильтониана, она является постоянным числом.

Уравнения (I9.7) — линейные дифференциальные уравнения с постоянными коэффициентами. Введя обозначения:

$$\left. \begin{array}{l} k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} \end{array} \right\} \quad (I9.8)$$

перепишем эти уравнения:

$$\left. \begin{array}{l} \frac{d^2 \psi_I}{dx^2} + k_1^2 \psi_I = 0 \\ \frac{d^2 \psi_{II}}{dx^2} + k_2^2 \psi_{II} = 0 \\ \frac{d^2 \psi_{III}}{dx^2} + k_1^2 \psi_{III} = 0. \end{array} \right\} \quad (I9.9)$$

Общими решениями уравнений (I9.9) являются:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_I(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \\ \Psi_{II}(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \\ \Psi_{III}(x) &= A_3 e^{ik_3 x} + B_3 e^{-ik_3 x} \end{aligned} \right\} \quad (\text{I9.10})$$

где $A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3$ - константы.

Выпишем сначала полную волновую функцию I области, исходя из формулы (I9.4)

$$\Psi_I(x, t) = A_1 e^{i(k_1 x - \frac{Et}{\hbar})} + B_1 e^{-i(k_1 x + \frac{Et}{\hbar})} \quad (\text{I9.11})$$

Проанализируем стоящие в первой части формулы члены. Фаза первой волны является аргументом первой экспоненциальной функции без мнимой единицы. Приравняв его к константе, получим уравнение поверхности постоянной фазы первой волны:

$$k_1 x - \frac{Et}{\hbar} = \text{const.} \quad (\text{I9.12})$$

Если взять производную по времени, то \dot{x} - фазовая скорость первой волны. Из формулы (I9.12) получим:

$$\dot{x} = \frac{E}{\hbar k_1} \quad (\text{I9.13})$$

Так как $E > 0$ и $k_1 > 0$ то $\dot{x} > 0$. Следовательно, первая волна распространяется в положительном направлении оси x . Такую волну в данной проблеме называют падающей волной. Тем же методом получим выражение для фазовой скорости второй волны:

$$\dot{x} = -\frac{E}{\hbar k_1} . \quad (19.14)$$

Отсюда $\dot{x} < 0$. Значит, вторая волна распространяется вдоль оси x в отрицательном направлении. Такую волну называют отраженной волной.

Полная волновая функция в III области выражается через формулы (19.4) и (19.10) следующим образом:

$$\Psi_{III} = A_2 e^{i(k_1 x - \frac{Et}{\hbar})} + B_3 e^{-i(k_1 x + \frac{Et}{\hbar})} . \quad (19.15)$$

Пользуясь вышеприведенным приемом, обнаружим, что первая волна распространяется в положительном направлении оси x . В данной проблеме эту волну называют прошедшей волной. Вторая волна распространяется вдоль оси x в отрицательном направлении. В III области нет физических причин для отражения волны. Поэтому в действительности такой волны в III области быть не может, и следовательно, $B_3 = 0$.

Используем условие I) из § 7, которому должно удовлетворять решение уравнения Шредингера. Применяя его по краям областей, получим:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_I(0) &= \Psi_{II}(0) \\ \Psi_I'(0) &= \Psi_{II}'(0) \\ \Psi_{II}(l) &= \Psi_{III}(l) \\ \Psi_{II}'(l) &= \Psi_{III}'(l) . \end{aligned} \right\} \quad (19.16)$$

Применяя формулы (19.10), где $B_3 = 0$, можно условия (19.16) записать в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned}
 1 + b_1 &= a_2 + b_2 \\
 a_2 e^{-x\ell} + b_2 e^{+x\ell} &= a_3 e^{ik_1 \ell} \\
 i(1 - b_1) &= n(-a_2 + b_2) \\
 n(-a_2 e^{-x\ell} + b_2 e^{+x\ell}) &= i a_3 e^{ik_1 \ell}
 \end{aligned} \right\} \quad (I9.I7)$$

Здесь приняты следующие обозначения:

$$b_1 = \frac{B_1}{A_1}, \quad a_2 = \frac{B_2}{A_1}, \quad b_2 = \frac{B_2}{A_1}, \quad a_3 = \frac{A_3}{A_1} \quad (I9.I8)$$

$$x = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \quad (I9.I9)$$

$$n = \frac{x}{k_1} \quad (I9.20)$$

Вспомним, что постоянная A_1 — величина, описывающая падающую волну. $|A_1|^2$ — плотность вероятности в падающей волне на основании формулы (4.3). Так как в начале параграфа сделано предположение, что частица падает на барьер, то $A_1 \neq 0$. Поэтому в формулах (I9.I8) деление на A_1 вполне оправдано.

В системе (I9.I7) имеется четыре уравнения для определения неизвестных b_1 , a_2 , b_2 и a_3 . Припомним, что из постановки вопроса в начале параграфа нас интересует возможность попадания частицы в III область. Чтобы найти ответ на этот вопрос по формуле (4.5) и (I9.I5) (в последней $B_3 = 0$) надо знать только константу A_3 , так как $|A_3|^2$ — плотность вероятности нахождения частицы в III области. В связи с тем, что по формуле (I9.I8) $A_3 = a_3 A_1$, из системы (I9.I7) нужно найти лишь a_3 . Пользуясь правилом Крамера (вычисление определителей) это довольно легко сделать. Результат будет следующим:

$$a_3 = \frac{4ni e^{-ik_1 l}}{(n+i)^2 e^{-\alpha l} - (n-i)^2 e^{\alpha l}} \quad (I9.21)$$

Отделив в знаменателе действительную и мнимую части, получим:

$$a_3 = \frac{2ni e^{-ik_1 l}}{(1-n^2) \operatorname{sh} \alpha l + 2in \operatorname{ch} \alpha l} \quad (I9.22)$$

Найдем квадрат модуля a_3 :

$$|a_3|^2 = \frac{4n^2}{(n^2-1)^2 \operatorname{sh}^2 \alpha l + 4n^2 \operatorname{ch}^2 \alpha l} \quad (I9.23)$$

Из формул (I9.8), (I9.I9) и (I9.20) следует, что

$$n = \sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} \quad (I9.24)$$

Отсюда видно, что в случае существования барьера $n \neq 0$. Таким образом, из формулы (I9.23) $|a_3|^2 \neq 0$. Плотность вероятности нахождения частицы в III области $|A_3|^2 = |a_3|^2 \cdot |A_1|^2$. Так как A_1 и a_3 не равны нулю, то значит и $|A_3|^2 \neq 0$. Частица может проникнуть в III область. На вопрос, поставленный в начале данного параграфа, квантовая механика дает положительный ответ. Частица может пройти через потенциальный барьер. Это прохождение частицы через потенциальный барьер принято называть туннельным эффектом.

Сравнивая выражения волновой функции в I и III области (см. формулы (I9.II) и (I9.I5), где у энергии E одинаковое значение), придем к важному выводу: частица выходит из потенциального барьера с той же энергией, что и при падении на барьер. Может возникнуть опасение, что в случае туннельного

эффекта у частицы в произвольной точке барьера кинетическая энергия равняется отрицательной величине $E - U_0 = \text{const}$. Вспомним из § 13 соотношение неопределенностей Гейзенберга, по которому в состоянии, когда у частицы координаты имеют определенные значения, ее импульс неопределен. В соответствии с этим и кинетическая энергия неопределена. Поэтому вышеупомянутое опасение не имеет оснований. Для наглядности можно воспользоваться следующей интерпретацией. Если координата частицы фиксирована, то неопределенность импульса частицы бесконечно велика на основании соотношения неопределенностей (13.4). Следовательно, частица обладает кинетической энергией, достаточной для преодоления барьера с конечной высотой.

Для количественного описания туннельного эффекта используют коэффициент прозрачности (или коэффициент прохождения) барьера, который определен как вероятность прохождения барьера. Исходя из этого определения, можем коэффициент прозрачности D вычислить, как отношение плотностей вероятностей в прошедшей и падающей волнах:

$$D = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} \quad (19.25)$$

Опираясь на выражения (19.18) и (19.23), получим формулу для вычисления коэффициента прозрачности:

$$D = \frac{4k^2}{(k^2 - 1)^2 \text{sh}^2 \alpha l + 4k^2 \text{ch}^2 \alpha l} \quad (19.26)$$

Здесь связь между параметрами, описывающими барьер, выявляется на основании формул (19.19) и (19.24).

Используя численное значение постоянной Планка, можно, исходя из выражения (19.19), получить следующую расчетную формулу:

$$\alpha \left(\frac{1}{A} \right) = 0,51 \sqrt{\frac{m}{m_e} [U_0(\text{эВ}) - E(\text{эВ})]}, \quad (19.27)$$

где α выражается в обратных ангстремах, а U_0 и E в электронвольтах, m_e - масса электрона.

С практической точки зрения в значимых случаях ($m = m_e$, l - порядка размеров атомов, $U_0 - E$ порядка нескольких электронвольт), параметр αl в формуле (19.26) достаточно велик. В таком случае $sh \alpha l$ и $ch \alpha l$ уже мало отличаются друг от друга. Оценивая их, можно принять $sh \alpha l \approx ch \alpha l \approx \frac{1}{2} e^{\alpha l}$. Таким образом, в формуле (19.26) основную зависимость дает экспоненциальная функция, так что порядок величины $D \approx e^{-2\alpha l}$. Учтем определение α , данное в формуле (19.19). Получим формулу для приближенного вычисления коэффициента прозрачности прямоугольного потенциального барьера:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} l} \quad (19.28)$$

Формула (19.28) показывает, что коэффициент прозрачности барьера быстро убывает, если увеличивается масса частицы, высота потенциального барьера U_0 и ширина потенциального барьера l .

В случае параметров макроскопических частиц формула (19.28) дает значения D , которые практически равны нулю. Вспомним из § 13, что для макромира величина \hbar очень мала. Взяв в формуле (19.28) ее предельное значение $\hbar \rightarrow 0$, получим $D \rightarrow 0$, означающее, что в случае макроскопических частиц туннельный эффект отсутствует.

Для микрочастиц в некоторых случаях встречается барьер в виде **представленного** на рисунке 15 (см. пример из следующего параграфа). Он получается, как предельный случай барьера, представленного на рисунке 14, когда $l \rightarrow \infty$. Тогда из формулы (19.28) $D = 0$. Это означает, что бесконечно широкий потенциальный барьер не может преодолеть и микрочастица.

В заключении представим в виде иллюстрации оцененные на основании формулы (19.28) значения коэффициента прозрачности в зависимости от ширины барьера, если $m = m_e$ и $U_0 - E = 5 \text{ эВ}$. Результаты вычислений даны в таблице:

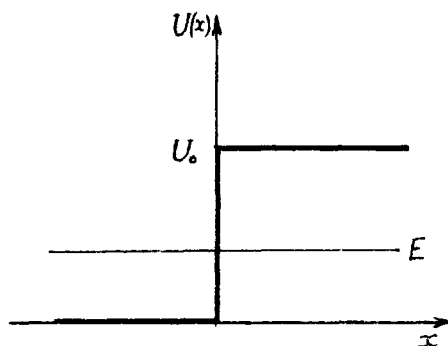


Рис. 15.

Таблица

$e(\text{Å})$	1	1,3	1,5	1,8	2,0	5,0	10,0
D	0,10	0,05	0,03	0,016	0,010	$1,1 \cdot 10^{-5}$	$1,2 \cdot 10^{-10}$

Отсюда видим, что если ширина барьера 1 Å , то величина коэффициента прозрачности достаточно велика, но уже при 10 Å коэффициент прозрачности становится ничтожно малым.

§ 20. Оценка туннельного эффекта в общем случае

В предыдущем параграфе мы рассматривали прохождение частицы через прямоугольный барьер. На практике такого вида барьеры встречаются редко. Учитывая это, попробуем для барьера произвольной формы, который представлен на рисунке 16, обобщить полученные в предыдущем параграфе результаты.

Аппроксимируем этот барьер с помощью n прямоугольных барьеров. Координаты граничных конечных точек n -ого барьера обозначим через x_{n-1} и x_n , при этом $x_0 = a$ и $x_n = b$. Та-

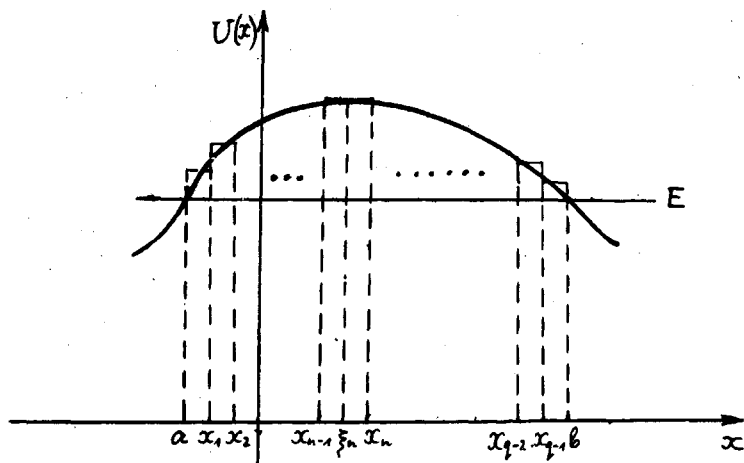


Рис. 16.

ким образом, ширина n -ого барьера будет $\Delta x_n = x_n - x_{n-1}$. На отрезке $[x_{n-1}, x_n]$ выберем произвольную абсциссу ξ_n . Значение функции $V(\xi_n)$ выберем высотой данного n -ого барьера. На основании формулы (19.28) сможем выписать приближенную формулу для коэффициента n -ого барьера:

$$D_n \approx e^{-\frac{\hbar}{2} \sqrt{2m[V(\xi_n) - E]} \cdot \Delta x_n}, \quad (20.1)$$

Пусть число частиц, падающих на прямоугольный барьер, состоящий из q прямоугольных барьеров, будет n_0 . Тогда первый барьер проходит $D_1 n_0$ частиц, второй $D_2 (D_1 n_0)$ частиц и т.д. q -тый барьер проходит $D_q D_{q-1} \dots D_2 D_1 n_0$ частиц. Таким образом, коэффициент прозрачности этого сложного барьера:

$$D^{(q)} = D_1 D_2 \dots D_{q-1} D_q. \quad (20.2)$$

При учете формулы (20.1) получим приближенный результат:

$$D^{(f)} \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \sum_{n=1}^f \sqrt{2m[V(\xi_n) - E]} \cdot \Delta x_n} \quad (20.3)$$

Коэффициент прозрачности D для барьера заданной формы (плавная кривая на рис. 16) получим в том случае, когда f будет приближаться к бесконечности, а ширина каждого прямоугольного барьера приблизиться к нулю:

$$D = \lim_{\substack{f \rightarrow \infty \\ \Delta x_n \rightarrow 0}} D^{(f)} \quad (20.4)$$

Подставляя приближенное выражение $D^{(f)}$ из (20.3) в формулу (20.4) и учитывая непрерывность экспоненциальной функции, получим:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \lim_{\substack{f \rightarrow \infty \\ \Delta x_n \rightarrow 0}} \sum_{n=1}^f \sqrt{2m[V(\xi_n) - E]} \Delta x_n} \quad (20.5)$$

Предел, имеющейся в формуле суммы, представляет собой определенный интеграл. Таким образом получим приближенную формулу для вычисления коэффициента прозрачности потенциального барьера произвольной формы:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m[V(x) - E]} dx} \quad (20.6)$$

где пределы a и b определяются из условий:

$$\left. \begin{aligned} V(a) &= E \\ V(b) &= E. \end{aligned} \right\} \quad (20.7)$$

Если возникает потребность в точном вычислении коэффициента прозрачности, то придется исходить из уравнения Шредингера для потенциальной энергии в случае, изображенном на рисунке 16. Зная решения уравнения Шредингера, можно сравнить

вероятности нахождения частицы до барьера и после него. Таким образом можно вычислить и коэффициент прозрачности.

В качестве примера применения формулы (20.7) рассмотрим холодную эмиссию электронов из металла. Под этим явлением понимают выход электронов из холодного металла под действием электрического поля.

Для анализа используем рисунок Г7, где область $x < 0$ соответствует металлу, область $x > 0$ - вакууму. Сначала рассмотрим случай, когда электрическое поле отсутствует. Так как электроны при низкой температуре сами из металла выйти не могут, то зависимость потенциальной энергии от координаты x должна изображать жирная ломаная линия на рис. Г7. Разность $U_0 - E$ представляет собой работу выхода. Можно сказать, что при отсутствии электрического поля выходу электронов препятствует бесконечно широкий потенциальный барьер. Поло-

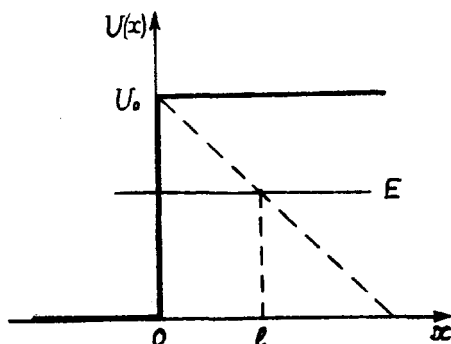


Рис. Г7.

жение существенно изменится, если приложить в отрицательном направлении вдоль оси x однородное электрическое поле, абсолютную величину напряженности которого обозначим через \mathcal{E} . Тогда потенциальная энергия вне металла выражается:

$$U(x) = U_0 - e \mathcal{E} x, \quad (20.8)$$

где заряд электрона обозначим, как и в § 7, в виде $-e$ ($e > 0$).

Функцию (20.8) изображает пунктирная линия на рисунке 17. Теперь видим, что ширина потенциального барьера стала конечной, в силу чего электроны смогут путем туннельного эффекта выйти из металла. Так и возникает холодная эмиссия.

Ширину потенциального барьера l сможем вычислить из условия $U(l) = E$ (см. рис. 17). С учетом формулы (20.8) получим:

$$l = \frac{U_0 - E}{eE}. \quad (20.9)$$

Используя выражение потенциальной энергии из формулы (20.8) в общей формуле (20.6), сможем найти коэффициент прозрачности барьера для случая холодной эмиссии:

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^l \sqrt{2me^2(U_0 - eEx - E)} dx\right). \quad (20.10)$$

Здесь имеется простой интеграл степенной функции. После его вычисления получим:

$$D \approx \exp\left(-\frac{E_*}{E}\right), \quad (20.11)$$

где

$$E_* = \frac{4\sqrt{2}me^2(U_0 - E)^{3/2}}{3\hbar e} \quad (20.12)$$

— постоянная с размерностью напряженности электрического поля, которая описывает металл.

Из формулы (20.11) видим, что в случае $E \ll E_*$ коэффициент прозрачности барьера очень мал. Следовательно, возникновения холодной эмиссии электронов можно ожидать лишь при условии, когда напряженность внешнего электрического поля равна E_* или больше.

Если в формуле (20.12) взять типичный порядок величины $U_0 - E \approx 1$ эВ, то получим $\epsilon_* \approx 10^9 \frac{R}{\lambda}$. Таким образом, напряженность электрического поля для возникновения холодной эмиссии должна быть $\sim 10^9 \frac{R}{\lambda}$.

Туннельный эффект имеет и много других применений. В курсе ядерной физики убедимся, что с помощью туннельного эффекта можно объяснить явление радиоактивного α -распада.

§ 21. Схема решения уравнения Шредингера в центральносимметричном поле

Центральносимметричным полем называют потенциальное поле, если найдется точка, называемая центром поля, обладающая таким свойством, что потенциальная энергия частицы в произвольной точке зависит лишь от расстояния между этой точкой и центром поля.

Для описания движения частицы в центральносимметричном поле целесообразно использовать сферические координаты (r, θ, φ) , поместив их начало в центр поля. Из центральной симметрии поля следует, что потенциальная энергия частицы U зависит только от аргумента r , который представляет собой расстояние от частицы до центра. Так можно записать $U = U(r)$. В соответствии с этим получим из формулы (7.11) гамильтониан частицы в центральносимметричном поле:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r). \quad (21.1)$$

Важным примером центральносимметричного поля можно рассматривать электрическое поле, создаваемое ядром водородоподобного атома, в котором движется электрон. Потенциальная энергия $U(r)$ выражается в этом случае по формуле (7.16). Эту формулу с определенным приближением можно обобщить и для случая многоэлектронного атома. Если имеется элемент с порядковым номером Z , то его заряд равен Ze и вокруг ядра движутся Z электронов. Рассмотрим конкретный электрон, который находится от ядра на расстоянии r . Одновременно наметим вокруг ядра, как центра, шар радиусом r . Упомянутый

выше электрон можно рассматривать движущимся в поле, которое создается ядром и остальными $Z-1$ электронами. Считая это поле центральносимметричным, можно на основании теоремы Остроградского-Гаусса утверждать, что на данный электрон действуют лишь те заряды, которые находятся внутри описанной сферы. В этой сфере находится ядро и некоторая доля остальных $Z-1$ электронов. Эти электроны ослабляют действие заряда ядра на рассматриваемый электрон. В таком случае принято говорить, что происходит экранирование заряда ядра. Учитывая экранирование и взяв формулу (7.16) в качестве образца, можно потенциальную энергию конкретного электрона выразить в следующем виде:

$$U(r) = -\frac{[z - \delta(r)]e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (21.2)$$

где функция $\delta(r)$ носит название функции экранирования. Если $r=0$, то $\delta=0$; в остальных случаях $\delta(r)$ монотонно возрастающая функция, имеющая положительное значение. При $r \rightarrow \infty$ δ приобретает значение $Z-1$. Добавим, что предположение о центральносимметричном поле находит применение и в решении многих проблем ядерной физики.

С учетом вышесказанного представляет интерес исследование общих свойств движения частицы в центральносимметричном поле. Сначала обратим внимание на то, что гамильтониан (21.1) не зависит от времени. В связи с этим на основании результатов § 8 возникают стационарные состояния, для которых волновая функция выражается с помощью формулы (8.12) следующим образом:

$$\Psi(r, \theta, \varphi, t) = \psi(r, \theta, \varphi) \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (21.3)$$

Здесь энергию E и функцию $\psi(r, \theta, \varphi)$ следует найти из уравнения Шредингера для стационарных состояний (8.13):

$$\hat{H} \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi). \quad (21.4)$$

Таким образом, проблема сводится к решению уравнения (2I.4), где гамильтониан \hat{H} взят из формулы (2I.I). Подставив в формулу (2I.I) оператор Лапласа в сферических координатах, получим:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\hbar^2}{2m r^2} \Delta_{\theta, \varphi} + U(r), \quad (2I.5)$$

где $\Delta_{\theta, \varphi}$ - часть оператора Лапласа, зависящая от углов (см. (I6.4)).

Используя формулу (I6.2), гамильтониан можно представить в следующем виде:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{2m r^2} \hat{L}^2 + U(r), \quad (2I.6)$$

где \hat{L}^2 - оператор квадрата орбитального момента импульса.

Вычислим коммутатор $[\hat{H}, \hat{L}^2]$. Используем правило (9.29), на основании которого можно сначала найти коммутатор каждого члена гамильтониана с оператором \hat{L}^2 и затем результаты сложить. Если учесть формулу (I6.2) для оператора \hat{L}^2 , то становится очевидным, что первый член гамильтониана коммутирует с оператором \hat{L}^2 , так как r, θ, φ - независимые переменные. Второй член гамильтониана коммутирует с оператором \hat{L}^2 , потому что каждый оператор коммутирует сам с собой (§ 9). Так как $U(r)$ зависит только от r , \hat{L}^2 только от θ и φ , то ясно, что третий член гамильтониана тоже коммутирует с оператором \hat{L}^2 . Если подвести итог по правилу (9.29), то получим:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0. \quad (2I.7)$$

Для вычисления коммутатора $[\hat{H}, \hat{L}_z]$ можно воспользоваться вышеупомянутым приемом, если опираться на формулу (I6.3). Результатом будет:

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0. \quad (2I.8)$$

Формулы (2I.7) и (2I.8) с учетом результатов § II показывают, что в центральносимметричном поле у частицы одновременно с определенным значением энергии существуют определенные значения квадрата ее орбитального момента и одной проекции.

На основании формулы (2I.4) ψ является собственной функцией оператора \hat{H} . Из формул (2I.7) и (2I.8) видно, что оператор \hat{H} коммутирует с операторами \hat{L}^2 и \hat{L}_z . Из § I4 известно, что коммутируют операторы \hat{L}^2 и \hat{L}_z . Отсюда следует, на основании § II, что у операторов \hat{H} , \hat{L}^2 и \hat{L}_z общие собственные функции. Используя это обстоятельство и вспомогательные формулы (I6.II), целесообразно искать решение уравнения (2I.4) в таком виде:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi), \quad (2I.9)$$

где функцию $R(r)$ называют радиальной волновой функцией. Таким образом можно привести следующее словесное определение. В выражении полной волновой функции, описывающей движение частицы в центральносимметричном поле, тот множитель, который зависит только от расстояния между частицей и центром поля, называется радиальной волновой функцией.

Подставив ψ из формулы (2I.9) в уравнение (2I.4), получим на основании выражений (I6.II) и (2I.6) следующее дифференциальное уравнение для определения радиальной волновой функции:

$$-\frac{\hbar^2}{2m r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2 R}{2m r^2} + U(r)R = ER. \quad (2I.10)$$

Теперь можно сформулировать схему нахождения стационарных состояний в центральносимметричном поле следующим образом. Полная волновая функция выражается формулой (2I.3), ее координатный множитель выражается формулой (2I.9), где энергия и радиальная волновая функция следует находить из дифференциального уравнения (2I.10). Таким образом, вся проблема

сводится к решению уравнения (2I.10).

Если имеем дело с разными центральносимметричными полями, то уравнение (2I.10) имеет различный вид, так как $V(r)$ различны. Таким образом, имеем разные радиальные волновые функции и спектр энергий. Но во всех этих полях зависимость волновых функций от θ и φ одинакова. Это определено сферическими функциями $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ (см. формулу (2I.9)).

В уравнении (2I.10) встречается орбитальное квантовое число ℓ , но отсутствует орбитальное магнитное квантовое число m_ℓ . Значит, энергия E не зависит от квантового числа m_ℓ . Если учесть формулы (2I.9) и (I6.10), то приходим к выводу, что энергии с фиксированным квантовым числом ℓ соответствует $(2\ell + 1)$ различных волновых функций. Таким образом в центральносимметричном поле уровни энергии $(2\ell + 1)$ -кратно вырождены (см. определение § I8).

На примере центральносимметричного поля уместно познакомиться и с оператором инверсии в трехмерном случае. Обозначим его через \hat{P} . По определению:

$$\hat{P}f(\vec{r}) = f(-\vec{r}), \quad (2I.11)$$

где f - произвольная функция радиуса-вектора \vec{r} .

Если применить оператор \hat{P} к волновой функции ψ в выражении (2I.9), то, используя свойства сферических функций, можно доказать равенство:

$$\hat{P}\psi(\vec{r}) = (-1)^\ell \psi(\vec{r}). \quad (2I.12)$$

Стало традицией говорить, что в центральносимметричном поле четность волновой функции равна $(-1)^\ell$. Если ℓ - четное число, то ψ является четной функцией; если ℓ - нечетное число, то ψ - нечетная функция.

В случае центральносимметричного поля конкретные значения орбитальных квантовых чисел обозначаются строчными латинскими буквами по следующей схеме:

l	0	I	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
	s	p	d	f	g	h	i	k	l	m	n	o	q	r	t

Например, **состояние**, для которого $l = 2$, называют **d** - состоянием.

Рассмотрим нормировку волновой функции в центральносимметричном поле. Будем исходить из формул (4.5), (4.8), (8.17) и (21.9). Учтем, что элемент объема в сферических координатах:

$$dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \quad (21.13)$$

(см. рис. 18). Таким образом получим:

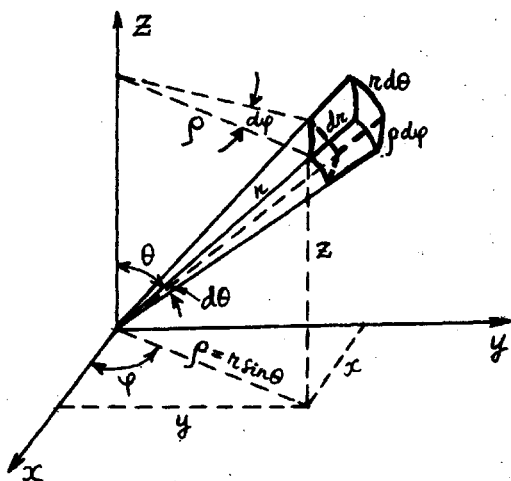


Рис. 18.

$$\int_{r=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = 1. \quad (21.14)$$

Пределы интегралов в формуле (2I.14) выбраны так, чтобы гарантировать требуемое в общей формуле (4.8) интегрирование по всему пространству.

Поскольку в интеграле (2I.14) встречается произведение двух сомножителей, из которых один зависит только от r , другой — только от θ и φ , то интеграл можно представить в виде произведения:

$$\left(\int_{r=0}^{\infty} r^2 |R(r)|^2 dr \right) \cdot \left(\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi \right) = 1. \quad (2I.15)$$

Второй интеграл в формуле (2I.15) по условию нормировки сферической функции равен единице. Так получим формулу:

$$\int_{r=0}^{\infty} r^2 |R(r)|^2 dr = 1, \quad (2I.16)$$

которая выражает условие нормировки радиальной волновой функции.

Отметим, что в некоторых приложениях бывает целесообразным брать вместо радиальной волновой функции $R(r)$ новую функцию $\chi(r)$, которая определяется следующим образом:

$$\chi(r) = r \cdot R(r). \quad (2I.17)$$

Выразив отсюда функцию R и вычислив требуемые производные, получим из уравнения (2I.10):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U_{\text{eff}}(r) \right] \chi = E \cdot \chi, \quad (2I.18)$$

где

$$U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m r^2}. \quad (2I.19)$$

Из формул (2I.16) и (2I.17) следует условие нормирования для функции $\chi(r)$:

$$\int_0^{\infty} |\chi(r)|^2 dr = 1. \quad (2I.20)$$

Дадим интерпретацию результатов (2I.18)-(2I.20). Учитывая формулы (7.II) и (8.I3) видим, что уравнение (2I.18) имеет вид уравнения Шредингера для одномерного случая, когда в роли потенциальной энергии выступает функция $V_{\text{eff}}(r)$. Формула (2I.20) является условием нормировки волновой функции для соответствующей задачи в одномерном случае. Исходя из этих результатов величину $V_{\text{eff}}(r)$, определенную выражением (2I.19), называют эффективной потенциальной энергией. В последнем выражении неотрицательный член $\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m r^2}$ называется центробежной энергией. В s - состояниях центробежная энергия равна нулю и эффективная потенциальная энергия равна обычной потенциальной энергии. В остальных состояниях центробежная энергия положительна. Добавление положительного слагаемого к потенциальной энергии эффективно означает добавление сил отталкивания. Отсюда появился и термин "центробежная энергия" (а не "центростремительная").

Вспомнив, что решение задачи центральносимметричного поля состоит в нахождении радиальной волновой функции, сделаем итог преобразования (2I.17). С помощью этого преобразования при использовании эффективной потенциальной энергии становится возможным свести задачу трехмерного движения к решению задачи одномерного движения (2I.18).

§ 22. Плотность вероятности нахождения частицы в центральносимметричном поле

Обратимся к распределению вероятности нахождения частицы в центральносимметричном поле. Плотность вероятности w сможем найти из формулы (8.I7), если в нее подставить выражения для ψ из формулы (2I.9). По § 4 $w dV$ равна вероятности нахождения частицы в элементе объема dV . На рисунке I8 dV представлено объемом тела, напоминающего малень-

кий куб (см. формулу (21.13)). В целях наглядной интерпретации рассмотрим элемент телесного угла $d\Omega$ в направлении, определенном углами θ и φ :

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (22.1)$$

На основании формул (21.13) и (22.1) найдем:

$$dV = r^2 dr d\Omega. \quad (22.2)$$

Выражение

$$\omega dV = r^2 |R(r)|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 dr \cdot d\Omega \quad (22.3)$$

равно вероятности нахождения частицы на расстояниях от центра между ($r, r+dr$) в телесном угле $d\Omega$.

Если проинтегрировать выражение (22.3) по всему телесному углу, получим вероятность того, что частица находится на расстояниях между ($r, r+dr$) от центра поля; иными словами: результат такого интегрирования равен вероятности нахождения частицы в слое, находящемся между поверхностями двух шаров с радиусами r и $r+dr$. Обозначим вышеупомянутую вероятность в виде Ddr , где величину D называют радиальной плотностью вероятности. С помощью описанного метода найдем из формулы (22.3):

$$Ddr = r^2 |R(r)|^2 dr \int |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (22.4)$$

Интеграл по условию нормировки сферической функции равен единице. Значит:

$$D = r^2 |R(r)|^2. \quad (22.5)$$

Если интегрировать выражение (22.3) по Ω в пределах от

О до ∞ , получим вероятность нахождения частицы в телесном угле $d\Omega$. Запишем результат в виде $\rho(\theta, \varphi) d\Omega$, где величину $\rho(\theta, \varphi)$ называют угловой плотностью вероятности. Таким образом, получим:

$$\rho(\theta, \varphi) d\Omega = |Y_{m_l m_s}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \int_0^{\infty} r^2 |R(r)|^2 dr. \quad (22.6)$$

Имеющийся здесь интеграл по условию нормировки (21.16) радиальной волновой функции равен единице. Следовательно:

$$\rho(\theta, \varphi) = |Y_{m_l m_s}(\theta, \varphi)|^2. \quad (22.7)$$

Поскольку сферическая функция $Y_{m_l m_s}(\theta, \varphi)$ зависит от аргумента φ лишь через множитель $e^{im_l \varphi}$ (см. § 16), то $|Y_{m_l m_s}(\theta, \varphi)|^2$ не зависит от аргумента φ . Но параметрическая зависимость от квантового числа m_l сохраняется, поскольку множитель функции $Y_{m_l m_s}(\theta, \varphi)$, зависящий от аргумента θ , содержит в виде параметра квантовое число m_l . Вычисления показывают, что при этом $|Y_{m_l m_s}(\theta, \varphi)|^2$ зависит параметрически только от абсолютного значения квантового числа m_l .

В связи с употреблением формулы (22.7) напомним, что в наших рассуждениях ось z выделяется так, что орбитальный момент импульса дает на эту ось проекцию $m_l \hbar$. Одновременно напомним, что угол θ является углом между радиусом-вектором и осью z (см. формулу (16.1)).

Сравним формулы (22.5) и (22.7). Первая из них показывает, что радиальная плотность вероятности определена радиальной волновой функцией, которая различна в различных центральносимметричных полях (см. текст после формулы (21.10)). Вторая формула показывает, что угловая плотность вероятности равна квадрату модуля сферической функции. Распределение вероятности такого вида во всех центральносимметричных полях является одинаковым.

В качестве иллюстрации на рисунке 19 представим угловую плотность вероятности для s -, p - и d -состояний. На ри-

сунке использован так называемый метод **полярной диаграммы**, на которой полярной осью выбрана ось z , а полярным углом θ . Напомним, что в методе полярных диаграмм длина радиуса-вектора, проведенного из полюса к точке кривой равна значению функции при аргументе θ . Например в p -состоянии, когда $m_l = \pm 1$, угловая плотность вероятности максимальна, если $\theta = \pi/2$.

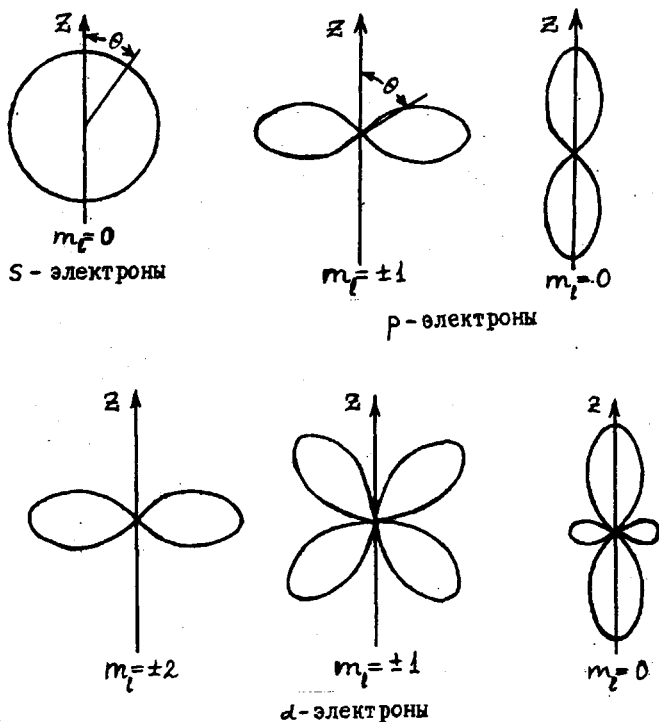


Рис. 19.

В сферических координатах угол θ изменяется в пределах $[0, \pi]$. Поэтому математически корректной на рисунке 19 считается только та кривая, которая находится на одной стороне от оси Z , например, справа. Но в целях большей наглядности рисуют симметричную кривую и по другую сторону от оси Z . Если иметь в виду, что угловая плотность вероятности не зависит от угла φ , то можно представить приведенные на рисунке 19 кривые вращающимися вокруг оси Z . Так мы получим в известном смысле пространственное представление о распределении угловой плотности вероятности.

Как видно из рисунка 19, в S -состоянии угловая плотность вероятности не зависит от угла θ , т.е. угловая плотность вероятности является центральносимметричной. В остальных состояниях наблюдается зависимость угловой плотности вероятности от угла θ . Так уже в ранее рассмотренном случае p -состояния, когда $m_e = \pm 1$, видно, что угловая плотность вероятности отличается от нуля практически лишь в направлениях, перпендикулярных оси Z . По приближенной классической аналогии этому соответствует движение в плоскости, перпендикулярной оси Z ; в таком случае классический момент импульса ориентирован вдоль оси Z . Здесь проявляется соответствие с квантово-механическими проекциями момента импульса $m_e \hbar$, что в данном случае ($m_e = \pm 1$) даст нам $\pm \hbar$. Если в p -состоянии $m_e = 0$, то угловая плотность вероятности практически отлична от нуля лишь в направлениях, которые образуют малый угол с осью Z . По классической аналогии ось Z находится в плоскости орбиты, а проекция момента импульса на ось Z равна нулю. Так выявляется соответствие с квантово-механической проекцией момента импульса $m_e \hbar$, где $m_e = 0$.

Вышеприведенные полярные диаграммы имеют большое практическое значение при исследовании межатомных взаимодействий (например, в проблеме химической связи).

§ 23. Движение электрона в водородоподобном атоме

Определение водородоподобного атома дано ранее в § 7. Потенциальная энергия электрона в электрическом поле атомного ядра выражается формулой (7.16). Как было выяснено в § 21, это поле является центральносимметричным, а центром поля является ядро. Чтобы описать квантово-механическое движение электрона в водородоподобном атоме, следует решить дифференциальное уравнение (21.10) радиальной волновой функции $R(r)$, для которой потенциальная энергия выражается формулой (7.16):

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2 R}{2mr^2} - \frac{Ze^2 R}{4\pi\epsilon_0 r} = ER. \quad (23.1)$$

Нас интересует здесь связанная система, состоящая из электрона и ядра. На основании § 9 движение электрона является финитным, а его спектр энергией дискретным. В рамках курса общей физики не отводится столько времени по программе, чтобы представить ход решения уравнения (23.1). Поэтому представим лишь результаты вычислений.

Исходя из уравнения (23.1) энергия электрона в водородоподобном атоме выражается формулой:

$$E_n = - \frac{Z^2 R \hbar c}{n^2}, \quad (23.2)$$

где константу

$$R = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2 c} \quad (23.3)$$

называют постоянной Ридберга⁴. Здесь m_e — масса электрона, e — элементарный заряд, h — постоянная Планка, c — скорость света в вакууме, ϵ_0 — электрическая постоянная. Подставляя в выражение (23.3) численные значения универсальных постоянных, получим $R = 1,09737312 \cdot 10^{-7}$ м.

В выражении энергии электрона (23.2) n является целым числом, принимающим значения

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (23.4)$$

Целое положительное число, определяющее энергию электрона в водородоподобном атоме, называется главным квантовым числом (обозначается через n).

Из формулы (23.2) видно, что при увеличении квантового числа n увеличивается и энергия. Таким образом, по формуле (23.4) в основном состоянии $n = 1$, в возбужденном $n > 1$ (см. терминологию из § 8). В качестве иллюстрации на рисунке 20 представлены уровни энергии электрона в атоме водорода ($Z = 1$ в формуле (23.2)). Отметим, что на приведенном нами рисунке не учтено движение ядра (масса ядра считается бесконечно большой). Вследствие этого знание энергии электрона определяет энергию всего атома. Поэтому можно также сказать, что на рисунке 20 приведена схема уровней энергии атома водорода.

При решении уравнения (23.1) выясняется, что радиальная волновая функция зависит параметрически от главного квантового числа n и орбитального квантового числа l . Для фиксации этого факта радиальная волновая функция обозначается символом $R_{nl}(r)$. Вычисление показало, что квантовое число l при фиксированном значении главного квантового числа n , может иметь следующие значения:

⁴ В связи с тем обстоятельством, что в университетском курсе атомной физики изучению квантовой механики предшествует изучение главы о простейших закономерностях атомных спектров, будем использовать константу Ридберга в шкале волновых чисел ($[R] = \text{м}^{-1}$). Постоянная Ридберга в шкале частот есть Rc и в шкале энергий есть Rhc . В литературе две последние также часто обозначают через R .

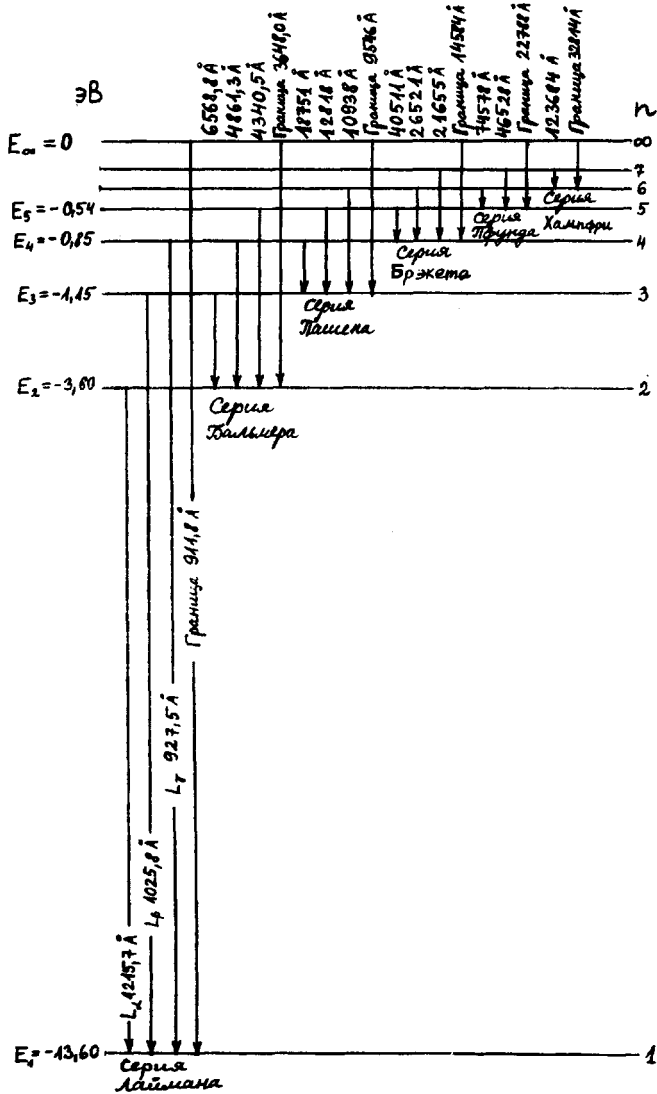


Рис. 20.

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (23.5)$$

На основании § 16 $\sqrt{l(l+1)} \hbar$ является абсолютной величиной орбитального момента импульса электрона. По результатам § 21 $(-1)^l$ есть четность волновой функции электрона.

Вспомним из § 16, что в случае фиксированного орбитального квантового числа l орбитальное магнитное квантовое число m_l приобретает значения, которые показаны в формуле (16.10). Так как у квантовых чисел большая роль в описании состояний электрона, то перепишем эту формулу снова в данном параграфе:

$$m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad (23.6)$$

На основании § 16 $m_l \hbar$ является проекцией орбитального момента импульса электрона.

Полная волновая функция электрона в водородоподобном атоме выражается в соответствии с формулами (21.3), (21.9) и (23.2) в виде:

$$\Psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi, t) = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}, \quad (23.7)$$

где

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm_l}(\theta, \varphi). \quad (23.8)$$

В дальнейшем будем называть функцию ψ_{nlm_l} коротко просто волновой функцией (сравни § 8).

Из формулы (23.2) видно, что энергия электрона в водородоподобном атоме определяется только квантовым числом n . Таким образом, по терминологии § 18, появляется вырождение уровня E_n . Выясним с помощью выражения (23.5) и (23.6), сколько различных волновых функций ψ_{nlm_l} соответствует

уровню E_n . Это число является кратностью вырождения уровня E_n .

В соответствии с формулой (23.6) найдем, что каждому значению квантового числа ℓ соответствует $(2\ell + 1)$ значений квантовых чисел m_ℓ , и следовательно $2\ell + 1$ функций $\Psi_{n\ell m_\ell}$. Учитывая, что квантовое число ℓ приобретает значения, указанные в формуле (23.5), найдем число волновых функций, соответствующих фиксированному значению квантового числа n , т.е. фиксированной энергии E_n , следующим образом:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2. \quad (23.9)$$

Формула (23.9) показывает, что кратность вырождения уровня E_n равна n^2 . Следовательно, основной уровень невырожден, а все остальные энергетические уровни являются вырожденными.

В качестве иллюстрации рассмотрим таблицу 4, в которой познакомим с символикой, принятой для описания состояний электрона в водородоподобном атоме. В ней орбитальное квантовое число дается по символике ℓ , но перед ним пишется главное квантовое число. Например, состояние, для которого $n = 2$ и $\ell = 1$, имеет символ $2p$. Отметим, что такой символ еще не определяет состояние однозначно, так как в нем отражено значение квантового числа m_ℓ .

Таблица 4

Уровень энергии	Кратность вырождения	Волновая функция	Квантовые числа			Символ состояния
			n	ℓ	m_ℓ	
I	2	3	4	5	6	7
E_1	1	Ψ_{100}	1	0	0	1s
E_2	4	Ψ_{200}	2	0	0	2s
		Ψ_{21-1}	2	1	-1	
		Ψ_{210}	2	1	0	2p

Продолжение табл. 4

I	2	3	4	5	6	7
		ψ_{211}	2	I	I	
E_3	9	ψ_{300}	3	0	0	3 s
		ψ_{31-1}	3	I	-I	3 p
		ψ_{310}	3	I	0	
		ψ_{311}	3	I	I	
		ψ_{32-2}	3	2	-2	3 d
		ψ_{32-1}	3	2	-I	
		ψ_{320}	3	2	0	
		ψ_{321}	3	2	I	
		ψ_{322}	3	2	2	

В качестве иллюстрации выпишем нормированные волновые функции электрона, которые соответствуют основному и первому возбужденным уровням:

$$\left. \begin{aligned}
 \psi_{100} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \\
 \psi_{200} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \\
 \psi_{210} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} Z e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cos \theta \\
 \psi_{21\pm 1} &= \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{5/2} Z e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}
 \end{aligned} \right\} (23.10)$$

Константу с размерностью длины

$$\alpha_0 = \frac{E_0 \hbar^2}{\pi m_e e^2} \quad (23.11)$$

называют радиусом Бора. Подставив в выражение (23.11) численное значение универсальных постоянных, получим $\alpha_0 = 0,529177 \cdot 10^{-10} \text{ м}$.

В качестве комментария к формулам (23.10) отметим следующее. Основной уровень невырожденный и ему соответствует одна единственная волновая функция ψ_{100} . Первый возбужденный уровень энергии **четырекратно** вырожден, т.е. существует четыре состояния с разными волновыми функциями $\psi_{200}, \psi_{210}, \psi_{21\pm 1}$. Волновые функции, соответствующие остальным уровням, имеют более сложный вид (их можно посмотреть в учебнике /2/ в § 59).

В качестве следующей иллюстрации рассмотрим рисунок 2I, где для некоторых состояний изображена радиальная плотность вероятности (см. формулу (22.5)), вычисленная с помощью радиальных волновых функций, найденных из уравнения (23.1). Единицей длины на рисунке выбран радиус Бора a_0 . Приведенные примеры указывают на то, что радиус Бора служит естественной единицей длины для описания внутриатомных явлений.

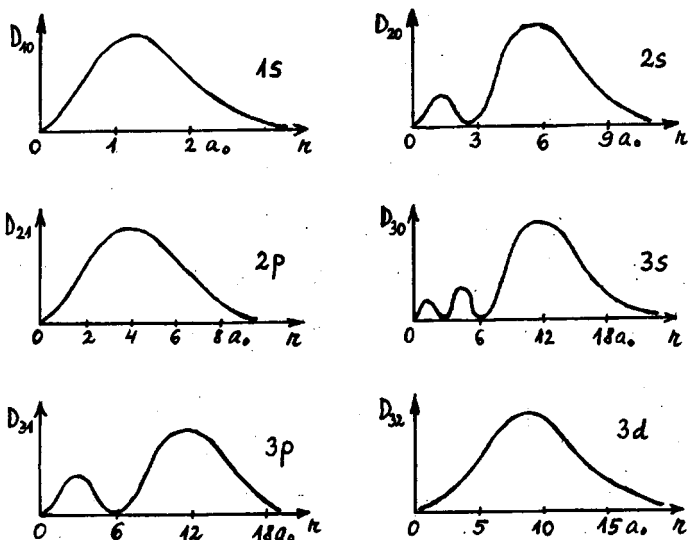


Рис. 2I.

Например, на кривой, изображающей радиальную плотность вероятности для основного состояния $1s$, имеется максимум при $r = a_0$. Это расстояние, на котором радиальная плотность вероятности приобретает максимальное значение, является наиболее вероятным расстоянием электрона от ядра. Таким образом получим следующую интерпретацию: радиус Бора равняется наиболее вероятному расстоянию электрона от ядра в основном состоянии атома водорода. Напомним, что для вычисления радиуса Бора имеет место формула (23.11).

С помощью рисунка 21 получим еще одну интерпретацию для главного квантового числа n . Рисунок показывает, что с увеличением главного квантового числа n электрон с большей вероятностью находится на больших расстояниях от ядра.

На основании вышесказанного легко с помощью формулы (23.2) найти энергию ионизации водородоподобного атома. По определению это — энергия, которую необходимо затратить для удаления электрона, исходя из основного состояния. В основном состоянии главное квантовое число $n = 1$. Ионизации соответствует предельное значение $n \rightarrow \infty$. Следовательно, энергия ионизации выражается следующим образом:

$$E^{(\infty)} = E_{\infty} - E_1. \quad (23.12)$$

Пользуясь формулой (23.2), получим:

$$E^{(\infty)} = z^2 R h c. \quad (23.13)$$

Численное значение константы $R h c$ равно 13,60 эВ. Ее используют в качестве единицы измерения расстояний между уровнями энергии атома; эту единицу измерения называют ридбергом и обозначают символом R_y . Итак, $1 R_y = 13,60$ эВ.

Вспомним, что по формуле (8.17) $|\psi_{nlm}|^2$ является плотностью вероятности нахождения электрона. Вместо нее в целях большей наглядности выберем другую функцию:

$$\rho(r, \theta, \varphi) = e |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2, \quad (23.14)$$

где e — абсолютная величина заряда электрона.

Если проинтегрировать функцию $\rho(r, \theta, \varphi)$ по всему пространству, то получим, учитывая условия нормировки волновой функции (21.14):

$$\int \rho(r, \theta, \varphi) dV = e. \quad (23.15)$$

Выражение (23.15) показывает, что величину $\rho(r, \theta, \varphi)$ можно рассматривать, как пространственную плотность заряда, создаваемую электроном. Наглядное изображение этой плотности заряда называют электронным облаком. Для различных вырожденных состояний уровня E_n будут различными и волновые функции ψ_{nlm} . Следовательно, на основании формулы (23.14), форма электронного облака для разных состояний будет различной. Для нахождения вида электронного облака следует исходить из формулы (23.8). В связи с этим подчеркнем, что в форме электронного облака находит отражение как радиальная волновая функция, так и сферическая функция. Иллюстрации к форме электронного облака рассмотрены на рис. 22, где светлые области соответствуют большим значениям ρ . Более качественные в типографическом отношении фотографии электронного облака можно найти в § 59 учебника /2/.

Перейдем к рассмотрению магнитного момента электрона. Во-первых, вспомним из классической электродинамики, что если частица с зарядом q и массой M имеет момент импульса \vec{L} , то у нее есть и магнитный момент $\vec{\mu}$, который выражается формулой:

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2M} \vec{L}. \quad (23.16)$$

Применяя эту формулу к электрону, следует взять $q = -e$ (e — элементарный заряд) и $M = m_e$. Тогда получим:

$$\vec{\mu} = -\frac{e\vec{L}}{2m_e}. \quad (23.17)$$

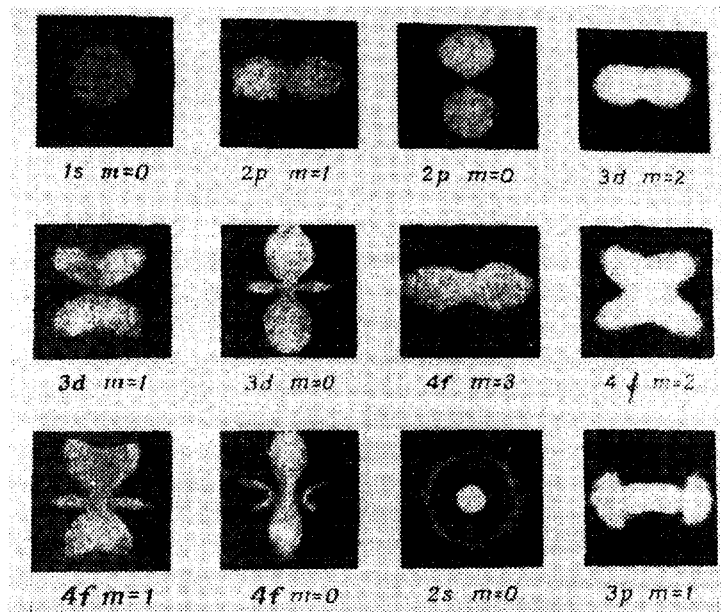


Рис. 22.

При переносе полученного результата в квантовую механику учтем то обстоятельство, что в формуле (23.17) e и m_e являются универсальными константами. На основе вектора классической механики \vec{L} мы образовали орбитальный момент \hat{L} , компоненты которого описываются операторами, выражающимися формулами (II.2). Так из выражения (23.17) получим оператор орбитального момента электрона:

$$\hat{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \hat{L}. \quad (23.18)$$

Возьмем отсюда проекцию на ось z :

$$\hat{\mu}_z = -\frac{e}{2m_e} \hat{L}_z. \quad (23.19)$$

Подействуем оператором $\hat{\mu}_z$ на волновую функцию Ψ_{nlm_l} :

$$\hat{\mu}_z \Psi_{nlm_l} = -\frac{e}{2mc} \hat{L}_z [R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}] \quad (23.20)$$

Вспомним формулу (16.3), на основании которой \hat{L}_z зависит только от Ψ . Тогда:

$$\hat{\mu}_z \Psi_{nlm_l} = -\frac{e}{2mc} R_{nl}(r) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \hat{L}_z Y_{lm_l}(\theta, \varphi), \quad (23.21)$$

что на основе формул (16.11) и (23.7) дает:

$$\hat{\mu}_z \Psi_{nlm_l} = -m_l \mu_B \Psi_{nlm_l}. \quad (23.22)$$

Величину

$$\mu_B = \frac{e \hbar}{2mc} \quad (23.23)$$

называют магнетоном Бора. Подставив в формулу (23.23) численные значения констант, получим $\mu_B = 0,92741 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{Г}}$.

Формула (23.22) показывает, что измеренная величина проекции орбитального момента электрона, на основании результатов § II, есть $-m_l \mu_B$. В связи с этим m_l принято называть орбитальным магнитным квантовым числом⁵. Одновременно видим, что магнетон Бора является естественной квантовой

⁵ В книгах, где ограничиваются лишь рассмотрением орбитального магнитного квантового числа электрона, обычно квантовое число m_l обозначают символом m и называют его просто магнитным квантовым числом. Наше учебное пособие тоже ограничивается рассмотрением орбитального магнитного момента импульса, но в следующей главе университетского курса атомной физики возникает необходимость использовать и спиновое магнитное квантовое число. В связи с этим мы употребим здесь более длинное название для m_l .

единицей измерения магнитного момента.

Подводя итоги, отметим, что мы получили для описания состояния электрона в водородоподобном атоме три квантовых числа: n , ℓ и m_ℓ . Главное квантовое число приобретает значения, указанные в формуле (23.4). Это квантовое число определяет энергию электрона и характеризует наиболее вероятное расстояние от электрона до ядра; одновременно оно показывает, какие значения может приобретать орбитальное квантовое число ℓ (см. формулу (23.5)). Орбитальное квантовое число характеризует абсолютное значение орбитального момента импульса электрона и четность волновой функции электрона; одновременно оно показывает, какие значения может иметь орбитальное магнитное квантовое число (см. формулу (23.6)). Орбитальное магнитное квантовое число характеризует проекцию орбитального момента импульса и проекцию орбитального магнитного момента электрона.

§ 24. Атомный спектр водорода

Рассмотрим бегло испускание электромагнитного излучения изолированными атомами водорода. Терминология спектроскопии говорит, что в этом случае возникает атомный спектр водорода.

Вспомним из классической электродинамики, что в случае излучения существенное значение имеет дипольный момент. Излучение возникает лишь при условии, что вторая производная от дипольного момента по времени отлична от нуля.

В случае атома водорода дипольный момент \vec{d} в классической физике выражается формулой:

$$\vec{d} = -e\vec{r}, \quad (24.1)$$

где e - элементарный заряд и \vec{r} - радиус-вектор электрона.

Попытаемся, исходя из формулы (24.1), построить оператор дипольного момента. Обратим внимание на то, что в формуле

(24.1) e является универсальной постоянной, но получение оператора из вектора \vec{r} довольно просто. По правилу § II оператор \hat{r} определяется таким образом, что его действие на произвольную функцию f означает умножение этой функции на вектор \vec{r} :

$$\hat{r} f = \vec{r} f. \quad (24.2)$$

Так получим оператор дипольного момента:

$$\hat{d} = -e\hat{r}. \quad (24.3)$$

В регистрирующей аппаратуре в конечном итоге находит отражение средняя величина дипольного момента $\langle \hat{d} \rangle$. С учетом принципа соответствия (§ I7) аппаратура должна регистрировать излучение тогда, когда вторая производная $\langle \hat{d} \rangle$ по времени отлична от нуля:

$$\langle \ddot{\hat{d}} \rangle \neq 0. \quad (24.4)$$

Средняя величина дипольного момента для состояния, описываемого волновой функцией Ψ , выражается на основании формул (II.11), (24.2) и (24.3) следующим образом:

$$\langle \hat{d} \rangle = -e \int \vec{r} \Psi^* \Psi d\tau, \quad (24.5)$$

где интегрирование происходит по всему пространству.

Вычислим сначала в качестве иллюстрации среднее значение дипольного момента для стационарных состояний атома водорода, где волновая функция выражается формулой (23.7). В интересах данного параграфа выпишем ее в таком виде:

$$\Psi_n = \psi_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}, \quad (24.6)$$

где n у Ψ и ψ означает сокращенно комплекс трех квантовых чисел (n , l и m_l).

Учитывая формулы (24.5) и (24.6), получим для стационарных состояний:

$$\langle \sigma^z \rangle = -e \int \vec{r} \psi_n^* \psi_n d\tau. \quad (24.7)$$

Четность функции ψ_n по результатам § 2I есть $(-1)^l$, где l - орбитальное квантовое число. Четность функции $\psi_n^* \psi_n$ равна $(-1)^{2l}$, иными словами: $\psi_n^* \psi_n$ - четная функция. Следовательно, в подинтегральном выражении (24.7) нечетная функция и интеграл равен нулю:

$$\langle \sigma^z \rangle = 0. \quad (24.8)$$

Формула (24.8) показывает, что в стационарном состоянии дипольный момент равен нулю. Условие (24.4) не выполняется. Следовательно, в стационарных состояниях атом не излучает. Результат тривиальный, так как энергия атома в стационарном состоянии постоянная.

Можно надеяться, что излучение возникает тогда, когда атом переходит из одного стационарного состояния (волновая функция ψ_n) в другое (волновая функция $\psi_{n'}$). На основе принципа суперпозиции этот переход описывает волновая функция:

$$\Psi = c \psi_n + c' \psi_{n'}, \quad (24.9)$$

где c и c' отличные от нуля константы. Если $c = c' = 0$, то $\Psi = 0$ и переход отсутствует. Переход отсутствует и тогда, когда одна из постоянных равна 0, например, $c' = 0$. Тогда $\Psi = c \psi_n$, но по § 4 волновые функции ψ_n и $c \psi_n$ описывают одно и то же состояние.

Вычислим теперь $\langle \sigma^z \rangle$, если волновая функция выражается формулой (24.9):

$$\langle \vec{d} \rangle = -e [c^* c \int \vec{r} \psi_n^* \psi_n d\tau + c^* c' \int \vec{r} \psi_n^* \psi_{n'} d\tau + c' c^* \int \vec{r} \psi_{n'}^* \psi_n d\tau + c' c' \int \vec{r} \psi_{n'}^* \psi_{n'} d\tau]. \quad (24.10)$$

Здесь первый и третий интегралы (вместе с элементарным зарядом) представляют в соответствии с формулой (24.5) дипольные моменты стационарных состояний n и n' . Они равны нулю на основании только что приведенного доказательства (см. формулу (24.8)).

Для преобразования формулы (24.10) используем выражение волновой функции (24.6):

$$\langle \vec{d} \rangle = -e (c^* c e^{\frac{i(E_n - E_n')t}{\hbar}} \int \vec{r} \psi_n^* \psi_n d\tau + c. c.), \quad (24.11)$$

где в скобках символ $c. c.$ обозначает величину, комплексно сопряженную с первым слагаемым. Это обозначение произошло от английских слов "conjugate complex".

Обозначим:

$$\omega = \frac{E_n - E_n'}{\hbar} \quad (24.12)$$

$$\vec{D} = \int \vec{r} \psi_n^* \psi_n d\tau. \quad (24.13)$$

Вектор $-e\vec{D}$ называют дипольным моментом перехода $n \rightarrow n'$.

На основании формул (24.12) и (24.13) из выражения (24.11) получим:

$$\langle \vec{d} \rangle = (c^* c e^{-i\omega t} \vec{D} + c. c.). \quad (24.14)$$

Взяв из выражения (24.14) вторую производную по времени, получим:

$$\langle \ddot{\vec{d}} \rangle = -\omega^2 \langle \vec{d} \rangle. \quad (24.15)$$

Выражение (24.15) показывает, что среднее значение дипольного момента колеблется с круговой частотой ω . Если в классической физике дипольный момент колеблется с круговой частотой ω , то система испускает электромагнитное излучение с той же частотой. Используя принцип соответствия, можем сказать, что ω является круговой частотой и в квантовой механике. Вернемся теперь назад, к формуле (24.12) и увидим, что мы обосновали правило частоты Бора.

Условие возникновения излучения (24.4) сводится с учетом формул (24.14) и (24.15) к следующему:

$$\vec{D} \neq 0. \quad (24.16)$$

Иначе говоря, можно выразить это так: излучение возникает тогда, когда дипольный момент перехода отличен от нуля. Условия, которые определяют возможность излучения, называют правилами отбора. Эти правила вытекают из требования, чтобы дипольный момент перехода был отличен от нуля.

На основании вышесказанного для выведения правил отбора необходимо рассмотреть интеграл (24.13). Вспомнив определение Y_n , напишем, опираясь на формулу (23.8), интеграл следующим образом:

$$\vec{D} = \int \vec{r} R_{n\ell} R_{n'\ell'}^* Y_{\ell m} Y_{\ell' m'}^* d\tau. \quad (24.17)$$

Возьмем компоненты вектора \vec{D} в декартовой системе координат:

$$\left. \begin{aligned} D_x &= \int x R_{n\ell} R_{n'\ell'}^* Y_{\ell m} Y_{\ell' m'}^* d\tau \\ D_y &= \int y R_{n\ell} R_{n'\ell'}^* Y_{\ell m} Y_{\ell' m'}^* d\tau \\ D_z &= \int z R_{n\ell} R_{n'\ell'}^* Y_{\ell m} Y_{\ell' m'}^* d\tau. \end{aligned} \right\} \quad (24.18)$$

Эти интегралы анализируют в сферических координатах, опираясь на формулы (16.1) и (21.13). Чтобы получить представление, выпишем детально выражение для D_x :

$$\mathcal{D}_z = \left(\int_{z=0}^{\infty} z^3 R_{n\ell}(z) R_{n'\ell'}^*(z) dz \right) \cdot \left(\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi) Y_{\ell' m_\ell'}^*(\theta, \varphi) \sin^2 \theta \cos \varphi d\theta d\varphi \right) \quad (24.19)$$

Из § 16 вспомним, что $Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)$ зависит от φ только через экспоненциальный множитель $e^{im_\ell \varphi}$. Значит можно написать:

$$\mathcal{D}_x \sim \int_0^{2\pi} \cos \varphi e^{i(m_\ell - m_\ell') \varphi} d\varphi, \quad (24.20)$$

где коэффициент пропорциональности равен произведению интегралов, взятых по z и θ .

Для преобразования выражения (24.20) используем формулу

$$\cos \varphi = \frac{1}{2} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}). \quad (24.21)$$

Таким образом:

$$\mathcal{D}_x \sim \int_0^{2\pi} e^{i(m_\ell - m_\ell' + 1)\varphi} d\varphi + \int_0^{2\pi} e^{i(m_\ell - m_\ell' - 1)\varphi} d\varphi. \quad (24.22)$$

Эти интегралы отличны от нуля лишь при условии, что выражение в скобках равно нулю. Результат обычно выражают через приращение орбитального магнитного квантового числа $\Delta m_\ell = m_\ell' - m_\ell$. В связи с этим после интегрирования по φ получим следующие условия для того, чтобы \mathcal{D}_x была отлична от нуля:

$$\Delta m_\ell = \pm 1, \quad (24.23)$$

т.е. орбитальное магнитное квантовое число должно измениться на единицу. Условие (24.23) является одним из правил отбора. Чтобы найти все правила отбора, следует проанализировать в

выражениях \mathcal{D}_x , \mathcal{D}_y и \mathcal{D}_z все интегралы. Результаты следующие:

$$\left. \begin{aligned} \Delta n &\neq 0 \\ \Delta \ell &= \pm 1 \\ \Delta m_\ell &= 0, \pm 1 \end{aligned} \right\} \quad (24.24)$$

где Δn и $\Delta \ell$ определены аналогично Δm_ℓ .

Отметим, что второе и третье **правила** отбора (24.24) получены, опираясь на свойства сферических функций. Благодаря этому, на основании § 21 они имеют более общее значение: они действительны в случае произвольного центральносимметричного поля.

Исходя из формул (23.2), (24.12) и (24.24) теперь просто найти частоту излучения фотона при переходе $n \rightarrow n'$.

$$\nu = R c \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (24.25)$$

Результаты проиллюстрированы на рисунке 20, где указаны длины волн для спектральных линий. Определения спектральных серий разъяснены в таблице 5. В основе определения серии лежит значение главного квантового числа конечного состояния.

Таблица 5

Название серии	Главное квантовое число конечного состояния	Главное квантовое число начального состояния	Область в шкале электромагнитных волн
<u>Серия Лаймана</u>	1	2, 3, 4, ...	ультрафиолетовая
<u>Серия Бальмера</u>	2	3, 4, 5, ...	видимая
<u>Серия Пашена</u>	3	4, 5, 6, ...	инфракрасная
<u>Серия Брэкета</u>	4	5, 6, 7, ...	инфракрасная
<u>Серия Пфунда</u>	5	6, 7, 8, ...	инфракрасная
<u>Серия Хампфри</u>	6	7, 8, 9, ...	инфракрасная

Л и т е р а т у р а

1. Шпольский Э.В. Атомная физика. Т. I. 6-е изд. М., Наука, 1974.
2. Шпольский Э.В. Атомная физика. Т. 2. 4-е изд. М., Наука, 1974.
3. Савельев И.В. Курс общей физики. М., Наука, 1979.
4. Мессиа А. Квантовая механика. Т. I., М., Наука, 1978.
5. Борн М. Атомная физика. М., Мир, 1970.
6. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в атомную физику. М., Наука, 1969.
7. Вихман Э. Квантовая физика. 2-е изд. М., Наука, 1977.
8. Спроул Р. Современная физика. М., Наука, 1974.
9. Физика микромира./Под ред. Д.В.Ширкова./М., Сов. энцикл., 1980.

Оглавление

§ 1. Гипотеза де Бройля	4
§ 2. Свойства волн де Бройля	7
§ 3. Экспериментальная проверка гипотезы де Бройля	11
§ 4. Статистическое толкование волн де Бройля	19
§ 5. Принцип суперпозиции	22
§ 6. Принцип неопределенности	26
§ 7. Уравнение Шредингера	29
§ 8. Стационарные состояния	39
§ 9. Свойства эрмитовых операторов	44
§ 10. Примеры эрмитовых операторов	51
§ 11. Описание физических величин с помощью операторов .	55
§ 12. Соотношение неопределенности	63
§ 13. Примеры на соотношение неопределенности	67
§ 14. Свойства момента импульса	73
§ 15. Сложение моментов импульсов	79
§ 16. Свойства орбитального момента импульса	85
§ 17. Движение частицы в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме	88
§ 18. Частица в бесконечно глубокой трехмерной потенциальной яме	100
§ 19. Туннельный эффект в случае прямоугольного барьера	106
§ 20. Оценка туннельного эффекта в общем случае	115
§ 21. Схема решения уравнения Шредингера в центрально- симметричном поле	120
§ 22. Плотность вероятности нахождения частицы в центральносимметричном поле	127
§ 23. Движение электрона в водородоподобном атоме	132
§ 24. Атомный спектр водорода	143

При Л е м б р а.
ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.
Учебное пособие для студентов отделения физики.
На русском языке.
Тартуский государственный университет.
СССР, 202400, г.Тарту, ул.Пийкопи, 18.
Ответственный редактор А. Сосси.
Подписано к печати 8.09.1983.
Формат 60x84/16.
Бумага писчая.
Машиннопись. Ротапринт.
Условно-печатных листов 8,84.
Учетно-издательских листов 7,74.
Печатных листов 9,5.
Тираж 300.
Заказ № 874.
Цена 25 коп.
Типография ТГУ, СССР, 202400, г.Тарту, ул.Пялсона, 14.