

Лекции 3 - 4. Волновые свойства микрочастиц.

*Гипотеза де Бройля. Дифракция микрочастиц. Принцип неопределенности Гейзенберга. Задание состояния микрочастицы. Волновая функция, ее статистический смысл и условия, которым она должна удовлетворять. Принцип суперпозиции квантовых состояний. Общее уравнение Шредингера. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.*

Гипотеза де Бройля

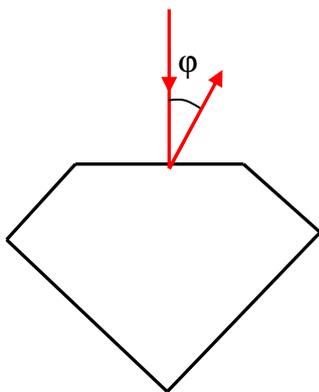
В 1924 году французский физик Луи де Бройль высказал гипотезу о том, что корпускулярно-волновой дуализм характерен не только для фотонов, но и вообще для всех частиц (электронов, протонов, атомов и так далее)

Каждой частице, обладающей импульсом  $p$  можно сопоставить волну, длина которой  $\lambda = \frac{h}{p}$ , где  $h$  – постоянная Планка. Эти волны получили название *волн де Бройля*.

В 1927 году американские учёные Клинтон Дэвиссон и Лестер Джермер провели опыт по проверке гипотезы.

Опыт Дэвиссона-Джермера.

Они исследовали дифракцию электронов при отражении от монокристалла никеля.

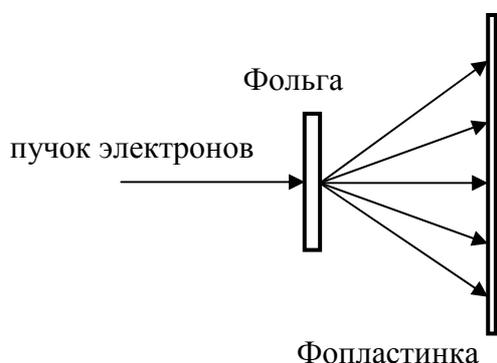


Пучок монохроматических электронов (т.е. электронов с одинаковой кинетической энергией) из электронной пушки падал на шлифованную поверхность кристалла никеля, структура которого была хорошо известна из данных рентгеноструктурного анализа. Рассеянные от кристалла электроны улавливались специальным электродом, присоединенным к чувствительному гальванометру. Приемник электронов мог перемещаться так, чтобы улавливать электроны, рассеиваемые под различными углами  $\phi$ . Интенсивность отражённого пучка оценивалась по силе тока.

Если длина волны де Бройля будет меньше размера решётки, то должна наблюдаться дифракционная картина, аналогичная картине при дифракции рентгеновских лучей на кристалле никеля.

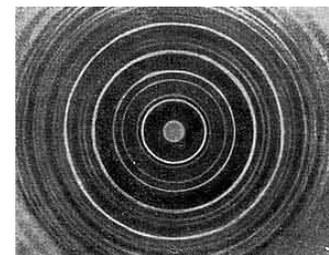
Максимум при отражении от какой-то системы главных атомных плоскостей определяется формулой Вульфа-Брэггов  $2d \sin \theta = n \cdot \lambda$ . Результаты опыта полностью подтвердили гипотезу де Бройля.

В 1927 году Петр Саввич Тартаковский, а в 1928 году английский физик Дж. Томсон (сын Дж. Томсона, открывшего электрон) получили новое подтверждение гипотезы де Бройля. В своих экспериментах Тартаковский наблюдал дифракционную картину при прохождении медленных электронов через поликристаллы никеля,



а Томсон наблюдал дифракционную картину, возникающую при прохождении пучка электронов через тонкую поликристаллическую фольгу из золота.

Впоследствии дифракционные явления были обнаружены также для нейтронов, протонов, атомных и молекулярных пучков. Экспериментальное доказательство наличия волновых



Дифракция электронов на серебряной фольге

свойств микрочастиц привело к выводу о том, что это универсальное явление природы, общее свойство материи. Следовательно, волновые свойства должны быть присущи и макроскопическим телам. Однако вследствие большой массы макроскопических тел их волновые свойства не могут быть обнаружены экспериментально. Например, песчинке массой 0,1 г, движущийся со скоростью

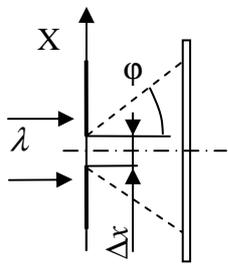
0,1 м/с соответствует волна де Бройля с длиной порядка  $10^{-30}$  м, т. е. приблизительно на 20 порядков меньше размеров атомов. Такая длина волны лежит за пределами доступной наблюдению области. Этот пример показывает, что макроскопические тела могут проявлять только корпускулярные свойства.

Таким образом, учёт волновых свойств частиц необходим в случае, когда характерный размер задачи сопоставим с длиной волны де Бройля.

#### Принцип неопределённости Гейзенберга.

Принцип неопределённости, открытый Вернером Гейзенбергом в 1927 г., является одним из фундаментальных принципов квантовой механики.

В классической физике погрешности измерения параметров частицы обусловлены только точностью измерений. И если физические величины являются независимыми друг от друга, то погрешности их измерений тоже являются независимыми. При указании значений измеренной физической величины приводится доверительный интервал, в котором она принимает значения с некоторой вероятностью. Полуширина этого доверительного интервала пропорциональна среднеквадратичному отклонению.



Оказывается, что учёт волновых свойств частиц накладывает принципиальные ограничения на точность измерения физических величин. Эти ограничения не связаны с погрешностями измерений, а являются следствиями корпускулярно-волнового дуализма частиц.

Рассмотрим дифракцию частицы на щели. Частица движется по нормали к экрану с щелью, поэтому её вектор импульса направлен перпендикулярно к экрану. Если вдоль экрана, перпендикулярно щели направить ось X, то можно сказать, что до щели у частицы был нулевой импульс вдоль оси X. Пусть ширина щели равна  $\Delta x$ . После дифракции на щели частицы как волны де Бройля положение первого минимума дифракционной картины задаётся величиной угла  $\varphi$ , где  $\Delta x \cdot \sin \varphi = \lambda$ . Т.е. можно сказать, что после щели у частицы появится дополнительный импульс вдоль оси X  $\Delta p_x$ , что приведёт к отклонению частицы от направления

первоначального движения. При этом  $\Delta p_x$ , что приведёт к отклонению частицы от направления первоначального движения. При этом  $\Delta p_x$ , что приведёт к отклонению частицы от направления первоначального движения.

При этом  $\Delta p_x$ , что приведёт к отклонению частицы от направления первоначального движения. При этом  $\Delta p_x$ , что приведёт к отклонению частицы от направления первоначального движения.

при более точном определении положения частицы на оси X ( $\Delta x \rightarrow 0$ ) мы получаем большую погрешность в определении импульса вдоль этой оси ( $\Delta p_x \rightarrow \infty$ ).

Этот факт отражает принцип неопределённости – в природе не существует состояния частицы с точно определёнными значениями координаты и проекции импульса на эту ось. Таким образом, понятие траектории частицы в микромире теряет смысл.

Измерение величины одного параметра приводит к изменению величины какого-то другого параметра, следовательно, появляется неопределённость этого параметра. Чтобы отразить этот факт, принцип неопределённости можно сформулировать следующим образом – любое измерение состояния системы приводит к изменению этого состояния.

Математическим выражением термина неопределённость физической величины является среднеквадратичное отклонение значения этой величины, получаемое в процессе наблюдения за частицей (системой). Это среднеквадратичное отклонение физической величины A принято обозначать  $\Delta A$ .

Две физические величины называются канонически сопряженными, если для них можно записать соотношение неопределённости Гейзенберга. Например, координата частицы и им-

пульс вдоль этой координаты являются канонически сопряженными. Тогда для них можно записать  $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ , аналогично  $\Delta p_y \cdot \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}$  и  $\Delta p_z \cdot \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}$ .

В любом состоянии частицы нельзя одновременно как угодно точно измерить импульс и координату частицы вдоль одной оси.

*Замечание.* В этих соотношении неравенство надо понимать как оценочное, т.к. при расчётах получаются оценки по порядку величин.

Но координата и импульс *вдоль другой* координаты не являются сопряжёнными величинами. Например  $\Delta p_x \cdot \Delta y = 0$  - т.е. эти величины могут быть измерены *одновременно* как угодно точно.

Существуют и другие сопряжённые величины. Например, энергия и время  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ , где  $\Delta E$  – неопределённость значения энергии,  $\Delta t$  – неопределённость интервала времени, в течение которого проводились наблюдения за значением энергии.

Отсюда, в частности, следует оценка времени пребывания системы в нестабильном состоянии с «избыточным» значением энергии  $\tau \sim \frac{\hbar}{\Delta E}$ .

И, наоборот, если неопределённость времени наблюдения за состоянием системы равна  $\Delta t$ , то в этом состоянии неопределённость энергии  $\Delta E \sim \frac{\hbar}{\Delta t}$ .

*Замечание.* В случае, когда длина волны де Бройля  $\lambda$  значительно меньше характерного размера задачи  $L$  можно пользоваться законами классической физики. Действительно, если  $\frac{\lambda}{L} \ll 1$ , т.е.

$$\frac{h}{pL} = \frac{2\pi\hbar}{pL} \ll 1, \text{ то, считая, что } \Delta p_x = p \text{ и применяя соотношение неопределённости } \Delta x = \frac{\hbar}{2p},$$

получаем оценку погрешности  $\frac{\Delta x}{L} \ll 1$ .

В итоге, можно сказать, что при учёте волновых свойств частицы теряет смысл не только понятие траектории, но и деление энергии частицы на потенциальную и кинетическую. Ибо потенциальная энергия зависит от координаты, а кинетическая от импульса.

Равенство  $E = E_{\text{к}} + E_{\text{пот}}$  выполняется только для средних значений энергий

### Волновая функция

Состояние микрочастицы, характеристики её движения, взаимодействия с другими частицами и т.д. полностью задаётся функцией, которую называют *волновой функцией* и обозначают  $\Psi$  (пси-функция).

*Принцип суперпозиции состояний.* Если частица может находиться в одном состоянии и может находиться в другом состоянии, то она может находиться и в состоянии, являющимся *суперпозицией* этих состояний. Это означает, что если первое состояние описывается волновой функцией  $\Psi_1$ , а второе  $\Psi_2$ , то состояние, являющееся суперпозицией состояний описывается волновой функцией, являющейся их линейной комбинацией  $\Psi_3 = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ , где  $c_1$  и  $c_2$  – некоторые константы.

Суперпозиция состояний в квантовой механике отличается от состояний от суперпозиции колебаний в классической физике. В классической физике суперпозиция колебаний приводит к новому колебанию с большей или меньшей амплитудой. Возможнее даже случай нулевой амплитуды. В квантовой механике же нулевая амплитуда соответствует отсутствию частицы в данном состоянии.

Для того чтобы определить какую-либо физическую величину, описывающее состояние частицы, надо осуществить некие математические операции над волновой функцией, соответствующей данному состоянию, и проанализировать полученные результаты.

Процесс определения значения какой-либо физической величины  $A$  в соответствующем состоянии частицы, по своей сути является процессом измерения данной физической величины, изменяющим состояние частицы. Поэтому в результате измерения должна измениться волновая функция данного состояния. Таким образом, процесс измерения следует описывать правилом, по которому меняется волновая функция, т.е. следует задать соответствующую «функцию от функции» или оператор физической величины  $\hat{A}$ , сопоставляющий волновой функции одного состояния  $\Psi$  волновую функцию другого состояния  $\tilde{\Psi}$ . Математически процесс измерения можно записать так  $\hat{A}\Psi = \tilde{\Psi}$ . Принцип суперпозиции требует, чтобы этот оператор был *линейным*, т.е.  $\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{A}\Psi_1 + c_2\hat{A}\Psi_2$ .

Допустим, что при измерении некоторой физической величины в состоянии с волновой функцией  $\Psi_1$  получается одно значение  $A_1$ , а в состоянии с  $\Psi_2$  – другое  $A_2$ . Какое значение получится при измерении в состоянии, являющимся суперпозицией этих состояний

$$\Psi_3 = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2?$$

Процесс измерения любой физической величины носит вероятностный характер. Т.е. тот или иной результат измерения можно получить с какой-то определённой вероятностью. Это означает, что при однократных измерениях мы будем получать значения  $A_1$  или  $A_2$  с некоторыми, вообще говоря, разными вероятностями  $p_1$  и  $p_2$ .

*Замечание.* Состояние, которое можно описать волновой функцией принято называть *чистым* состоянием. В обратном случае, состояния называются *смешанными*.

Требования, чтобы измерения сводились к операциям над волновыми функциями, приводит к условию, налагаемому на математическое выражение для волновой функции – она должна быть функцией, принимающей значения в *комплексном пространстве*. Поэтому для неё справедливы все операции над комплексными числами.

Математическое отступление.

Напомним, что символом  $i$  обозначается такое комплексное число, что  $i^2 = -1$ . Любое комплексное число  $z$  может представлено в виде  $z = x + i \cdot y$ , где  $x$  и  $y$  – вещественные числа. При этом число  $x$  называется *вещественной* частью числа  $z$  и обозначается  $x = \text{Re}(z)$ , а число  $y$  называется *мнимой* частью числа  $z$  и обозначается  $y = \text{Im}(z)$ .

Число  $z^*$  является *комплексно сопряжённым* числу  $z = x + i \cdot y$ , если  $z^* = x - i \cdot y$ .

В частности  $i^* = -i$ . Для вещественного числа  $z^* = z$ .

Сумма двух комплексных чисел  $z_1 = x_1 + iy_1$  и  $z_2 = x_2 + iy_2$  равна

$$z_1 + z_2 = x_1 + x_2 + i(y_1 + y_2).$$

Произведение двух комплексных чисел  $z_1 = x_1 + iy_1$  и  $z_2 = x_2 + iy_2$  равно

$$z_1 \cdot z_2 = (x_1 + iy_1) \cdot (x_2 + iy_2) = x_1x_2 + ix_1y_2 + iy_1x_2 + iy_1 \cdot iy_2 = x_1x_2 - y_1y_2 + i(x_1y_2 + y_1x_2)$$

и не зависит от порядка сомножителей.

В частности,  $z \cdot z^* = x^2 + y^2 = z^* \cdot z$ .

Величина  $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$  называется *модулем* комплексного числа  $z = x + i \cdot y$ .

Т.е.  $z \cdot z^* = z^* \cdot z = |z|^2$ . Кроме того,  $|z| = |z^*|$ .

Для того чтобы разделить одно комплексное число  $z_1 = x_1 + iy_1$  на другое  $z_2 = x_2 + iy_2$  надо знаменатель и числитель дроби умножить на комплексно сопряжённое число к знаменателю

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{z_1 z_2^*}{z_2 z_2^*} = \frac{z_1 z_2^*}{|z_2|^2}. \text{ В частности, } \frac{1}{i} = -i.$$

$$\text{Для числа } \frac{z}{|z|} = \frac{x}{|z|} + i \frac{y}{|z|} \text{ можно записать } \left| \frac{z}{|z|} \right|^2 = \frac{x^2}{|z|^2} + \frac{y^2}{|z|^2} = 1.$$

Следовательно, существует такой угол  $\varphi$ , что  $\frac{x}{|z|} = \cos \varphi$ ,  $\frac{y}{|z|} = \sin \varphi$ . Тогда комплексное число  $z = x + i \cdot y$  можно записать в виде  $z = |z|(\cos \varphi + i \cdot \sin \varphi)$ .

Соотношение Эйлера  $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \cdot \sin \varphi$  можно получить следующим образом. Обозначим  $f(\varphi) = \cos \varphi + i \cdot \sin \varphi$ . Тогда справедливо соотношение

$$f'(\varphi) = -\sin \varphi + i \cdot \cos \varphi = i \cdot (\cos \varphi + i \cdot \sin \varphi) = i \cdot f.$$

Решением этого дифференциального уравнения, с учётом условия  $f(0) = 1$ , является функция  $f(\varphi) = e^{i\varphi}$ , поэтому  $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \cdot \sin \varphi$ . Это соотношение позволяет привести ещё более короткую запись для комплексного числа  $z = |z|e^{i\varphi}$ .

С учётом такой формы записи получаем, что  $z^* = |z|e^{-i\varphi}$ ,  $z_1 \cdot z_2 = |z_1| \cdot |z_2| e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)}$ ,  $z \cdot z^* = |z|^2$ .  
 $(z_1 \cdot z_2)^* = (|z_1|e^{i\varphi_1} \cdot |z_2|e^{i\varphi_2})^* = (|z_1| \cdot |z_2| e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)})^* = |z_1| \cdot |z_2| e^{-i(\varphi_1 + \varphi_2)} = |z_1|e^{-i\varphi_1} \cdot |z_2|e^{-i\varphi_2} = z_1^* \cdot z_2^*$ .

Возведение комплексного числа в степень  $z^n = |z|^n e^{in\varphi}$ .

Извлечение корня  $n$ -й степени  $\sqrt[n]{z} = \sqrt[n]{|z|} \cdot e^{i \frac{\varphi + 2\pi k}{n}}$  (где  $k=0, \dots, n-1$ ) даёт  $n$  корней.

*Замечание.*  $|e^{i\varphi}| = \sqrt{\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi} = 1$ .

### Статистический смысл волновой функции.

Макс Борн предложил следующий смысл волновой функции:  $dP$  - вероятность того, что частица находится в некоторой малой области пространства, объём которой  $dV$ , определяется равенством

$$dP = |\Psi|^2 \cdot dV$$

т.е. квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности нахождения частицы в некоторой области пространства  $\frac{dP}{dV} = |\Psi|^2$ . Поэтому для нахождения вероятности того, что частица находится в некоторой области  $V$  надо вычислить интеграл  $P(V) = \int_V |\Psi|^2 dV$ .

Следовательно, если частица *не может* находиться в области  $V$ , то  $P(V) = \int_V |\Psi|^2 dV = 0$ .

Т.к.  $|\Psi|^2 \geq 0$ , то это равенство возможно при  $|\Psi| = 0$ , т.е.  $\Psi = 0$  в этой области  $V$ .

Если частица *обязательно* находится в области  $V$ , то  $P(V) = \int_V |\Psi|^2 dV = 1$ .

Следовательно, квадрат модуля волновой функции должен быть интегрируемой функцией по этой области.

*Замечание.* Вероятность того, что частица находится в какой-то определённой точке, равна нулю, т.к. в этом случае объём соответствующей области нулевой.

### Уравнение Шрёдингера.

Волновая функция должна являться решением уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \cdot \Psi$$

где  $m$  – масса частицы,  $U$  – действительная функция координат и времени, такая, что вектор  $-\text{grad}U$  является классическим аналогом силы, действующей на частицу. В случае, когда  $U$  не зависит от времени, она совпадает с потенциальной энергией.

$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$  - результат действия на функцию  $\Psi$  оператора Лапласа.

Следовательно, волновая функция должна быть непрерывно-дифференцируемой один раз по времени и два раза по пространственным координатам.

Уравнение  $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\cdot\Psi$  носит название (*временного*) уравнения Шрёдингера

по имени немецкого физика Эрвина Шрёдингера, предложившего его в 1926 году.

**Уравнение Шрёдингера является одним из постулатов (аксиом) квантовой механики и играет в атомной физике такую же фундаментальную роль, как уравнения Ньютона в классической механике и уравнения Максвелла в классической электродинамике.**

Уравнение Шрёдингера является линейным, т.е. линейная комбинация решений тоже является решением. Действительно, если каждая из функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  является решением, то их линейная комбинация  $\Psi_3 = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$  (где  $c_1$  и  $c_2$  – некоторые константы) тоже является решением, т.к. уравнение  $i\hbar\frac{\partial\Psi_3}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_3 + U\cdot\Psi_3$  в силу равенств

$$i\hbar\frac{\partial(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) + U\cdot(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)$$

$$\text{или } c_1i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t} + c_2i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t} = -c_1\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_1 + c_1U\cdot\Psi_1 - c_2\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_2 + c_2U\cdot\Psi_2$$

является линейной комбинацией уравнений

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_1 + U\cdot\Psi_1 \text{ и } i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_2 + U\cdot\Psi_2.$$

Следовательно, *принцип суперпозиции состояний* не противоречит уравнению Шрёдингера.

*Замечание.* Сопряжённое уравнение Шрёдингера для волновой функции имеет вид

$$\left(i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)^* = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\cdot\Psi\right)^* \text{ или } -i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^* + U\cdot\Psi^*.$$

**Пример.** Найдём волновую функцию для свободно движущейся частицы в одномерной области (волны де Бройля). В этом случае  $U=0$ , поэтому уравнение Шрёдингера принимает вид

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

Пусть частица движется вдоль оси X, тогда получаем соотношение  $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$ .

Решение этого уравнения ищем в виде плоской волны ( $C=const$ )

$$\Psi = C \cdot e^{i(kx - \omega t)} = C \cdot (\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)).$$

После подстановки в уравнение выражений для производных

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} [C e^{i(kx - \omega t)}] = -i\omega C e^{i(kx - \omega t)}, \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} [C e^{i(kx - \omega t)}] = -k^2 C e^{i(kx - \omega t)}$$

$$\text{получаем равенство } i\hbar\{-i\omega C e^{i(kx - \omega t)}\} = -\frac{\hbar^2}{2m}\{-k^2 C e^{i(kx - \omega t)}\}.$$

После сокращений остаётся  $\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$ . Если по аналогии с фотоном свободной частице приписать энергию  $E = \hbar\omega$  и импульс  $p = \hbar k$ , то получим классическое соотношение между кинетической энергией и импульсом  $E = \frac{p^2}{2m}$ .

$$E = \frac{p^2}{2m}.$$

Рассмотрим решение типа плоской волны для частицы, которая движется в одномерной области, в которой  $U(x)$  не зависит от времени. Т.к. в этом случае  $\Psi = Ce^{i(kx-\omega t)}$  и уравнение Шрёдингера имеет вид  $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U \cdot \Psi$ , то после подстановки функции в уравнение получаем равенство

$$i\hbar \left\{ -i\omega C e^{i(kx-\omega t)} \right\} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ -k^2 C e^{i(kx-\omega t)} \right\} + U \cdot C e^{i(kx-\omega t)}.$$

Получаем соотношение  $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U$ , которое можно трактовать как определение механической энергии в классической физике  $E = E_k + U$ . ♣

*Замечание.* Для свободной частицы квадрат модуля волновой функции равен

$$|\Psi|^2 = \left| C e^{i(kx-\omega t)} \right|^2 = |C|^2 \left( \cos^2(kx-\omega t) + \sin^2(kx-\omega t) \right) = |C|^2.$$

Поэтому интеграл  $P(a < x < b) = \int_a^b |\Psi|^2 dx = |C|^2 \cdot (b-a)$  имеет смысл только для ограниченной области.

### Условие нормировки.

Уравнение Шрёдингера линейное, поэтому если решением является функция  $\Psi$ , то решением является также и функция  $\Psi_1 = c \cdot \Psi$ , где  $c = const$ . В этом смысле говорят, что волновая функция определяется с точностью до константы.

Из физического смысла следует, что для всей области определения волновой функции  $V$  справедливо утверждение – вероятность того, что частица находится в этой области  $V$ , равна единице

$$P(V) = \int_V |\Psi|^2 dV = 1.$$

Следовательно, если при решении задачи о поиске волновой функции в некоторой области было найдено решение  $\Psi_1$ , но при этом  $\int_V |\Psi_1|^2 dV = |C|^2 \neq 1$ , то в качестве волновой функции следу-

ет взять функцию  $\Psi_2 = \frac{1}{C} \Psi_1$ , т.к. она тоже является решением и для неё выполняется

$$\int_V |\Psi_2|^2 dV = \int_V \left| \frac{\Psi_1}{C} \right|^2 dV = \frac{1}{|C|^2} \int_V |\Psi_1|^2 dV = \frac{1}{|C|^2} |C|^2 = 1.$$

Правило выбора решения  $\Psi$ , такого, что для него во всей области выполняется условие

$$P(V) = \int_V |\Psi|^2 dV = 1$$

называется *условием нормировки решения на единицу* или просто *условием нормировки*.

*Замечание.* В принципе, формально можно выбрать и другое условие нормировки – например:

$$\int_V |\Psi|^2 dV = 2,$$

но тогда квадрат модуля волновой функции уже не будет иметь смысл плотности вероятности.

### Вектор плотности потока вероятности.

В классической физике из уравнений движения частиц или уравнений Максвелла следуют разнообразные законы сохранения и уравнения непрерывности. Посмотрим, как обстоит дело с уравнением Шрёдингера.

Если частица не находится постоянно в некоторой области пространства  $V$ , то вероятность её нахождения в этой области должна зависеть от времени. Поэтому в этом случае

$$\frac{dP}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \int_V |\Psi|^2 dV \right) \neq 0.$$

Предполагаем, что объём неподвижен, поэтому

$$\frac{dP}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \int_V |\Psi|^2 dV \right) = \int_V \left( \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 \right) dV = \int_V \left( \frac{\partial}{\partial t} (\Psi \Psi^*) \right) dV = \int_V \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right) dV.$$

Из уравнения Шрёдингера следует, что

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \cdot \Psi \right\}.$$

Из сопряжённого уравнения Шрёдингера

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* + U \cdot \Psi^* \right\}.$$

Тогда

$$\frac{dP}{dt} = \int_V \left( \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \cdot \Psi \right\} \Psi^* - \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* + U \cdot \Psi^* \right\} \Psi \right) dV$$

откуда после сокращений

$$\frac{dP}{dt} = \int_V \left( -\frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \Psi) \Psi^* + \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \Psi^*) \Psi \right) dV = -\frac{i\hbar}{2m} \int_V \left( (\Delta \Psi^*) \Psi - (\Delta \Psi) \Psi^* \right) dV.$$

Т.к.  $\text{div}(\Psi \text{grad} \Psi^*) = (\text{grad} \Psi, \text{grad} \Psi^*) + \Psi \Delta \Psi^*$  и

$\text{div}(\Psi^* \text{grad} \Psi) = (\text{grad} \Psi, \text{grad} \Psi^*) + \Psi^* \Delta \Psi$ , то

$\text{div}(\Psi \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \text{grad} \Psi) = \Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi$ .

С учётом теоремы Остроградского-Гаусса получаем

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \int_V \text{div}(\Psi \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \text{grad} \Psi) dV = -\frac{i\hbar}{2m} \oint_S ((\Psi \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \text{grad} \Psi), d\vec{S}).$$

Вектор плотности вероятности определяется соотношением

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \cdot \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \cdot \text{grad} \Psi).$$

Уравнение непрерывности для вероятности в интегральной форме:

$$\frac{dP}{dt} = -\oint_S (\vec{j}, d\vec{S})$$

изменение вероятности нахождения частицы в некотором объёме  $V$  равно с обратным знаком потоку вектора плотности вероятности через замкнутую поверхность  $S$ , ограничивающую этот объём.

Т.к. для неподвижного объёма справедливо равенство  $\frac{dP}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \int_V |\Psi|^2 dV \right) = \int_V \left( \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 \right) dV$ ,

то из равенства  $\int_V \left( \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 \right) dV = -\frac{i\hbar}{2m} \int_V \text{div}(\Psi \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \text{grad} \Psi) dV$  можно получить уравнение

непрерывности для вероятности в дифференциальной форме:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = -\text{div}(\vec{j}).$$

Стационарные состояния.

Состояния частицы, для которых значение энергии определено однозначно, называются *стационарными* состояниями.

*Замечание.* Из принципа неопределённостей для времени и энергии  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$  следует, что если неопределённость энергии в каком-то состоянии стремится к нулю  $\Delta E \rightarrow 0$ , то время пребывания системы в этом состоянии должно быть бесконечно большим. В этом смысле состояние называется *стационарным*.

Как будет установлено далее (в теории операторов), волновая функции частицы в стационарном состоянии со значением энергии  $E$  принимает особый вид

$$\Psi = \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t},$$

где функция «пси малая»  $\psi$  зависит только от координат частицы, но не зависит от времени, поэтому её иногда называют *координатной частью волновой функции стационарного состояния*.

В стационарном состоянии плотность вероятности *не зависит от времени*. Действительно, плотность вероятности равна квадрату модуля волновой функции

$$|\Psi|^2 = \left| \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = |\psi|^2 \cdot \left| e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = |\psi|^2.$$

Следовательно, для стационарного состояния уравнение непрерывности для вероятности примет вид:

$$\operatorname{div}(\vec{j}) = 0.$$

Соответственно, вектор плотности вероятности для стационарного состояния

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \cdot \operatorname{grad} \psi^* - \psi^* \cdot \operatorname{grad} \psi).$$

Уравнение Шрёдингера для стационарного состояния.

Необходимым условием стационарности состояния является независимость от времени функции  $U$ , т.е. в стационарном состоянии эта функция однозначно трактуется как потенциальная энергия. В этом случае, подставим во временное уравнение Шрёдингера  $\Psi = \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \cdot \Psi, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \left( \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right) + U \cdot \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \\ i\hbar \psi \left( -i\frac{E}{\hbar} \right) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \Delta \psi + U \cdot \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \end{aligned}$$

Т.к.  $e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \neq 0$ , то можно сократить  $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ :  $E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \cdot \psi$ . После преобразований получаем уравнение

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \cdot \psi = 0$$

которое носит название *уравнение Шрёдингера для стационарного состояния*.