МОДЕЛЬНАЯ НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

В. А. Котельников

Москва, ФИЗМАТЛИТ, 2008

Введение

Квантовая механика рассматривает движение очень малых тел, таких как элементарные частицы. Как показали эксперименты, их движение не всегда подчиняется законам классической механики. Квантовая механика оказалась более сложной и абстрактной, нежели классическая. Частицы в «классической» квантовой механике не имеют зрительного образа. Они не имеют траекторий, не могут одновременно иметь определенного положения и скорости и т. п. Движение частиц определяется многими правилами, которые не всегда строго выводятся из основных законов, как это имеет место в классической механике макротел и электродинамике.

Все это затрудняет изучение и использование квантовой механики, особенно для тех, кому больше присуще образное мышление.

В данной работе предлагается некоторая образная модель квантовой механики, которая соответствует накопленному экспериментальному материалу, но делает ее (механику малых тел) более наглядной и более строго логично построенной.

Глава 1

Построение модели

1.1. Основные положения нерелятивистской квантовой механики

Основное положение классической механики заключается в следующем: состояние частицы массой m как точечного тела задается ее положением с помощью радиус-вектора $\mathbf{r}$ и ее скоростью $\mathbf{V}$. Зная эти параметры для некоторого момента времени t и силу внешнего поля, которая будет действовать на частицу, мы можем определить, используя закон Ньютона, все параметры ее движения для любого момента времени.

В квантовой механике это оказывается не так. Как показали эксперименты и анализ их результатов, состояние частиц в данный момент времени t нельзя полностью охарактеризовать значениями $\mathbf{r}$ и $\mathbf{V}$.

Основное положение нерелятивистской квантовой механики, подтвержденное опытами, заключается в следующем: если не учитывать спин частицы, то ее состояние в некоторый момент времени t полностью определяется некоторой комплексной функцией (волновой функцией) в трехмерном пространстве

$$\psi(\mathbf{r}, t) = a(\mathbf{r}, t)\, e^{i\beta(\mathbf{r}, t)}, \tag{1.1}$$

где $a(\mathbf{r}, t)$ и $\beta(\mathbf{r}, t)$ вещественны. Функция $a(\mathbf{r}, t)$ определяет вероятность положения частицы в момент t в том или другом месте пространства. Так, вероятность того, что частица будет находиться в момент t в некотором малом объеме dq, содержащем конец радиус-вектора $\mathbf{r}$, равна

$$dP = a^2(\mathbf{r}, t)\, dq. \tag{1.2}$$

Функция $\beta(\mathbf{r}, t)$ определяет динамическое состояние частицы.

В отсутствие магнитного поля, зная $\psi(\mathbf{r}, t)$ для начального момента, массу частицы m и силы внешних полей $\mathbf{F}_0(\mathbf{r}, t)$, которые на нее будут действовать, можно найти $\psi(\mathbf{r}, t)$ для других моментов времени с помощью уравнения Шредингера. Оно, для нерелятивистского случая, который мы только и будем рассматривать, и отсутствия магнитного поля и спина записывается так:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}, t)\,\psi(\mathbf{r}, t), \tag{1.3}$$

где $\hbar = 1{,}05 \cdot 10^{-27}$ эрг · сек. — постоянная Планка, $U(\mathbf{r}, t)$ — силовая функция поля, действующего на частицу. При этом сила, действующая на частицу, будет равна

$$\mathbf{F}_0 = -\nabla U(\mathbf{r}, t). \tag{1.4}$$

Зная $\psi(\mathbf{r}, t)$ и m, можно с помощью правил квантовой механики найти и другие параметры движения частицы.

Использование вероятностных параметров обусловлено тем, что при проведении совершенно идентичных экспериментов, в которых происходит регистрация малых частиц, мы не имеем одинаковых результатов. Координаты частиц регистрируются с разбросом и можно лишь говорить о вероятности нахождения частицы в том или другом месте.

Приведенная закономерность является основным положением нерелятивистской квантовой механики.

1.2. Скорость частицы в нерелятивистской модельной квантовой механике

В общепринятой квантовой механике говорится, что частица не может одновременно находиться в определенном месте и иметь при этом определенную скорость. Но там рассматриваются параметры частицы, взятые из разных реализаций процесса при одной и той же волновой функции.

Попробуем построить модель, которая соответствовала бы приведенному основному положению квантовой механики и, значит, опыту, но в которой частица имела бы траекторию как в макроскопической механике. При построении модели мы будем рассматривать положение и скорость в одной и той же реализации, где скорость и положение могут существовать одновременно. Для этого сначала найдем скорость и ускорение частицы, если она двигается так, как этого требует основное положение квантовой механики, т. е. так, что удовлетворяется уравнение Шредингера (1.3).

Предположим, что частица, находясь в момент времени t в точке с радиус-вектором $\mathbf{r}$, имеет скорость $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$. Найдем вероятность того, что частица за время $t, t+dt$ пересечет малую площадку $d\mathbf{S}$ (см. рис. 1). Частица за время dt передвинется на отрезок $\mathbf{V}dt$. Она пересечет площадку $d\mathbf{S}$, если в момент t находилась на расстоянии $-\lambda\mathbf{V}\,dt$ $(0<\lambda<1)$ от одной из точек этой площадки или, что то же, если она была в момент t в примыкающей к площадке $d\mathbf{S}$ области объемом $dq = \mathbf{V}\,d\mathbf{S}\,dt$. Вероятность этого, согласно (1.2), будет $dP_{dS} = a^2\mathbf{V}\,d\mathbf{S}\,dt$.

Таким образом, dP_{dS} — вероятность пересечения частицей площадки $d\mathbf{S}$ за отрезок времени $t, t+dt$. При $\mathbf{V}d\mathbf{S}<0$ частица будет пересекать площадку $d\mathbf{S}$ в обратном направлении, и в этом случае dP_{dS_1} будет отрицательно.

Возьмем некоторый объем q, ограниченный замкнутой поверхностью S. Вероятность того, что частица выйдет из этого объема, т. е. пересечет поверхность S за время $t, t+dt$ будет, в соответствии с теоремой Гаусса–Остроградского,

$$P_- = dt\oint\limits_S a^2\mathbf{V}d\mathbf{S} = dt\int\limits_q \nabla\cdot(a^2\mathbf{V})\,dq.$$

Вероятность того, что частица в момент t была в объеме q, согласно (1.2) равна

$$P_t = \int\limits_q a^2 dq.$$

Вероятность того, что частица в момент $t + dt$ останется в объеме q равна

$$P_{t+dt} = \int\limits_q \left(a + \frac{\partial a}{\partial t}\, dt\right)^2 dq = \int\limits_q \left(a^2 + 2a\frac{\partial a}{\partial t}\, dt\right) dq.$$

Тут слагаемое с dt^2 опущено как бесконечно малая величина более высокого порядка.

Очевидно, что за событием «частица находится в объеме q в момент t» обязательно последует одно из двух событий: «частица останется в объеме q в момент $t + dt$» или «частица выйдет из области q за время t, $t + dt$». Поэтому

$$P_t = P_{t+dt} + P_-$$

или

$$P_{t+dt} - P_t = -P_-.$$

Из этого равенства находим

$$\int\limits_q \frac{\partial a^2}{\partial t}\, dq = -\int\limits_q \nabla \left(a^2 \mathbf{V}\right) dq,$$

и т. к. это равенство должно быть справедливо для любого q, то

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} = -\nabla\bigl(a^2 \mathbf{V}\bigr). \tag{1.5}$$

Теперь посмотрим, чему должна равняться величина $\dfrac{\partial a^2}{\partial t}$, исходя из уравнения Шредингера (1.3). Для этого подставим в него значение $\psi\left(\mathbf{r},\, t\right)$ из (1.1). Получим

$$i\hbar\left(\frac{\partial a}{\partial t} + ia\frac{\partial \beta}{\partial t}\right) e^{i\beta} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Bigl[\nabla^2 a + 2i\left(\nabla a\right)\left(\nabla \beta\right) + \\ + ia\nabla^2\beta - \alpha\left(\nabla\beta\right)^2\Bigr] e^{i\beta} + Uae^{i\beta}. \tag{1.6б}$$

Сокращая обе части уравнения на $\hbar e^{i\beta}$ и приравнивая мнимые части, получим

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\left[2\left(\nabla a\right)\left(\nabla\beta\right) + a\nabla^2\beta\right].$$

Далее, умножая обе части на $2a$ и преобразовывая, получим

$$2a\,\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\partial a^2}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\left[4a\left(\nabla a\right)\left(\nabla\beta\right) + 2a^2\nabla^2\beta\right], \tag{1.6а}$$

или

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} = -\frac{\hbar}{m}\,\nabla\left(a^2\nabla\beta\right). \tag{1.6}$$

Приравнивая действительные части и сокращая на $ae^{i\beta}$, получим

$$-\hbar\,\frac{\partial\beta}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{\nabla^2 a}{a}+(\nabla\beta)^2\right]+U. \qquad (1.7)$$

Мы видим, что уравнения (1.6) и (1.5) будут совпадать, если принять

$$\mathbf{V}\,(\mathbf{r},t)=\frac{\hbar}{m}\,\nabla\beta\,(\mathbf{r},t)\,. \qquad (1.8)$$

Таким образом, *если частица в момент времени t оказалась в точке с радиус-вектором* $\mathbf{r}$, *то ее скорость, для того чтобы удовлетворялось уравнение Шредингера и соотношение* (1.2), *должна соответствовать уравнению* (1.8).

1.3. Силы в нерелятивистской модельной квантовой механике

Найдем теперь силы, которые должны действовать на частицу, чтобы она имела эти скорости. Для этого определим из полученных скоростей ускорение частицы. Ускорение и скорость, при движении частицы по некоторой траектории, когда надо учитывать изменение $V(\mathbf{r},t)$ за счет $\mathbf{r}$ и t будут, как известно, связаны уравнением (см. приложение 1)

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt}=\frac{1}{2}\,\nabla(\mathbf{V}^2)-\mathbf{V}\times(\nabla\times\mathbf{V})+\frac{\partial\mathbf{V}}{\partial t}. \qquad (1.9)$$

Согласно уравнению (1.8), скорость$\mathbf{V}$ является градиентом, поэтому векторное произведение $\nabla\times\mathbf{V}=0$, и значит

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt}=\frac{1}{2}\,\nabla(\mathbf{V}^2)+\frac{\partial\mathbf{V}}{\partial t}. \qquad (1.10)$$

Обратим внимание на разницу между $\dfrac{d\mathbf{V}}{dt}$ и $\dfrac{\partial\mathbf{V}}{\partial t}$. Производная $\dfrac{d\mathbf{V}}{dt}$ — это ускорение частицы при ее движении по траектории, в то время как $\dfrac{\partial\mathbf{V}}{\partial t}$ — это частная производная $\mathbf{V}\,(\mathbf{r},t)$ по времени, когда $\mathbf{r}$ считается постоянным.

Если принять, что движение частицы подчиняется закону Ньютона, то для возникновения ускорения на нее должна подействовать сила

$$\mathbf{F}=m\,\frac{d\mathbf{V}}{dt}=\frac{m}{2}\,\nabla(\mathbf{V}^2)+m\,\frac{\partial\mathbf{V}}{\partial t}, \qquad (1.11)$$

или, учитывая (1.8), получим

$$\mathbf{F}=\frac{m}{2}\,\nabla\left(\frac{\hbar^2}{m^2}\,(\nabla\beta)^2\right)+m\,\frac{\hbar}{m}\,\frac{\partial\nabla\beta}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\,(\nabla\beta)^2+\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\nabla\beta. \qquad (1.12)$$

Выражение, стоящее в правой части (1.12), можно также получить из равенства (1.7). Действительно, если взять градиент от правой и левой частей равенства (1.7), получим

$$-\hbar\,\frac{\partial\nabla\beta}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[-\nabla\,\frac{\nabla^2 a}{a} + \nabla\,(\nabla\beta)^2\right] + \nabla U,$$

или

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\,(\nabla\beta)^2 + \hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\nabla\beta = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\,\frac{\nabla^2 a}{a} - \nabla U.$$

Принимая это во внимание, выражение (1.12) можно переписать так:

$$\mathbf{F} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\,\frac{\nabla^2 a}{a} - \nabla U = \mathbf{F}_q + \mathbf{F}_0 = m\,\frac{d\mathbf{V}}{dt}. \tag{1.13}$$

Здесь

$$\mathbf{F}_0 = -\nabla U, \tag{1.14}$$

в соответствии с условием (1.4), сила внешнего поля, действующая на частицу

$$\mathbf{F}_q = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\,\frac{\nabla^2 a}{a} \tag{1.15}$$

— добавочная сила, которая должна действовать на частицу для того, чтобы она перемещалась так, как этого требует уравнение Шредингера, и, значит, было бы совпадение с экспериментами. Эта сила определяется модулем волновой функции $a(\mathbf{r}, t)$.

1.4. Модель малой частицы в нерелятивистской модельной квантовой механике

На основании сказанного предлагается следующая модель малой частицы. Модель частицы состоит из совокупности некоторого объемного образования в виде скалярного поля $a^2(\mathbf{r}, t)$, равного квадрату модуля волновой функции (1.1), и движущейся в нем точечной частицы. Поле модели назовем квазиполем, точечную частицу — Т-частицей, а совокупность квазиполя и Т-частицы — квантоном.

Динамика квазиполя определяется уравнением Шредингера (1.3). Движение Т-частицы подчиняется закону Ньютона (1.13), т. е. она движется как точечная частица в классической механике под действием суммы двух сил: классической — F_0 (1.14) и квантовой — F_q (1.15). Наличие силы F_q обуславливает отличие квантовой механики от классической.

В случае, когда силой F_q можно пренебречь по сравнению с внешними силами F_0, действуют законы классической механики. Вероятность того, что частица будет находиться в малом объеме dq, содержащем конец радиус-вектора $\mathbf{r}$, в момент t дается выражением (1.2). Скорость Т-частицы в этом случае будет определяться выражением (1.8). При повторении в точности одного и того же эксперимента волновая функция, а значит и квазиполе, будут повторяться, но Т-частица будет занимать разные положения с вероятностью, даваемой выражением

(1.2), и, соответственно, для разных положений Т-частицы ее скорость будет определяться выражением (1.8). В уравнение Шредингера положение Т-частицы не входит, таким образом, она на свое квазиполе не действует. Т-частица может иметь электромагнитные и другие поля и действовать с помощью внешних сил на другие элементарные частицы.

Мы рассмотрели случай, когда элементарная частица имеет одну волновую функцию. Это так называемый чистый случай. Может быть и более сложная ситуация, когда элементарная частица может иметь одну из нескольких волновых функций $\psi_1(\mathbf{r}, t)$, $\psi_2(\mathbf{r}, t), \ldots, \psi_n(\mathbf{r}, t)$ с вероятностями $P_1, P_2, \ldots, P_n$. Это будет так называемый смешанный случай, когда надо рассматривать ситуацию с каждой волновой функцией отдельно и затем складывать результаты с учетом вероятностей $P_1, P_2, \ldots, P_n$.

Нерелятивистскую квантовую механику можно построить, декларируя предложенную модель элементарной частицы, сославшись на то, что она не противоречит опытам, и выводя все остальное, включая уравнение Шредингера, логическими построениями из нее.

Глава 2
Квазиполе

2.1. Рассмотрим подробнее свойства квазиполя. В соответствии с (1.2), вероятность того, что Т-частца будет находиться в момент t в некоторой области q, будет

$$P_q(t) = \int\limits_q a^2(\mathbf{r}, t)\, dq, \tag{2.1}$$

где интеграл берется по этой области. Будем называть $a^2(\mathbf{r}, t)$ **плотностью** квазиполя в точке $\mathbf{r}$ в момент t, а величину интеграла (2.1) — **количеством** квазиполя в объеме q. Тогда будет справедливо положение: вероятность нахождении Т-частицы в некоторой области равна количеству квазиполя в ней.

Квазиполе, которое можно представить как некоторый газ или сжимаемую жидкость с плотностью $a^2(\mathbf{r}, t)$, не возникает со временем и не исчезает, а только перемещается со скоростью $V(\mathbf{r}, t)$. При этих условиях для квазиполя должно выполняться соотношение

$$dt\,\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_q a^2 dq = -dt \oint\limits_S a^2 \mathbf{V} d\mathbf{S}. \tag{2.2}$$

Левый интеграл в (2.2) берется по некоторой области q, правый — по замкнутой поверхности S, охватывающей эту область. За время dt количество квазиполя в области q уменьшится на величину левой части выражения (2.2). Это уменьшение произойдет только за счет того, что поле выйдет через поверхность S. Через элемент этой поверхности $d\mathbf{S}$ за время dt выйдет количество квазиполя, равное $a^2\mathbf{V}\,d\mathbf{S}\,dt$, а через всю поверхность выйдет количество квазиполя, равное правой части равенства (2.2).

2.2. Найдем далее, какова должна быть скорость движения квазиполя $V(\mathbf{r}, t)$, чтобы выполнялось и соотношение (2.2), и условие того, что плотность квазиполя $a^2(\mathbf{r}, t)$ соответствует волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t) = a(\mathbf{r}, t)\, e^{i\beta(\mathbf{r}, t)}$, которая является решением уравнения Шредингера. Для этого воспользуемся теоремой из Приложения 2, полагая в выражении (П 2.3)

$$\psi_1 = \psi_2 = ae^{i\beta}.$$

Тогда, с учетом того, что $\nabla\psi_{1,2} = (\nabla a)\, e^{i\beta} + i\,(\nabla\beta)\, ae^{i\beta}$, получим

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_q ae^{i\beta}ae^{-i\beta}\,dq = i\,\frac{\hbar}{2m}\oint\limits_S \left\{ae^{-i\beta}\left[(\nabla a)\, e^{i\beta} + i\,(\nabla\beta)\, ae^{i\beta}\right] - \right.$$
$$\left. -ae^{i\beta}\left[(\nabla a)\, e^{-i\beta} - i\,(\nabla\beta)\, ae^{-i\beta}\right]\right\} d\mathbf{S}.$$

Проведя упрощение, получим

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_q a^2 dq = -\frac{\hbar}{m}\oint\limits_S (\nabla\beta)\, a^2 d\mathbf{S}.$$

Сравнивая это выражение с (2.2), видим, что оно будет совпадать с ним, если принять скорость движения квазиполя равной

$$\mathbf{V}(r, t) = \frac{\hbar}{m}\nabla\beta(r, t)\,. \tag{2.3}$$

Таким образом, можно в модели принять, что *квазиполе не может исчезать и появляться, а только перемещаться со скоростью, даваемой выражением* (2.3).

Если взять в качестве области интегрирования все пространство, охватываемое квазиполем, где $a \neq 0$, то интеграл правой части выражения (2.2) будет равен нулю, т.к. в этом случае на поверхности S $a = 0$.

Таким образом, полное количество квазиполя элементарной частицы всегда постоянно. Это количество будет равно вероятности того, что Т-частица находится где-то в квазиполе, а эта вероятность равна единице. Отсюда следует, что *полное «количество» квазиполя элементарной частицы всегда равно единице, т. е. интеграл* (2.1), *если его взять по всему полю, должен быть равен единице*:

$$\int\limits_Q a^2(\mathbf{r},t)\, dq = 1. \tag{2.4}$$

Здесь и далее индекс Q у интеграла означает, что интегрирование производится по всему пространству, где $a^2 \neq 0$.

2.3. Сравнивая выражения (2.3) и (1.8), видим, что *скорость движения Т-частицы равна скорости движения квазиполя в той точке, где находится Т-частица, т.е. она увлекается квазиполем и движется вместе с ним.*

Поскольку скорости квазиполя и Т-частицы равны, то должны быть равны и их ускорения. Поэтому элемент поля, двигаясь по некоторой траектории, будет иметь ускорение, в соответствии с (1.13) равное

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = \frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla\,\frac{\nabla^2 a}{a} - \frac{1}{m}\nabla U_0. \tag{2.5}$$

Второе слагаемое правой части этого уравнения определяется внешними силами, первое — силами самого поля. Оно зависит от плотности поля и его производных в точке нахождения частицы — от параметра $\dfrac{\nabla^2 a}{a}$, который у нас далее будет часто встречаться. Поэтому рассмотрим его подробнее.

2.4. Поместим начало координат в интересующую нас точку. Представим a рядом Тейлора, ограничив область рассмотрения так, чтобы было достаточно квадратичных членов. Будем иметь

$$a\,(x,\,y,\,z) = \frac{1}{2}\,\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}x^2 + \frac{1}{2}\,\frac{\partial^2 a}{\partial y^2}y^2 + \frac{1}{2}\,\frac{\partial^2 a}{\partial z^2}z^2 + \frac{\partial^2 a}{\partial x\partial y}xy + \frac{\partial^2 a}{\partial y\partial z}yz + \\ + \frac{\partial^2 a}{\partial z\partial x}zx + \frac{\partial a}{\partial x}x + \frac{\partial a}{\partial y}y + \frac{\partial a}{\partial z}z + a,$$

где производные и функция a берутся в точке (0,0,0). Найдем среднее значение a на расстоянии δ от точки (0,0,0), подразумевая под этим величину

$$\langle a_\delta\rangle = \frac{1}{6}\,[a\,(\delta,\,0,\,0) + a\,(-\delta,\,0,\,0) + a\,(0,\,\delta,\,0) + a\,(0,\,-\,\delta,\,0) + \\ + a\,(0,\,0,\,\delta) + a\,(0,\,0,\,-\,\delta)]\,.$$

Имеем

$$a\,(\delta,\,0,\,0) + a\,(-\delta,\,0,\,0) = \\ = \frac{1}{2}\,\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}\delta^2 + \frac{\partial a}{\partial x}\delta + a + \frac{1}{2}\,\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}\delta^2 - \frac{\partial a}{\partial x}\delta + a = \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}\delta^2 + 2a.$$

Аналогично и для $a\,(0,\,\delta,\,0) + a\,(0,\,-\,\delta,\,0)$ и $a\,(0,\,0,\,\delta) + a\,(0,\,0,\,-\,\delta)$. Подставив эти выражения в $\langle a_\delta\rangle$, получим

$$\langle a_\delta\rangle = \frac{1}{6}\left(\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial z^2}\right)\delta^2 + a = \frac{1}{6}\,\delta^2\nabla^2 a + a.$$

Откуда

$$\frac{\nabla^2 a}{a} = 6\,\frac{\langle a_\delta\rangle - a}{a\delta^2}. \tag{2.6}$$

Таким образом, величина (2.6) показывает, насколько поле в центре меньше, чем в ближайшем окружении. Эту величину будем называть **разреженностью** квазиполя.

Отметим, что разреженность не зависит от интенсивности поля. Она также не зависит от поворота осей координат, т.к. $\nabla^2 a$, как известно, от него не зависит.

В (2.5) первое слагаемое в выражении для ускорения квазиполя и Т-частицы направлены по градиенту разреженности квазиполя в направлении большей разреженности и пропорциональны этому градиенту. Поэтому квазиполе будет стремиться двигаться так, чтобы разреженность уменьшить и сделать ее равномерно распределенной по пространству.

Поскольку скорости движения элементов квазиполя определяются в соответствии с (1.8) градиентом от скаляра β, то $\mathrm{rot}\mathbf{V} = 0$, т. е. квазиполе не должно иметь вихрей.

2.5. Как уже говорилось, состояние элементарной частицы полностью определяется ее волновой функцией (1.1). Она также полностью определяет и параметры квазиполя: его плотность a^2 и скорость движения $\mathbf{V} = \dfrac{\hbar}{m}\nabla\beta$. Но обратно, зная только плотность и скорость движения квазиполя, нельзя полностью определить волновую функцию. Действительно, при этом мы будем знать только модуль волновой функции и градиент ее аргумента в соответствии с (1.8), т. е. производные аргумента по координатам. При этом можно к аргументу добавить еще произвольную функцию времени, не зависящую от координат, при этом градиент не изменится.

Чтобы найти β, надо еще знать производную $\dfrac{\partial\beta}{\partial t}$. Ее можно найти из уравнения (1.7) , зная U, поскольку волновая функция должна удовлетворять уравнению Шредингера. Тогда получим

$$\beta(\mathbf{r}, t) = \beta(\mathbf{r}_0, t_0) + \int\limits_{t_0}^{t} \frac{\partial\beta(\mathbf{r}_0, t)}{\partial t} dt + \int\limits_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \nabla\beta(\mathbf{r}, t)\, d\mathbf{r}. \qquad (2.7)$$

Таким образом, квазиполе совместно с U определяют волновую функцию с точностью до постоянной $\beta(\mathbf{r}_0, t_0)$, которая на состоянии квантона не сказывается.

Так же как не всякая комплексная функция может быть волновой — она должна удовлетворять уравнению Шредингера, так и не всякое поле $a^2(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$ могут представлять квазиполе — они должны соответствовать некоторой волновой функции.

2.6. Если в уравнение Шредингера (1.3) подставить волновую функцию $\psi(\mathbf{r}, t) = a(\mathbf{r}, t)\, e^{i\beta(\mathbf{r}, t)}$ и учесть соотношение для скорости квазиполя (2.3), то выражения для мнимой (1.6) и действительной (1.7) частей уравнения Шредингера приобретают простой физический смысл. Действительно, с учетом (2.3) соотношение (1.6) перехо-

дит в
$$\frac{\partial a^2}{\partial t} = -\nabla(a^2\mathbf{V}), \tag{2.8}$$
а соотношение (1.7), если взять градиент от обеих его частей, переходит в
$$-m\,\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\frac{\nabla^2 a}{a} + \frac{m}{2}\nabla V^2 + \nabla U. \tag{2.9}$$

Уравнение (2.8) равносильно уравнению (2.2) и говорит о том, что квазиполе не может возникать и исчезать, а только перемещаться. Уравнение (2.9), с учетом (2.3) и (1.10), будет эквивалентно уравнению (2.5), т. е. тому положению, что ускорение элементов квазиполя равно сумме сил — внешней и силе самого квазиполя, деленной на массу частицы. Таким образом, уранение Шредингера для квазиполя соответствует уравнению газодинамики, с той разницей, что сила, с которой квазиполе действует на самого себя и которую мы обозначили $\mathbf{F}_q$, в корне отличается от аналогичной силы в газодинамике.

Глава 3

Частица в свободном пространстве

3.1. Вначале рассмотрим простейший случай. Пусть в некоторой ограниченной области пространства волновая функция имеет следующий вид:
$$\psi = ae^{i(ct+\mathbf{br})},$$
где a, b и $\mathbf{c}$ — постоянные. Определим, каким условиям должны удовлетворять эти постоянные, чтобы волновая функция ψ удовлетворяла уравнению Шредингера, и какому физическому процессу она соответствует. Для этого подставим ψ в (1.3), считая $U = 0$. Получим $-\hbar c\psi = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\,b^2\psi$, откуда должно быть $c = -\dfrac{\hbar}{2m}\,b^2$. В соответствии с (1.8), скорость движения Т-частицы и элементов квазиполя в этой области будет $\mathbf{V} = \dfrac{\hbar}{m}\,\nabla\beta = \dfrac{\hbar}{m}\,\mathbf{b}$, поэтому $b = \dfrac{m}{\hbar}\,\mathbf{V}$. Таким образом,
$$\psi = ae^{-i\,\frac{m}{2\hbar}(V^2t-\mathbf{V}r)} = ae^{-i\left(\frac{E}{\hbar}t-\frac{m}{\hbar}\mathbf{V}\mathbf{r}\right)}, \tag{3.1a}$$
где $E = mV^2/2$ — кинетическая энергия частицы.

Волновая функция (3.1а) соответствует участку квазиполя, движущемуся с постоянной скоростью $\mathbf{V}$ и постоянной плотностью a^2.

3.2. Рассмотрим далее более сложный случай, когда на частицу также не действуют никакие внешние силы, т. е. $U = 0$. В качестве примера возьмем частицу с волновой функцией
$$\psi\,(\mathbf{r},\,t) = \frac{1}{\pi^{3/4}r_0^{3/2}\,(1+i\tau)^{3/2}}\exp\left[-\frac{r^2}{2\,(1+i\tau)\,r_0^2}\right] = ae^{i\beta}, \tag{3.1}$$

где r_0 — некоторый параметр размерности длины, $\tau = \dfrac{\hbar}{mr_0^2}\,t$ — приведенное время.

Как можно убедиться, подставляя (3.1) в (1.3), эта волновая функция удовлетворяет уравнению Шредингера и условию нормировки (2.4).

Из (3.1) следует, что плотность вероятности квазиполя будет

$$a^2 = \psi^*\psi = \frac{1}{\pi^{3/2} r_0^3 \left(1+\tau^2\right)^{3/2}} \exp\left[-\frac{r^2}{\left(1+\tau^2\right) r_0^2}\right] = \frac{1}{\pi^{3/2} R^3} \exp\left(-\frac{r^2}{R^2}\right), \tag{3.2}$$

где $R = r_0\sqrt{(1+\tau^2)}$.

Аргумент волновой функции

$$\beta = -\frac{3}{2}\operatorname{arctg}\tau + \frac{\tau}{1+\tau^2}\,\frac{r^2}{2r_0^2}. \tag{3.3}$$

Таким образом, квазиполе имеет в данном случае максимальную плотность в начале координат. Эта плотность убывает одинаково во все стороны, сначала медленно, а затем быстро по мере роста r. Зависимость a^2 от r в обобщенной форме приведена на рис. 3.1. При изменении τ форма квазиполя не меняется, оно только расплывается и уменьшается в соответствии с условием, выведенным выше.

3.3. Определим вероятность P_b того, что Т-частица будет находиться в сфере радиуса r_b с центром в начале координат. Эта вероятность, согласно (1.2), будет

$$P_b = \int\limits_0^{r_b} a^2 dq = \int\limits_0^{r_b} a^2 4\pi r^2\,dr = \frac{4}{\pi^{1/2}} \int\limits_0^{r_b} \frac{\exp\left(-r^2/R^2\right) r^2}{R^3}\,dr =$$

$$= \frac{4}{\pi^{1/2}} \int\limits_0^{u} \rho^2 e^{-\rho^2} d\rho = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\int\limits_0^{u} e^{-\rho^2} d\rho - u e^{-u^2}\right), \tag{3.4}$$

где $\rho = r/R$, $u = r_b/R$.

Интеграл в выражении (3.4) не берется, его значения приведены в справочниках. Зависимость P_b от u приведена на рис. 3.2 и дается в табл. 3.1.

Таблица 3.1

u	P_b
1	0,475
2	0,954
3	0,99943
4	0,9999993

Назовем R **условным радиусом** квазиполя. В соответствии с табл. 3.1 в сфере с радиусом $r_b = R$ и центром в начале координат вероятность нахождения Т-частицы будет равна 0,475. В сфере с $r_b = 2R$ — 0,954 и т. д. При $\tau = 0$ условный радиус $R = r_0$, при $\tau \gg 1$ будем иметь $R \cong r_0\tau$.

3.4. Рассмотрим траекторию движения Т-частицы. Скорость Т-частицы определяется выражением (1.8). Учитывая (3.3) и принимая во внимание, что $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$, будем иметь

$$\frac{\partial\beta}{\partial x} = \frac{\tau}{1+\tau^2}\,\frac{2x}{2r_0^2}.$$

Аналогичные выражения будут и для $\dfrac{\partial\beta}{\partial y}$ и $\dfrac{\partial\beta}{\partial z}$. Поэтому

$$\nabla\beta = \frac{\tau}{1+\tau^2}\,\frac{\mathbf{r}}{r_0^2}.$$

Скорость движения Т-частицы, если она будет находиться в точке $\mathbf{r}$ в момент τ, будет, согласно (1.8),

$$\mathbf{V}_p = \frac{\hbar}{m}\,\frac{\tau}{1+\tau^2}\,\frac{\mathbf{r}}{r_0^2}. \tag{3.5}$$

Таким образом, скорость будет направлена по радиус-вектору и будет тем больше, чем дальше от центра находится Т-частица.

Вначале, при $\tau = 0$, скорость будет равна нулю, затем, при постоянном значении r, она будет увеличиваться с ростом τ и достигнет максимума при $\tau = 1$, после чего будет уменьшаться, стремясь к нулю.

3.5. Найдем траекторию движения Т-частицы. Имеем

$$V_p = \frac{dr}{dt} = \frac{\hbar}{m}\,\frac{\tau}{1+\tau^2}\,\frac{r}{r_0^2}.$$

Разделяя переменные и учитывая, что, согласно (3.1), $dt = \dfrac{mr_0^2}{\hbar}\,d\tau$, получаем

$$\frac{dr}{r} = \frac{\hbar}{m}\,\frac{\tau}{1+\tau^2}\,\frac{1}{r_0^2}\,\frac{mr_0^2}{\hbar}\,d\tau = \frac{\tau}{1+\tau^2}\,d\tau.$$

Интегрируя левую и правую части этого выражения, получим $\ln r = \dfrac{1}{2}\ln\left(1+\tau^2\right) + C$, где C — постоянная интегрирования, или $r = e^C\sqrt{1+\tau^2}$. При $\tau = 0$ $r = e^C$. Обозначим это значение через r_{00}. Тогда

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_{00}\sqrt{1+\tau^2}\,. \tag{3.6}$$

Таким образом, Т-частица из начального положения $\mathbf{r}_{00}$ движется по радиус-вектору в сторону от начала координат. Зависимость скорости от времени получим, подставив (3.6) в (3.5). Она будет

$$\mathbf{V}_p = \frac{\hbar}{m}\,\frac{\tau}{\sqrt{1+\tau^2}}\,\frac{\mathbf{r}_{00}}{r_0^2}. \tag{3.7}$$

При отрицательном времени r будет уменьшаться с ростом τ, и Т-частица будет приближаться к началу координат, затем она остановится при $\tau = 0$ и далее, сменив направление скорости, Т-частица будет удаляться по тому же пути от центра.

Если $r_{00} = r_0$, то Т-частица будет находиться, в соответствии с (3.2) и (3.6), на сфере с условным радиусом квазиполя и все время оставаться на ней. Если $r_{00} < r_0$, то Т-частица все время будет находиться внутри этой сферы и наоборот.

В отличие от стандартной квантовой механики, мы получили траекторию движения. Действительно, задав одну из точек траектории, например, положение Т-частицы в момент $t = 0$, мы получим и всю траекторию. Поскольку, в соответствии с выражением (1.2), положение частицы мы знаем вероятностно, то траекторию мы также будем знать вероятностно. Знание траектории, хотя и вероятностное, повышает наглядность.

3.6. Рассмотренные выше движения квазиполя и Т-частицы вызываются только силами квазиполя, поскольку внешние силы, по условию, отсутствуют. Силы квазиполя определяются выражением (1.15) и зависят только от a. Найдем их. Величину a можно, на основании (3.2), представить так:

$$a = B \exp\Big(-\frac{r^2}{2R^2}\Big),$$

где B — некоторый коэффициент, не зависящий от r. Далее

$$\frac{\partial a}{\partial x} = B\Big(-\frac{2x}{2R^2}\Big)\exp\Big(-\frac{r^2}{2R^2}\Big) = -B\,\frac{x}{R^2}\,\exp\Big(-\frac{r^2}{2R^2}\Big),$$

$$\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} = B\Big(-\frac{1}{R^2} + \frac{x^2}{R^4}\Big)\exp\Big(-\frac{r^2}{2R^2}\Big).$$

Аналогичные выражения получим и для $\dfrac{\partial a}{\partial y}$, $\dfrac{\partial^2 a}{\partial y^2}$, $\dfrac{\partial a}{\partial z}$, $\dfrac{\partial^2 a}{\partial z^2}$. Поэтому

$$\nabla^2 a = \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial z^2} = B\Big(-\frac{3}{R^2} + \frac{r^2}{R^4}\Big)\exp\Big(-\frac{r^2}{2R^2}\Big)$$

и

$$\frac{\nabla^2 a}{a} = -\frac{3}{R^2} + \frac{r^2}{R^4}. \tag{3.8}$$

Таким образом, разряженность квазиполя будет увеличиваться по мере удаления от начала. Найдем градиент разряженности

$$\frac{\partial}{\partial x}\,\frac{\nabla^2 a}{a} = \frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{3}{R^2} + \frac{r^2}{R^4}\right) = \frac{2x}{R^4}. \tag{3.9}$$

Аналогичные производные будем иметь и по другим осям. Поэтому

$$\nabla\,\frac{\nabla^2 a}{a} = \frac{2\mathbf{r}}{R^4},$$

и сила, действующая на Т-частицу, в соответствии с (1.15) будет

$$\mathbf{F}_q = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\mathbf{r}}{R^4} = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\mathbf{r}}{r_0^4\left(1+\tau^2\right)^2}. \tag{3.10}$$

Как видно, эта сила направлена по $\mathbf{r}$, растет с увеличением $\mathbf{r}$ и обратно пропорциональна четвертой степени условного радиуса квазиполя R. При $\tau = 0$ сила максимальна, Т-частица получает наибольшее ускорение и начинает двигаться по направлению радиус-вектора. Затем, с ростом τ, сила быстро уменьшается, а Т-частица продолжает двигаться по инерции со скоростью, даваемой выражением (3.7).

3.7. В качестве численного примера возьмем электрон, являющийся типично малой частицей с массой $m = 9{,}1\cdot 10^{-31}$ кг. Пусть электрон находится в свободном пространстве без внешних полей и имеет волновую функцию (3.1). Пусть при $\tau = 0$ он находится в точке $\mathbf{r}_{00} = \mathbf{r}_0$ и $r_0 = 5\cdot 10^{-11}$ м, т. е. r_0 равен, примерно, радиусу атома. Тогда под действием сил квазиполя электрон, в соответствии с (3.6), в момент t будет находиться в точке

$$r = r_{00}\sqrt{1+\tau^2} = r_0\sqrt{1+\left(\frac{\hbar}{mr_0^2}\,t\right)^2} = \\ = 5\cdot 10^{-11}\sqrt{1+\left(4{,}6\cdot 10^{16}t\right)^2} \approx 2{,}3\cdot 10^6\,t, \text{ м.}$$

Тут было принято $\hbar = 1{,}05\cdot 10^{-34}$ Дж $\cdot$ с.

Условный радиус квазиполя R будет меняться согласно (3.2). Через одну микросекунду Т-частица окажется на расстоянии 2,3 м от центра. Этой же величине будет равняться условный радиус квазиполя.

Скорость движения электрона задается выражением (3.7) и будет при $t \gg \frac{1}{4{,}6\cdot 10^{16}}$ равна $V = \frac{\hbar}{mr_0^2} = 2{,}3\cdot 10^6$ м/с.

Обычно о скорости электрона судят по его кинетической энергии, выраженной в электронвольтах. Полученная скорость соответствует приблизительно 15 эВ.

3.8. Поскольку у нас нет внешних сил, то движение электрона будет вызываться только силой квазиполя, определяемой выражением (3.10). При $r = R = 5\cdot 10^{-11}$ м на электрон действует сила квазиполя, равная $F_q = \frac{\hbar^2 r}{mR^4} = 9{,}7\cdot 10^{-8}$ Н.

Силы, действующие на электрон, привычней выражать через напряженность электрического поля, вызывающего эти силы. Полученная сила квазиполя соответствует напряженности электрического поля $E = \frac{F_q}{q_e} = 6,\,1\cdot 10^{11}$ В/м, где $q_e = 1{,}602\cdot 10^{-19}$ Кл — заряд электрона. Для сравнения, напряженность электрического поля E на расстоянии $5\cdot 10^{-11}$ м от ядра атома водорода составляет $E = 5{,}8\cdot 10^{11}$ В/м, т. е. того же порядка, что и приведенная выше напряженность электрического поля, соответствующая силе квазиполя.

3.9. Через некоторое время расстояние электрона от начала координат увеличится, во столько же раз увеличится и условный радиус квазиполя R. Рассмотрим момент времени, когда они увеличатся в 10^5 раз, т. е. станут равными 5 микронам. Это произойдет через $\dfrac{5\cdot 10^{-6}}{2,3\cdot 10^{6}} = 2{,}2\times$ $\times\, 10^{-12}$ с. При этом сила квазиполя уменьшится в 10^{15} раз и будет соответствовать электрическому полю $6{,}1\cdot 10^{-4}$ В/м. Это поле много меньше, чем поля, с которыми мы имеем дело в наших приборах, и с ним можно не считаться. В случае, когда электрон окажется существенно за пределами сферы с условным радиусом квазиполя, сила может быть много больше, но нахождение там электрона маловероятно. Таким образом, в дальнейшем, когда условный радиус квазиполя станет равным нескольким микронам, с квазиполем можно будет не считаться.

3.10. В развитие сказанного рассмотрим еще случай, когда волновая функция в движущейся системе координат имеет форму (3.1), и эта система координат движется относительно неподвижной системы с постоянной скоростью $\mathbf{V}_0$. Тогда в неподвижной системе движение волновой функции будет соответствовать рис. 3.1. На этом рисунке показана последовательность условных сфер для моментов $\tau = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, \ldots$ Эта сфера сначала стягивается равномерно. Потом под действием сил квазиполя скорость стягивания замедляется. При $\tau = 0$ радиус условной сферы становится равным r_0 и стягивание прекращается. С ростом τ сфера начинает расширяться, сначала медленно, а потом быстрее и, наконец, равномерно. Одновременно сфера смещается вправо с постоянной скоростью $\mathbf{V}_0$.

Волновая функция в неподвижной системе, согласно приложению 3, будет удовлетворять уравнению Шредингера с $U_2 = 0$ в соответствии с формулой (П3.27), поскольку в данном случае $U_1 = 0$ и $\dfrac{\partial^2\mathbf{S}}{\partial t^2} = 0$, следовательно, она будет соответствовать частице, находящейся в свободном пространстве без внешних сил.

При повторении опыта волновая функция будет повторять описанную картину. Т-частица будет появляться каждый раз в новом месте с вероятностью, даваемой выражением (1.2). Буквами $a_{-4}, a_{-3}, a_{-1}, a_0, a_1, a_2, \ldots$ и $b_{-4}, b_{-3}, b_{-2}, b_{-1}, b_0, b_1, b_2, \ldots$ на рис. 3.1 показаны две возможные траектории Т-частицы.

Рассмотренный случай соответствует случаю фокусировки в электронном микроскопе, когда Т-частицы фокусируются в сфере, отмеченной $\tau = 0$.

По механике Ньютона траектории частиц при фокусировке должны были бы пройти через одну точку. По модельной квантовой механике это не так из-за расталкивающего действия сил квазиполя. Область фокусировки, размер которой определяется радиусом r_0 условной сферы при $\tau = 0$, может быть достаточно малой в том случае, если радиальные скорости элементов квазиполя в подвижной системе координат достаточно велики. Согласно формуле (3.5), при $-\tau \ll -1$ они должны быть

$$V = \frac{\hbar}{m}\,\frac{\tau}{1+\tau^2}\,\frac{R}{r_0^2} = \frac{\hbar}{m}\,\frac{\tau}{1+\tau^2}\,\frac{r_0\sqrt{1+\tau^2}}{r_0^2} \to \frac{\hbar}{mr_0}, \tag{3.10a}$$

при $\tau \to -\infty$.

3.11. Рассмотрим случай, когда поверхности одинаковой плотности квазиполя a^2 являются эллипсоидами. Сначала докажем теорему.

Теорема. *Если* $\psi\,(x, y, z, t) = \psi_x\,(x, t)\,\psi_y\,(y, t)\,\psi_z\,(z, t)$ и $\psi_x\,(x, t)$, $\psi_y\,(y, t)$, $\psi_z\,(z, t)$ *удовлетворяют одномерным уравнениям Шредингера*

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{\partial\psi_x}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\psi_x}{\partial x^2} + \psi_x U_x\,(x, t)\,, \\ i\hbar\,\frac{\partial\psi_y}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\psi_y}{\partial y^2} + \psi_y U_y\,(y, t)\,, \\ i\hbar\,\frac{\partial\psi_z}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\psi_z}{\partial z^2} + \psi_z U_z\,(z, t)\,, \end{aligned} \tag{3.11}$$

то $\psi\,(x, y, z, t)$ *будет удовлетворять уравнению Шредингера*

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \psi\,(U_x + U_y + U_Z)\,. \tag{3.12}$$

Доказательство теоремы.

Действительно,

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial\psi_x}{\partial t}\,\frac{\psi}{\psi_x} + \frac{\partial\psi_y}{\partial t}\,\frac{\psi}{\psi_y} + \frac{\partial\psi_z}{\partial t}\,\frac{\psi}{\psi_z},$$

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2\psi_x}{\partial x^2}\,\frac{\psi}{\psi_x} + \frac{\partial^2\psi_y}{\partial y^2}\,\frac{\psi}{\psi_y} + \frac{\partial^2\psi_z}{\partial z^2}\,\frac{\psi}{\psi_z}.$$

Подставляя эти значения в (1.3) и деля эти уравнения на ψ, получим

$$i\hbar\left(\frac{\partial\psi_x}{\partial t}\,\frac{1}{\psi_x} + \frac{\partial\psi_y}{\partial t}\,\frac{1}{\psi_y} + \frac{\partial\psi_z}{\partial t}\,\frac{1}{\psi_z}\right) = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi_x}{\partial x^2}\,\frac{1}{\psi_x} + \frac{\partial^2\psi_y}{\partial y^2}\,\frac{1}{\psi_y} + \frac{\partial^2\psi_z}{\partial z^2}\,\frac{1}{\psi_z}\right) + U_x + U_y + U_z.$$

Это уравнение распадается на три уравнения, содержащие переменные (x, t), (y, t) и (z, t). Умножая их на ψ_x, ψ_y, ψ_z соответственно, получим уравнения (3.11), которые по условию теоремы должны удовлетворяться. Поэтому уравнение (3.12) тоже должно удовлетворяться, что доказывает теорему.

3.12. Возьмем теперь

$$\psi_x = \frac{B}{\sqrt{1+i\tau_x}}\exp\left[-\frac{x^2}{2\,(1+i\tau_x)}\right] = a_x e^{i\beta_x},$$

где B — некоторая постоянная, $\tau_x = \dfrac{\hbar t}{m x_0^2}$,

$$a_x^2 = \frac{B^2}{\sqrt{1+\tau_x^2}} \exp\left[-\frac{x^2}{x_0^2(1+\tau_x^2)}\right], \quad \beta_x = -\operatorname{arctg}\tau_x + \frac{x^2\tau_x}{2x_0^2\left(1+\tau_x^2\right)}.$$

Аналогичные выражения возьмем для ψ_y и ψ_z.

Нетрудно показать, что эти функции будут удовлетворять уравнениям (3.11) при условии $U_x = U_y = U_z = 0$.

Таким образом, волновая функция $\psi = \psi_x\psi_y\psi_z = ae^{i\beta}$, где $a = a_x a_y a_z$ и $\beta = \beta_x + \beta_y + \beta_z$, будет удовлетворять уравнению Шредингера. Величина B может быть найдена из условия (2.4). После интегрирования получим $B^3 = \dfrac{1}{\pi^{3/4}\sqrt{x_0 y_0 z_0}}$. Откуда

$$a^2 = a_x^2 a_y^2 a_z^2 = \frac{1}{\pi^{3/2} b_x b_y b_z} \exp\left[-\left(\frac{x^2}{b_x^2} + \frac{y^2}{b_y^2} + \frac{z^2}{b_z^2}\right)\right], \tag{3.13}$$

где $b_x = x_0\sqrt{1+\tau_x^2}$, $b_y = y_0\sqrt{1+\tau_y^2}$, $b_z = z_0\sqrt{1+\tau_z^2}$.

В выражении (3.13) показатель экспоненты будет зависеть только от x, y, z. Если координаты будут меняться так, что этот показатель остается постоянным, значение a^2 меняться не будет. Таким образом, поверхности равной плотности квазиполя будут эллипсоиды, определяемые уравнениями

$$\frac{x^2}{b_x^2} + \frac{y^2}{b_y^2} + \frac{z^2}{b_z^2} = u^2$$

и

$$\frac{x^2}{u^2 b_x^2} + \frac{y^2}{u^2 b_y^2} + \frac{z^2}{u^2 b_z^2} = 1.$$

Полуоси эллипсоидов будут ub_x, ub_y, ub_z.

Как можно доказать, ранее выведенная формула (3.4) будет давать вероятность того, что Т-частица будет находиться в эллипсоиде с данным u. Эта вероятность будет определяться табл. 3.1. При $t = 0$ полуоси будут ux_0, uy_0, uz_0. При большом t полуоси будут $\dfrac{\hbar}{m}\dfrac{u}{x_0}t$, $\dfrac{\hbar}{m}\dfrac{u}{y_0}t$, $\dfrac{\hbar}{m}\dfrac{u}{z_0}t$.

Таким образом, если при $t = 0$ эллипсоид был сплющен по оси x, то при больших t он будет растянут по этой оси. И наоборот. Это объясняется тем, что в первом случае сила квазиполя вдоль оси x будет больше, чем по другим осям, и поэтому составляющие скорости движения квазиполя тоже будут больше. Во втором случае — наоборот.

3.13. И, наконец, рассмотрим еще один случай, когда начальное значение волновой функции равно

$$\psi_\Sigma(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=1}^{N} c_k \psi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}_k, t + \delta t_k), \tag{3.14}$$

где c_k — комплексные постоянные, $\delta\mathbf{r}_k$ и δt_k — малые величины, соизмеримые с r_0 и $\dfrac{mr_0^2}{\hbar}$, ψ дается выражением (3.1).

Таким образом, слагаемыми выражения (3.14) являются рассмотренные ранее функции (3.1), умноженные на постоянные величины и сдвинутые в пространстве и времени. Ясно, что этим выражением можно представить очень разнообразные функции. Поскольку уравнение Шредингера линейно и слагаемые суммы (3.14) ему удовлетворяют, эта сумма также ему будет удовлетворять.

При достаточно большом t, когда слагаемые суммы станут достаточно расплывчатыми, можно приближенно принять $\psi(\mathbf{r}+\delta\mathbf{r}_k, t+\delta t_k) \cong \psi(\mathbf{r}, t)$ и тогда будем иметь $\psi_\Sigma(\mathbf{r}, t) \cong \left(\sum\limits_{k=1}^{N} c_k\right)\psi(\mathbf{r}, t)$, т. е. волновая функция (3.14) становится функцией уже рассмотренного типа (3.1).

Глава 3

Прохождение сквозь отверстия. Интерференция

4.1. Рассмотрим прохождение частицы через отверстие в экране. Пусть к экрану Э (рис 4.1), слева направо с постоянной скоростью $\mathbf{V}$ движется квазиполе. Пусть внешние силы отсутствуют. На рисунке показана условная граница квазиполя. Будем считать, что размеры первоначального квазиполя Ψ_1 таковы, что силами квазиполя можно пренебречь. Таким образом, можно считать, что все элементы квазиполя и Т-частица будут двигаться по направлению оси Y со скоростью $\mathbf{V}$. При подходе к экрану квазиполе и волновую функцию Ψ_1 можно разделить на две составляющих — цилиндрическую часть ψ_3, которая пройдет сквозь отверстие в экране, и часть ψ_2, которая встретится с экраном. При этом элементы квазиполя ψ_2 под действием сил атомов экрана получат различные ускорения и частично останутся в экране, а частично вылетят обратно, отразившись в левую часть пространства. То же произойдет и с Т-частицей, если она в данной реализации оказалась в области ψ_2.

Элементы квазиполя ψ_3 пройдут сквозь отверстие и выйдут в правую часть в виде цилиндра. Внутри него первое время ничего не изменится, и элементы поля будут продолжать двигаться со скоростью $\mathbf{V}$. Но на боковых поверхностях цилиндра появится неоднородность (разреженность) квазиполя $\nabla^2 a/a$, градиент которой будет направлен перпендикулярно поверхности, что в соответствии с (1.15) создаст силы кавзиполя в этом направлении. В результате этого боковые границы ψ_3 будут размываться, и ψ_3 будет расплываться в плоскостях Y, Z. Очень грубо можно представить, что ψ_3 получит форму вытянутого вдоль оси X эллипсоида. В соответствии с гл. 3, он должен со временем расширяться вдоль осей Y, Z быстрее, чем вдоль оси X и через некоторое время будет выглядеть как эллипсоид, сплюснутый вдоль оси X.

Вероятность того, что при данной реализации Т-частица окажется в области ψ_3 будет $p_3 = \int \psi_3 \psi_3^* dq$, где интеграл берется по всему пространству. Как было показано в гл. 2, этот интеграл не будет меняться со временем.

Если мы ограничимся лишь теми реализациями, в которых Т-частица прошла через отверстие, то можно рассматривать только ψ_3, и вероятность нахождения Т-частицы в этой области будет равна 1.

Можно ввести новую волновую функцию $\psi_3' = \dfrac{1}{\sqrt{p_3}}\,\psi_3$. Она будет нормирована, то есть $\int \psi_3' \psi_3'^* dq = 1$, если взять интеграл по всему пространству. Если ограничиться реализациями, в которых Т-частица прошла через отверстие, то можно не обращать внимание на ψ_1 и ψ_2 и учитывать только ψ_3'. Из-за того что волновая функция умножилась на постоянный коэффициент, физическая картина не меняется. Действительно, скорости элементов квазиполя и Т-частицы от этого не изменятся, так как они зависят только от β. Не изменятся также силы квазиполя (1.15), поскольку в них этот коэффициент сократится.

Аналогичный процесс произойдет при прохождении частицы через щель в экране. Только в этом случае, если щель идет вдоль оси Z, ψ_3 будет иметь вид короткого цилиндра с осью вдоль оси Y. После прохождения экрана силы квазиполя возникнут по градиенту $\nabla \dfrac{\nabla^2 a}{a}$, то есть по направлению оси Y, и цилиндр будет быстро расширяться вдоль этой оси. Тут, грубо, можно представить, что квазиполе вначале, после прохождения экрана, будет иметь вид эллипсоида, сплющенного вдоль оси Y, который потом превратится в эллипсоид, растянутый вдоль этой оси.

4.2. Рассмотрим случай, когда отдельные части квазиполя, сначала разделившись, затем снова накладываются друг на друга. Например, это будет, если в экране две близких параллельных щели (см. рис. 4.2).

В этом примере квазиполе ψ_1, пройдя через одну щель, через некоторое время наложится на квазиполе ψ_2, прошедшее через другую щель.

Сначала найдем в общем виде волновую функцию $\psi_1 + \psi_2$, которая будет определять процесс в зоне наложения этих функций.

Пусть $\psi_1 = a_1 e^{i\beta_1}$; $\psi_2 = a_2 e^{i\beta_2}$; $\psi_{12} = a_{12} e^{i\beta_{12}} = \psi_1 + \psi_2$.

Можно записать

$$\psi_{12} = a_1 \cos\beta_1 + i a_1 \sin\beta_1 + a_2 \cos\beta_2 + i a_2 \sin\beta_2 = \\ = a_{12} \cos\beta_{12} + i a_{12} \sin\beta_{12}.$$

Откуда

$$a_{12}^2 = (a_1\cos\beta_1 + a_2\cos\beta_2)^2 + (a_1\sin\beta_1 + a_2\sin\beta_2)^2 = \\ = a_1^2 + a_2^2 + 2a_1a_2\cos(\beta_1-\beta_2) \quad (4.1)$$

и

$$\beta_{12} = \operatorname{arctg}\,\frac{a_1\sin\beta_1 + a_2\sin\beta_2}{a_1\cos\beta_1 + a_2\cos\beta_2}. \quad (4.2)$$

Для уяснения картины рассмотрим участок пространства, на котором можно считать, что a_1 и a_2 меняются медленно, так что можно пренебречь силами квазиполя. Поскольку мы предполагаем, что внешних сил нет, то на этом участке элементы квазиполя будут двигаться с постоянными скоростями $\mathbf{V}_1$ и $\mathbf{V}_2$.

Волновая функция для такого случая записывается выражением (3.1a).

Таким образом, будем иметь

$$\beta_1 = -\frac{m}{\hbar}\left(V_1^2 t - \mathbf{V}_1\mathbf{r}\right), \quad \beta_2 = -\frac{m}{\hbar}\left(V_2^2 t - \mathbf{V}_2\mathbf{r}\right)$$

и

$$\beta_1 - \beta_2 = -\frac{m}{\hbar}\left[\left(V_1^2 - V_2^2\right)t - (\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2)\,\mathbf{r}\right].$$

В точках, где $\beta_1 - \beta_2 = 2\pi n$ и n — целое число, $a_{12}^2 = (a_1 + a_2)^2$ имеет максимальное значение, а в точках, где $\beta_1 - \beta_2 = \pi(2n+1)$, $a_{12}^2 = (a_1 - a_2)^2$ имеет минимальное значение. При $V_1^2 = V_2^2$ положения этих точек со временем меняться не будут. При перемещении конца $\mathbf{r}$ в плоскости, перпендикулярной $\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2$, значение a_{12}^2 меняться не будет. Таким образом, максимумы и минимумы a_{12}^2 будут располагаться в плоскостях, перпендикулярных $\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2$. Расстояние λ между плоскостями максимумов определяется из уравнения $\dfrac{m}{\hbar}\left|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right|\lambda = 2\pi$, откуда

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m\left|\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2\right|}. \quad (4.3)$$

В случае $V_1^2 \neq V_2^2$ плоскости минимумов и максимумов будут двигаться. Скорость этого движения $\mathbf{V}_M$ определяется из уравнения

$$(V_1^2 - V_2^2)dt - (\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2)\,d\mathbf{r} = 0,$$

или

$$\mathbf{V}_M = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{V_1^2 - V_2^2}{(\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2)^2}\,(\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2). \quad (4.4)$$

Правее экрана (рис. 4.2), там, где ψ_1 и ψ_2 перекрываются, элементы этих волновых функций будут иметь одинаковые составляющие скорости вдоль оси X и разные вдоль оси Y: $\mathbf{V}_{y1}$ для ψ_1 и $\mathbf{V}_{y2}$ для ψ_2. Таким образом, $\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2 = \mathbf{V}_{y1} - \mathbf{V}_{y2}$. Эта разность будет направлена вдоль оси Y. Вследствие этого образуются плоскости с максимальными и минимальными значениями a_{12}^2, которые будут перпендикулярны оси Y

и расположены друг от друга в соответствии с выражением (4.4). Будет происходить интерференция.

Таким образом, процесс, соответствующий рис. 4.2, будет происходить так: квазиполе частицы будет частично задерживаться экраном, а частично пройдет через щели в нем в виде составляющих ψ_1 и ψ_2. Там, где эти составляющие, расширившись, наложатся друг на друга, появится интерференция, и в квазиполе появятся сгущения в плоскостях, перпендикулярных оси Y. Т-частица, она одна, либо задержится экраном, либо пройдет через верхнюю щель, либо через нижнюю. Попав в область интерференции, она будет подвержена силам квазиполя, так как в этой области они существенны. В результате появятся плоскости, где вероятность пребывания частиц максимальна и где она минимальна. Поместив в эту область фотопластинку и повторив эксперимент много раз, мы на ней получим полосы более светлые и более темные. В случае, если одну из щелей закрыть, наложения полей не будет, интерференция не произойдет и фотопластинка будет засвечена более равномерно. Этим объясняется парадокс классической квантовой механики, где остается без объяснений, почему частица чувствует закрытие щели, через которую она не пролетает.

4.3. Выясним еще значения скорости элементов квазиполя в случае наложения двух волновых функций и рассмотрим примеры некоторых траекторий Т-частиц.

Найдем из (4.2)

$$\begin{aligned}\frac{\partial\beta_{12}}{\partial x} &= \frac{1}{1+\left(\dfrac{a_1\sin\beta_1+a_2\sin\beta_2}{a_1\cos\beta_1+a_2\cos\beta_2}\right)^2}\times\\ &\times\left[\left(\frac{\partial a_1}{\partial x}\sin\beta_1+a_1\cos\beta_1\,\frac{\partial\beta_1}{\partial x}+\frac{\partial a_2}{\partial x}\sin\beta_2+a_2\cos\beta_2\frac{\partial\beta_2}{\partial x}\right)\times\right.\\ &\qquad\times(a_1\cos\beta_1+a_2\cos\beta_2)-(a_1\sin\beta_1+a_2\sin\beta_2)\times\\ &\times\left.\left(\frac{\partial a_1}{\partial x}\cos\beta_1-a_1\sin\beta_1\,\frac{\partial\beta_1}{\partial x}+\frac{\partial a_2}{\partial x}\cos\beta_2-a_2\sin\beta_2\,\frac{\partial\beta_2}{\partial x}\right)\right]\times\\ &\qquad\times\frac{1}{(a_1\cos\beta_1+a_2\cos\beta_2)^2}=\left\{\frac{\partial a_1}{\partial x}a_2\sin(\beta_1-\beta_2)+\right.\\ &\qquad+\frac{\partial a_2}{\partial x}\,a_1\sin(\beta_2-\beta_1)+\frac{\partial\beta_1}{\partial x}\left[a_1^2+a_1a_2\cos(\beta_1-\beta_2)\right]+\\ &\qquad\qquad+\left.\frac{\partial\beta_2}{\partial x}\left[a_2^2+a_1a_2\cos(\beta_1-\beta_2)\right]\right\}\frac{1}{a_{12}^2}.\end{aligned}$$

Для $\dfrac{\partial\beta_{12}}{\partial y}$ и $\dfrac{\partial\beta_{12}}{\partial z}$ получим аналогичные выражения. Поэтому

$$\begin{aligned}\nabla\beta_{12} &= \frac{(a_2\nabla a_1-a_1\nabla a_2)\sin(\beta_1-\beta_2)}{a_{12}^2}+\\ &\qquad+\frac{\nabla\beta_1[a_1^2+a_1a_2\cos(\beta_1-\beta_2)]}{a_{12}^2}+\frac{\nabla\beta_2[a_2^2+a_1a_2\cos(\beta_1-\beta_2)]}{a_{12}^2}.\end{aligned}$$

Отсюда для скоростей элементов квазиполя и Т-частицы, соответствующих суммарной волновой функции, в соответствии с (1.8) получим выражение

$$\mathbf{V}_{12} = \frac{\hbar\,(a_2\nabla a_1 - a_1\nabla a_2)\sin(\beta_1-\beta_2)}{ma_{12}^2} + \\ + \mathbf{V}_1\,\frac{a_1^2 + a_1a_2\cos(\beta_1-\beta_2)}{a_{12}^2} + \mathbf{V}_2\,\frac{a_2^2 + a_1a_2\cos(\beta_1-\beta_2)}{a_{12}^2}, \quad (4.5)$$

где $\mathbf{V}_1$ — эти скорости в ψ_1 и $\mathbf{V}_2$ — в ψ_2.

Как видно, выражения получаются довольно сложные. В качестве простого примера возьмем случай, когда $a_1 = a_2 = a$. В этом случае $\mathbf{V}_{12} = \mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_2$. На рис. 4.3 представлен случай, когда ψ_1 и ψ_2 являются однородными потоками элементов квазиполя, идущими со скоростями $\mathbf{V}_1$ и $\mathbf{V}_2$, причем $V_1 = V_2$. Перейдя из области ψ_1 в область $\psi_1 + \psi_2$, элементы квазиполя будут двигаться со скоростью $\mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_2$, пока не войдут в область ψ_2, где станут двигаться со скоростью $\mathbf{V}_2$. Элементы квазиполя, идущие первоначально в области ψ_2, по аналогичным причинам затем перейдут в область ψ_1. Пути Т-частиц при различных реализациях показаны на рисунке, они будут следовать вместе с элементами квазиполя, в которых находятся.

На рис. 4.4 показан более сложный случай.

Следует отметить неточность рассмотренных рисунков. На них не показаны области на боковых границах потоков, где a будет меняться и действуют силы квазиполя, перпендикулярные границам, размывая их. Будем считать, что за время прохождения элементов квазиполя это размытие незначительно. Кроме того, в зонах ψ_1 и ψ_2 траектории потоков элементов квазиполя идут с равной плотностью, а в зоне $\psi_1 + \psi_2$ происходит интерференция и траектории должны собираться в интерференционные полосы. Поэтому на границе этих областей, в зоне их размытия, должен происходить излом траекторий, который на рисунках не показан.

Глава 5

Стационарные состояния

5.1. Состояние квантона, для которого $a(\mathbf{r})$, $\nabla\beta(\mathbf{r})$, $U(\mathbf{r})$ не зависят от времени, а только от $\mathbf{r}$, называют **стационарным.** Для этого состояния скорость движения элементов квазиполя и Т-частицы не зависит от времени, а зависит только от $\mathbf{r}$: $\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \dfrac{\hbar}{m}\nabla\beta$. Это состояние описывается более простыми выражениями и занимает важное место в квантовой механике.

Поскольку $\nabla\beta$ не должно зависеть от t, в этом случае можно положить $\beta(\mathbf{r}) = \beta'(\mathbf{r}) + \beta''(t)$ и считать $\beta''(0) = 0$. При этом будем иметь$\nabla \beta(\mathbf{r}) = \nabla \beta'(\mathbf{r})$. Таким образом, волновая функция для стационарного состояния будет

$$\psi(\mathbf{r}, t) = a(\mathbf{r}) e^{i[\beta'(\mathbf{r})+\beta''(t)]} = \psi'(r) e^{i\beta''(t)}, \tag{5.1}$$

$$\psi'(\mathbf{r}) = a(\mathbf{r}) e^{i\beta'(\mathbf{r})}. \tag{5.1a}$$

При стационарном состоянии a не зависит от t: $a = a(\mathbf{r})$. Подставляя $\psi(r, t)$ из (5.1) в уравнение Шредингера, получим

$$-\hbar \frac{\partial \beta''(t)}{\partial t} e^{i\beta''(t)} \psi'(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{i\beta''(t)} \nabla^2 \psi'(\mathbf{r}) + \psi'(\mathbf{r}) e^{i\beta''(t)} U(\mathbf{r}).$$

Сокращая на $\psi'(r) e^{i\beta''(t)}$, будем иметь

$$-\hbar \frac{\partial \beta''(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \psi'(\mathbf{r})}{\psi'(r)} + U(\mathbf{r}).$$

Правая часть этого выражения не зависит от времени, а левая часть от $\mathbf{r}$. Значит, должно быть $\dfrac{\partial \beta''(t)}{\partial t} = C$, где C — постоянная, не зависящая от времени и от $\mathbf{r}$. Таким образом, учитывая, что $\beta''(0) = 0$, будем иметь $\beta''(t) = Ct$, и вместо (5.1) можно записать

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{iCt} \psi'(\mathbf{r}) = e^{iCt} a(\mathbf{r}) e^{i\beta'(\mathbf{r})}. \tag{5.2}$$

Для стационарного состояния уравнение (1.7), которое является следствием уравнения Шредингера, должно удовлетворяться. Оно будет выглядеть так:

$$-\hbar C = \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{\nabla^2 a(\mathbf{r})}{a(\mathbf{r})} + (\nabla \beta'(\mathbf{r}))^2 \right] + U(\mathbf{r}),$$

или, принимая во внимание (1.8),

$$-\hbar C = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 a(\mathbf{r})}{a(\mathbf{r})} + \frac{mV^2(\mathbf{r})}{2} + U(\mathbf{r}) = E. \tag{5.3}$$

Здесь: $\dfrac{mV^2}{2}$ — кинетическая энергия Т-частицы, U — потенциальная энергия Т-частицы в поле внешних сил. Будем считать, что выражение $-\dfrac{\hbar^2}{2m} \dfrac{\nabla^2 a(\mathbf{r})}{a(\mathbf{r})}$ является потенциальной энергией Т-частицы в квазиполе. Это не будет противоречить, учитывая (1.15), положению классической механики о том, что градиент потенциальной энергии с обратным знаком является силой, и тому, что потенциальная энергия не должна зависеть от скорости.

Таким образом, в этом случае E будет равняться полной энергии квантона в стационарном состоянии. Она будет равна сумме потенциальной энергии внешнего поля, потенциальной энергии квазиполя и кинетической энергии Т-частицы. Полная энергия квантона в стационарном состоянии является постоянной величиной, не зависящей ни от $\mathbf{r}$, ни от t. Из (5.3) $C = -E/\hbar$, и для стационарного состояния мы имеем общее выражение

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi'(\mathbf{r}). \tag{5.4}$$

Итак, если волновая функция соответствует стационарному состоянию, то она может быть записана выражением (5.4), и наоборот — если волновая функция записана выражением (5.4), то она соответствует стационарному состоянию, поскольку тут и $a^2 = \psi'\psi'^*$ и $\nabla\beta = \nabla\beta'(\overline{r})$ от времени не зависят.

Функцию $\psi'(\mathbf{r})$ будем называть **укороченной волновой функцией.**

Как следует из (5.3), энергия Т-частицы в стационарном состоянии E не зависит от времени и места, где находится Т-частица. Таким образом, она одинакова для всех реализаций, соответствующих данной волновой функции.

Учитывая (5.4), уравнение Шредингера для укороченной волновой функции стационарного состояния, можно записать так:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi'(\mathbf{r}) = [U(\mathbf{r}) - E]\,\psi'(\mathbf{r}). \tag{5.5}$$

Отметим, что $\psi'(\mathbf{r})$, умноженная на постоянную величину, также будет решением уравнения (5.5). Поэтому, чтобы $\psi(\mathbf{r})$ была волновой функцией ее может быть понадобится умножить на постоянную величину, чтобы удовлетворялось условие нормировки (2.4).

В случае, когда укороченная волновая функция стационарного состояния (5.1) вещественна или ее аргумент не зависит от $\mathbf{r}$, очевидно, $\nabla\beta = 0$ и, значит, скорости элементов квазиполя и Т-частицы будут равны нулю. Такое состояние будем называть статическим стационарным состоянием. Случай, когда это не так, назовем **динамическим стационарным состоянием**.

В статическом стационарном состоянии скорость Т-частицы равна нулю. В этом случае сумма внешних сил, действующих на частицу, должна равняться действующей на нее силе квазиполя.

Отметим, что две волновые функции стационарных состояний, подчиняющиеся одному и тому же уравнению Шредингера, но имеющие разные энергии, всегда ортогональны между собой, т. е.

$$\int\limits_q e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}\psi_1'(\mathbf{r})\,e^{i\frac{E_2}{\hbar}t}\psi_2'^*(\mathbf{r})\,dq = e^{i\frac{E_2-E_1}{\hbar}}\int\limits_q \psi_1'(\mathbf{r})\psi_2'^*(\mathbf{r})\,dq = 0. \tag{5.5a}$$

Действительно, образуем функцию

$$\psi = e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}\psi_1'(\mathbf{r}) + e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}\psi_2'(\mathbf{r}).$$

Она будет подчиняться тому же уравнению Шредингера, поскольку ему подчиняются ее слагаемые. Поэтому, согласно приложению 2, величина

$$\int\limits_q \psi\psi * \, dq = 1 + e^{-i\,\frac{E_1 - E_2}{\hbar}t} \int\limits_q \psi_1'(\mathbf{r})\,\psi_2'^*\,dq + e^{i\,\frac{E_1 - E_2}{\hbar}t} \int\limits_q \psi_2'\psi_1'^*\,dq + 1$$

должна быть постоянной, но это может быть при $E_1 \neq E_2$ только в том случае, если $\int\limits_q \psi_1'\psi_2'^*\,dq = \int\limits_q \psi_1'^*\psi_2'\,dq = 0$, что доказывает (5.5а).

5.2. Рассмотрим ряд примеров стационарных состояний. Начнем со случая, когда в некоторой области пространства U является постоянной вещественной величиной и не зависит ни от t, ни от $\mathbf{r}$.

Пусть в этой области волновая функция зависит только от координаты x. Дифференциальное уравнение (5.5) для отыскания укороченной волновой функции будет

$$\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\psi'(x)}{\partial x^2} = (U - E)\,\psi'(x)\,. \tag{5.6}$$

Рассмотрим два случая. Случай A, когда $U - E < 0$, и случай B, когда $U - E > 0$.

В случае A, как известно, решение уравнения (5.6) будет

$$\psi'(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} = a_A e^{i\beta}, \tag{5.7}$$

где

$$A_1 = a_{1A} e^{i\beta_{1A}}, \quad A_2 = a_{2A} e^{i\beta_{2A}} \tag{5.7а}$$

— пока произвольные постоянные и

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\,(E - U_A)}\,. \tag{5.8}$$

Квадрат модуля ψ_A' будет

$$a_A^2 = \left[a_{A1}\cos(kx + \beta_{A1}) + a_{A2}\cos(kx - \beta_{A2})\right]^2 + \\ + \left[a_{A1}\sin(kx + \beta_{A1}) - a_{A2}\sin(kx - \beta_{A2})\right]^2,$$

или

$$a_A^2 = a_{A1}^2 + a_{A2}^2 + 2a_{A1}a_{A2}\cos(2kx + \beta_{A1} - \beta_{A2})\,. \tag{5.9}$$

Как видно, плотность квазиполя будет периодически меняться с изменением x и не зависеть от времени. Аргумент $\psi'(x)$ будет

$$\beta_A = \operatorname{arctg}\,\frac{a_{A1}\sin(kx + \beta_{A1}) - a_{A2}\sin(kx - \beta_{A2})}{a_{A1}\cos(kx + \beta_{A1}) + a_{A2}\cos(kx - \beta_{A2})}. \tag{5.10}$$

Зная β_A, найдем скорости движения элементов квазиполя $\mathbf{V}$ с помощью (1.8). Поскольку у нас β_A зависит только от координаты x, отличной от нуля будет только составляющая скорости вдоль оси x. Она будет, исходя из (5.10),

$$V_{XA} = \frac{\hbar}{m}\,\frac{\partial\beta_A}{\partial x} = \frac{\hbar}{m}\,\frac{a_{A1}^2 - a_{A2}^2}{a_A^2}. \tag{5.11}$$

Движение будет направлено вправо, если $a_{A1}^2 > a_{A2}^2$, и влево, если $a_{A1}^2 < a_{A2}^2$. При $a_{A1}^2 = a_{A2}^2$ скорость будет равна нулю, т.е. будет статическое стационарное состояние. В выражении (5.11) только a_A зависит от x, поэтому в точках, где a_A^2 больше, скорость будет меньше, и наоборот. Если рассматривать **интенсивность** потока элементов квазиполя, подразумевая под ней количество квазиполя, проходящее через единицу площади поверхности, перпендикулярной потоку, в единицу времени, то она будет равна

$$a_A^2 V_X = \frac{\hbar}{m}\left(a_{A1}^2 - a_{A2}^2\right). \tag{5.12}$$

Как видно, интенсивность не зависит от x. Так и должно быть, иначе квазиполе при некоторых x накапливалось бы, а при других x, наоборот, убывало, что не соответствует стационарному состоянию.

Теперь рассмотрим случай B, когда $U > E$. В классической механике он невозможен, так как общая энергия E равна сумме потенциальной и кинетической, поэтому E всегда положительна и, значит, всегда $E \geqslant U$. В модельной квантовой механике в общую энергию квантона входит и потенциальная энергия квазиполя, которая может быть отрицательной и, таким образом, энергия E может оказаться меньше U. Это происходит из-за того, что в этом случае силы квазиполя компенсируют силы потенциала U.

Решение уравнения (5.6) для случая $U - E > 0$ будет иметь вид

$$\psi'_B = B_1 e^{\gamma x} + B_2 e^{-\gamma x} = a_B e^{i\beta}, \tag{5.13}$$

где $B_1 = a_{B1} e^{i\beta_{B1}}$, $B_2 = a_{B2} e^{i\beta_{B2}}$ — произвольные постоянные,

$$\gamma = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\left(U_B - E\right)}. \tag{5.14}$$

Плотность квазиполя будет

$$\begin{aligned} a_B^2 = \left[a_{B1} e^{\gamma x}\cos\beta_{B1} + a_{B2} e^{-\gamma x}\cos\beta_{B2}\right]^2 + \\ + \left[a_{B1} e^{\gamma x}\sin\beta_{B1} + a_{B2} e^{-\gamma x}\sin\beta_{B2}\right]^2 = \\ = a_{B1}^2 e^{2\gamma x} + a_{B2}^2 e^{-2\gamma x} + 2a_{B1}a_{B2}\cos\left(\beta_{B1} - \beta_{B2}\right). \end{aligned} \tag{5.15}$$

Видно, что плотность квазиполя является суммой двух экспонент и постоянной составляющей. Аргумент ψ'_B будет

$$\beta_B = \operatorname{arctg}\frac{a_{B1} e^{\gamma x}\sin\beta_{B1} + a_{B2} e^{-\gamma x}\sin\beta_{B2}}{a_{B1} e^{\gamma x}\cos\beta_{B1} + a_{B2} e^{-\gamma x}\cos\beta_{B2}}. \tag{5.16}$$

Зная β_B, найдем скорости элементов квазиполя и Т-частицы. Они будут направлены вдоль оси x и равняться

$$V_{XB} = \frac{\hbar}{m}\frac{\partial\beta_B}{\partial x} = 2\,\frac{\hbar}{m}\,\frac{\gamma a_{B1} a_{B2}\sin\left(\beta_{B1} - \beta_{B2}\right)}{a_B^2}. \tag{5.17}$$

Знак скорости будет определяться знаком разности $(\beta_{B1} - \beta_{B2})$.

Интенсивность потока элементов квазиполя будет

$$a_B^2 V_{XB} = 2\,\frac{\hbar}{m}\,\gamma a_{B1} a_{B2} \sin\left(\beta_{B1} - \beta_{B2}\right), \tag{5.18}$$

она не зависит от x.

5.3. Рассмотрим явление туннельного эффекта, когда Т-частица и квазиполе проходят через область, где $U > E$.

Пусть U зависит только от x и соответствует рис. 5.1. По условию волновая функция должна быть непрерывной и гладкой. Поэтому должно быть

$$\psi'_A(0) = \psi'_B(0), \quad \frac{\partial \psi'_A(0)}{\partial x} = \frac{\partial \psi'_B(0)}{\partial x}. \tag{5.19}$$

Используя (5.19), (5.7) и (5.13), получим: $A_1 + A_2 = B_1 + B_2$ и $ikA_1 - ikA_2 = \gamma B_1 - \gamma B_2$. Решая эти уравнения, получим зависимость параметров волновой функции в зонах A и B:

$$A_1 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\gamma}{ik}\right) B_1 + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\gamma}{ik}\right) B_2, \tag{5.20}$$

$$A_2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\gamma}{ik}\right) B_1 + \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\gamma}{ik}\right) B_2. \tag{5.21}$$

Соотношения между параметрами зон B и A' будут аналогичными.

Скорость движения и интенсивность потока элементов квазиполя в зоне A будет определяться выражениями (5.11) и (5.12), в зоне A' — аналогичными, а в зоне B — выражениями (5.17) и (5.18). На границах зон они не должны иметь скачков. Проверим это. Мы приняли, что на границах должны соблюдаться равенства (5.19), из которых следует, что на границе AB $a_A = a_B$, $\dfrac{\partial \beta_A}{\partial x} = \dfrac{\partial \beta_B}{\partial x}$. Далее, учитывая (5.11) и (5.17), на этой границе

$$V_{XA} = V_{XB}. \tag{5.22}$$

Кроме того, в зонах A и B, учитывая (5.12) и (5.18), будем иметь

$$a_B^2 V_{XA} = a_B^2 V_{XB}. \tag{5.23}$$

Сказанное можно отнести и к границе BA'.

Таким образом, на границах скорости меняются без скачков, а интенсивность потока внутри всех зон одинакова. Т-частицы будут проходить через зону, где $U > E$. Этот эффект называется туннельным, он классической механикой необъясним, поскольку она не учитывает сил квазиполя.

Как видно из (5.15), плотность квазиполя в зоне B будет уменьшаться по экспоненте по мере удаления от границ этой области. Так первый член в (5.15) будет уменьшаться по мере удаления от границы BA', а второй — от границы AB. Быстрота уменьшения будет определяться параметром γ. Для электрона, согласно (5.8) и (5.14),

$\gamma = 8{,}15 \cdot 10^{-8}\,\text{м}^{-1}$, и на расстоянии $1/2\gamma = 6{,}13 \cdot 10^{-10}\,\text{м}$ эти члены уменьшатся в 2,7 раз. Таким образом, мы будем тут иметь дело с атомными расстояниями.

Рассмотрим, как будет меняться картина с изменением ширины зоны B и потенциала U_B. Как видно из (5.13), на границе AB значение волновой функции будет

$$\psi'_{BA'} = B_1 e^{\gamma x_{BA'}} + B_2 e^{-\gamma x_{BA'}}.$$

При увеличении $x_{BA'}$ модуль первого члена будет увеличиваться. Так как при этом $\psi'_{BA'}$ не должно расти беспредельно, то модуль B_1, равный a_{B1}, должен стремиться к нулю. Поэтому интенсивность потока элементов квазиполя, согласно (5.18), должна также стремиться к нулю. Зона B становится непрозрачной, хотя около границ этой зоны квазиполе будет оставаться, уменьшаясь по экспоненте по мере удаления от границ.

При увеличении γ, по аналогичным причинам, интенсивность потока элементов квазиполя также будет стремиться к нулю. Кроме того, в этом случае на основании (5.20) и (5.21)

$$B_1 - B_2 = \frac{ik}{\gamma}\left(A_1 - A_2\right). \tag{5.24}$$

Поскольку $A_1 - A_2$ не может стремиться к бесконечности, то с увеличением γ, очевидно, наряду с B_1, B_2 также должно стремиться к нулю. Поэтому на границе AB, на основании (5.7) и (5.13), значение волновой функции должно также стремиться к $\psi'_A = \psi'_B = 0$. Очевидно, что при этом, учитывая (5.7), должно $A_1 \to -A_2$ и

$$\psi'_A \to A_1\big(e^{ikx} - e^{-ikx}\big) = 2A_1 \sin kx. \tag{5.25}$$

Из сказанного можно сделать вывод, что при расширении зоны B скорость движения квазиполя стремится к нулю и оно сосредотачивается у границ зоны.

В зоне A слагаемые волновой функции (5.7) становятся равными по модулю.

При $\gamma \to \infty$ волновая функция во всей зоне B становится равной нулю. В зоне A слагаемые волновой функции (5.7) становятся равными, и она стремится к выражению (5.25).

5.4. Рассмотрим теперь случай, когда волновая функция зависит только от координаты x и изменения потенциала U с изменением x (рис. 5.2). Тут в зонах B, B' $U = \infty$. В зоне A $U < E$.

В соответствии с параграфом 5.3, в данном случае в зонах B, B' и на их границах волновая функция будет равняться нулю, в зоне A она будет соответствовать выражению (5.25).

Пусть ширина зоны A будет l. Тогда для границы AB' должно быть

$$\psi'_A = 2A_1 \sin kl = 0. \tag{5.26}$$

Из этого следует, что $kl = n_x\pi$. Здесь n_x — целое число. Таким образом, волновая функция (5.26) может иметь место лишь при $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\,(E-U)} = \frac{\pi}{l}\,n_x$, или

$$E - U = \frac{\pi^2\hbar^2}{2l^2m}\,n_x^2. \tag{5.27}$$

Отсюда можно сделать заключение, что в рассматриваемом случае энергия частицы может принимать лишь дискретные значения, иначе говоря, она квантуется.

5.5. Как установлено в параграфе 5.4, волновая функция ψ_x и потенциал U вида

$$\psi(x) = e^{-i\,\frac{E_x}{\hbar}t}\psi'(x) = e^{-i\,\frac{E_x}{\hbar}}\cdot 2A\sin\frac{\pi n_x}{l}x,\; U_x = 0 \text{ при } 0 < x < l,$$

$$\psi(x) = 0, \quad U_x = \infty \quad \text{при} \quad x < 0, \quad x > l, \quad \text{где} \quad E_x = \frac{\pi^2\hbar^2}{2l^2m}\,n_x^2$$

удовлетворяют уравнению Шредингера.

Очевидно, что этому уравнению будут удовлетворять и аналогичные функции, в которых x заменено на y или на z. Поэтому уравнению Шредингера будет, согласно теореме параграфа 3.11, удовлетворять и волновая функция

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi_x\psi_y\psi_z = \\ = 8A^3e^{-i\,\frac{E}{\hbar}\,t}\sin\left(\frac{\pi}{l}\,n_xx\right)\sin\left(\frac{\pi}{l}\,n_yy\right)\sin\left(\frac{\pi}{l}\,n_zz\right), \tag{5.28}$$

$U = 0$, при $0 < x < 1$, $0 < y < 1$, $0 < z < 1$, и $\psi\,(\mathbf{r},t) = 0$, $U = \infty$ для остального пространства. Здесь

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\pi^2\hbar^2N}{2l^2m}, \tag{5.29}$$

$$N = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2. \tag{5.30}$$

Найдем значение A, исходя из необходимости соблюдения условия (2.4). Имеем

$$\int\limits_q \psi\psi^*dq = \\ = \int\limits_0^l\int\limits_0^l\int\limits_0^l 8A^6\sin^2\!\left(\frac{\pi}{l}n_xx\right)\sin^2\!\left(\frac{\pi}{l}n_yy\right)\sin^2\!\left(\frac{\pi}{l}n_zz\right)dx\,dy\,dz = \\ = A^6l^3 = 1.$$

Значит $A = \frac{1}{\sqrt{l}}$ и

$$\psi\,(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\sqrt{l^3}}e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t}\sin\left(\frac{\pi}{l}\,n_xx\right)\sin\left(\frac{\pi}{l}\,n_yy\right)\sin\left(\frac{\pi}{l}\,n_zz\right). \tag{5.31}$$

Эта волновая функция будет соответствовать случаю, когда квантон находится в кубическом «ящике» с непроницаемыми стенками и ребрами, равными l. Плотность квазиполя внутри «ящика» будет

$$\psi\psi^* = a^2 = \frac{1}{l^3}\sin^2\left(\frac{\pi}{l}\,n_x x\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{l}\,n_y y\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{l}\,n_z z\right), \tag{5.32}$$

а вне его равна нулю. Она будет иметь вид одинаковых «подушечек», уложенных слоями, которые разделены плоскостями. Таких плоскостей, перпендикулярных оси x, будет $(n_x - 1)$, оси y — $(n_y - 1)$ и оси z — $(n_z - 1)$. На этих плоскостях плотность квазиполя будет равна нулю.

Энергия квантона определяется числом N, даваемым выражением (5.30). Наименьшая энергия соответствует комбинации $(n_x, n_y, n_z) = (1, 1, 1)$. Для нее $N = 3$. Следующие комбинации (2,1,1), (1,2,1), (1,1,2) будут иметь энергию, соответствующую $N = 6$ и так далее.

Уровни энергии, которым соответствуют несколько различных волновых функций, называются вырожденными. Так рассмотренный последний случай имеет трехкратное вырождение.

Волновые функции (5.31) ортогональны между собой и соответствуют статическим стационарным состояниям.

Если ψ_k имеют один и тот же уровень энергии, то $\psi = \sum\limits_k c_k\psi_k$ будет также волновой функцией с тем же уровнем энергии, при этом должно быть $\sum\limits_k c_k c_k{*} = 1$.

Если c_k действительны, то волновая функция также будет соответствовать статическому состоянию. Если c_k комплексны и имеют различные аргументы, то аргумент ψ будет меняться с изменением $\mathbf{r}$, его градиент не будет везде равен нулю и скорость Т-частицы $\mathbf{V} = \dfrac{\hbar}{m}\nabla\beta$ будет отлична от нуля.

Если ψ_1 соответствует комбинации (2,1,1), а ψ_2 — комбинации (1,2,1), то

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1 + \frac{i}{\sqrt{2}}\psi_2 \quad \text{и} \quad \nabla\beta \neq 0.$$

Элементы квазиполя и Т-частицы будут двигаться по замкнутым траекториям вокруг оси, параллельной оси x и проходящей через центр «ящика», как это можно проследить, определяя градиент аргумента ψ в различных точках.

5.6. Рассмотрим теперь случай квантона, находящегося в потенциальной яме, когда

$$U = \left(x^2 + y^2 + z^2\right)g^2. \tag{5.33}$$

Используем метод, применявшийся в параграфах 3.11 и 4.5. Примем, что укороченная волновая функция будет

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi_x'(x)\,\psi_y'(y)\,\psi_z'(z)\,. \tag{5.34}$$

Укороченное уравнение Шредингера для этого случая будет

$$\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\psi' = \left[\left(x^2+y^2+z^2\right)g^2 - E_x - E_y - E_z\right]\psi' \tag{5.35}$$

или, используя (5.34),

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi_x'}{\partial x^2}\,\psi_y'\psi_z' + \psi_x'\frac{\partial^2\psi_y'}{\partial y^2}\psi_z' + \psi_x'\psi_y'\,\frac{\partial^2\psi_z'}{\partial z^2}\,\right) = \\ = \left[\left(x^2+y^2+z^2\right)g^2 - E_x - E_y - E_z\right]\psi_x'\psi_y'\psi_z'.$$

Если разделить это уравнение на $\psi_x'\psi_y'\psi_z'$, то оно распадется на три уравнения: одно уравнение, содержащее только x,

$$\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{1}{\psi_x'}\,\frac{\partial^2\psi_x'}{\partial x^2} = x^2g^2 - E_x, \tag{5.36}$$

и два аналогичных уравнения, содержащие y и z вместо x. Преобразуем уравнение (5.6), введя вместо x безразмерную величину. Получим вместо него уравнение

$$\frac{\partial^2\psi_x'}{\partial\xi^2} = \left(\xi^2-\lambda\right)\psi_x', \tag{5.37}$$

где

$$\xi = \frac{x}{x_0}; \quad x_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}\,g}; \quad \lambda = \frac{\sqrt{2m}\,E_x}{\hbar g}. \tag{5.38}$$

Уравнение (5.37) в математике известно. Оно имеет конечные решения только при

$$\lambda = 2n+1, \quad n = 0,\,1,\,2,\,3,\,\ldots\,. \tag{5.39}$$

И, значит, при

$$E_x = \frac{\hbar g}{\sqrt{2m}}\,(2n_x+1) \tag{5.40}$$

эти решения будут

$$\psi_{xn}' = e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_{n_X}(\xi)\,, \tag{5.41}$$

где

$$H_{n_X} = \frac{(-1)^{n_X}}{\sqrt{2^{n_X}n_x!\sqrt{\pi}}}\,e^{\xi^2}\,\frac{d^{n_X}e^{-\xi^2}}{d\xi^{n_X}} \tag{5.42}$$

— полиномы Эрмита. Первая дробь в них подобрана так, чтобы $\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi_{n_X}'^2\,d\xi = 1$.

Три первых ψ'_{xn} будут

$$\psi'_{x0} = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}},$$

$$\psi'_{x1} = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \cdot 2\,\frac{x}{x_0}, \tag{5.43}$$

$$\psi'_{x2} = \frac{1}{\sqrt{2^2 \cdot 2x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_{10}}} \left(4\,\frac{x^2}{x_0^2} - 2\right).$$

Аналогичные решения получим для ψ'_y и ψ'_z. При этом надо учесть, что

$$y_0 = z_0 = x_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}\,g}. \tag{5.44}$$

Полное выражение для волновой функции в рассматриваемом случае, учитывая (5.4) , (5.34) и (5.41), будет

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t}\psi'(\mathbf{r}) =$$
$$= e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t} e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{2x_0^2}} H_{n_X}\left(\frac{x}{x_0}\right) H_{n_Y}\left(\frac{y}{x_0}\right) H_{n_Z}\left(\frac{z}{x_0}\right), \tag{5.45}$$

где

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar g}{\sqrt{2m}}\,(2n_x + 1 + 2n_y + 1 + 2n_z + 1) =$$
$$= \frac{\hbar g}{\sqrt{2m}}\,(2N+3), \tag{5.46}$$

$$N = n_x + n_y + n_z; \quad n_x = 0,\,1,\,2,\,3,\,\ldots;$$
$$n_y = 0,\,1,\,2,\,3,\,\ldots; \quad n_z = 0,\,1,\,2,\,3,\,\ldots\,.$$

5.7. Рассмотрим еще случай, когда частица находится в кулоновском поле. Этот случай соответствует атому водорода, если принять, что его ядро неподвижно.

В этом случае уравнение Шредингера будет иметь вид

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\psi + U, \tag{5.46a}$$

$$U = -\frac{\alpha}{r}. \tag{5.47}$$

Для атома водорода

$$\alpha = \frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0}, \tag{5.48}$$

где $q_e = 1{,}6022 \cdot 10^{-19}$ Кл — заряд электрона.

Рассматривая стационарный случай, будем иметь укороченное уравнение Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi' = \left(-\frac{\alpha}{r} - E\right)\psi', \tag{5.49}$$

где m — масса электрона, r — радиус-вектор электрона, при этом мы принимаем за начало координат положение ядра и считаем его неподвижным, учитывая его большую массу.

Способ решения этого уравнения известен. Он довольно громоздок и приводится в курсах традиционной квантовой механики. Там для его решения обычно используется не только математика, но и ряд положений традиционной квантовой механики, однако совершенно ясно, что решение уравнения (5.49) может быть выполнено и чисто математическими методами. По этим причинам мы его приводить не будем, а дадим прямо результат. Для того чтобы укороченная волновая функция удовлетворяла необходимым условиям $\psi' \to 0$ при $r \to \infty$, необходимо, чтобы

$$E = E_n = -\frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2 n^2}, \quad \text{где} \quad n = 1{,}2{,}3, \ldots \tag{5.50}$$

Таким образом, энергия E квантуется. Она отрицательна, т. к. за нулевой уровень принята энергия атома, когда электрон удален в бесконечность.

Укороченная волновая функция в полярных координатах выражается так:

$$\psi'(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi), \tag{5.51}$$

$$R_{nl}(r) = -\frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}\, e^{-\frac{r}{r_0 n}} \left(\frac{2r}{nr_0}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{nr_0}\right),$$

где $r_0 = \dfrac{\hbar^2}{\alpha m}$,

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{m+|m|}\, i^l \left[\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi};$$

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = \left(-1^{|m|}\right)\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!2^l l!}\sin^{-|m|}\theta\, \frac{d^{l-|m|}}{(d\cos\theta)^{l-|m|}}\left(\cos^2\theta - 1\right)^l;$$

$$L_{n+l}^{2l+1}(z) = \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}e^z\,\frac{d^n}{dr^n}e^{-z}z^{(n-l-1)};$$

$$L_q^p(z) = \frac{q!}{(q-p)!}e^z\,\frac{d^n}{dz^n}e^{-z}z^{q-p},$$

где индексы n,l,m, пробегают значения

$$n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots\infty, \quad l = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots(n-1), \quad m = 0, \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots \pm l.$$

При одинаковом n энергия атома будет одинакова, и полученные решения, даваемые уравнением (5.51), будут взаимно ортогональны.

При заданном n число возможных значений индекса l будет n. При заданном l могут быть взяты $2l+1$ значений m. Таким образом, общее число решений при заданном n будет равно $\sum\limits_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$. Все решения при данном n будут иметь одинаковую энергию в соответствии с (5.50). Они будут n^2-кратно вырождены.

Квазиполе для этих решений будет $a^2=R_{nl}^2(\rho)\,Y_{lk}^2(\theta)=\psi_{nlk}\psi_{nlk}^*$, где

$$\psi_{nlk}=e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}R_{n,l}(\rho)\,Y_{l,k}(\theta)\,e^{ik\varphi}=e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\psi'_{nlk},$$

$$n=1,2,3,\,\ldots,\infty,\;\; l=0,1,2,3,\,\ldots,n-1,\quad k=0,\;\pm 1,\;\pm 2,\;\ldots,\;\pm l,$$

$$\rho=\frac{r}{r_0},\quad r_0=\frac{4\pi\varepsilon\hbar^2}{mq_e^2}=0{,}529\cdot 10^{-10}\,\text{м}.$$

Аргумент волновой функции будет $\beta=-\dfrac{E_n}{\hbar}t+k\varphi$.

Скорость движения электрона и элементов квазиполя $\mathbf{V}=\dfrac{\hbar}{m}\nabla\beta$.

Составляющая $\nabla\beta$ вдоль радиуса $\nabla_r\beta=\dfrac{\partial\beta}{\partial r}=0$.

Составляющая $\nabla\beta$ вдоль долготы $\nabla_\theta\beta=\dfrac{\partial\beta}{\partial\theta}=0$.

Составляющая $\nabla\beta$ вдоль широты $\nabla_\varphi\beta=\dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial\beta}{\partial\varphi}=\dfrac{k}{r\sin\theta}$.

Таким образом, электрон и элементы квазиполя будут двигаться по кругу в плоскости xy с центром на оси z со скоростью $V=\dfrac{\hbar}{m}\nabla_\varphi\beta=$ $=\dfrac{\hbar}{m}\dfrac{k}{r\sin\theta}$.

При этом число оборотов в секунду будет равно $f=\dfrac{V}{2\pi r\sin\theta}=$ $=\dfrac{\hbar k}{2\pi m r^2\sin^2\theta}$.

Отметим, что $r\sin\theta$ это расстояние между электроном и осью z.

Возьмем для примера $r\sin\theta=r_0$ и $k=1$, тогда получим

$$f=\frac{1{,}05\cdot 10^{-34}}{2\pi 0{,}91\cdot 10^{-30}0{,}5^2\cdot 10^{-20}}=0{,}73\cdot 10^{16}\,\text{Гц}.$$

Это соответствует мягкому рентгену. Вопрос о поведении атома при этих частотах будет рассмотрен в гл. 6.

Таким образом, если $k=0$, то состояние будет статическим, если $k\neq 0$ — динамическим. Исследуем полученные решения. Наименьший уровень энергии будет при $n=1$. Он будет равен

$$E_1=-\frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2}=-\frac{q_e^4 m}{16\pi^2\varepsilon_0^2 2\hbar^2}=-2{,}17\cdot 10^{-16}\,\text{Дж}=-13{,}5\,\text{эВ}. \qquad (5.51\text{а})$$

При этом уровне энергии будет только одно решение, так как при $n = 1$ имеем $l = 0$, $k = 0$. Это решение будет

$$\psi'_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\rho} = a_{100}(\mathbf{r}). \tag{5.52}$$

Аргумент $\psi_{1,0,0,}$ будет равен 0, поэтому и скорость Т-частицы тоже будет равна 0. Т-частица будет неподвижна и удерживаться от падения на ядро только за счет силы квазиполя. Мы будем иметь статическое стационарное состояние, при этом Т-частица может оказаться в любой точке пространства с соответствующей вероятностью.

Рассмотрим решения, для которых $n = 2$. При $n = 2$ энергия квантона будет равна, в соответствии с (5.50),

$$E_2 = -\frac{1}{4} \cdot 13{,}25\ \text{эВ} = -3{,}8\ \text{эВ}.$$

Этот уровень будет четырежды вырожденным. Согласно формуле (5.51) ему будут соответствовать 4 взаимно независимых решения с индексами

$$\begin{aligned} &n = 2; \quad l = 0; \quad k = 0; \\ &n = 2; \quad l = 1; \quad k = 0; \\ &n = 2; \quad l = 1; \quad k = 1; \\ &n = 2; \quad l = 1; \quad k = -1. \end{aligned} \tag{5.53}$$

Эти решения будут

$$\begin{aligned} \psi'_{2,0,0} &= \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\, e^{-\frac{\rho}{2}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right); \\ \psi'_{2,1,0} &= \frac{1}{\sqrt{32\pi}}\, e^{-\frac{\rho}{2}} \rho \cos\theta = \frac{1}{\sqrt{32\pi}}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, \frac{z}{r_0}; \\ \psi'_{2,1,1} &= \frac{1}{\sqrt{64\pi}}\, e^{-\frac{\rho}{2}} \rho \sin\theta e^{i\varphi} = \frac{1}{\sqrt{64\pi}}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, \frac{x+iy}{r_0}; \\ \psi'_{2,1,-1} &= \frac{1}{\sqrt{64\pi}}\, e^{-\frac{\rho}{2}} \rho \sin\theta e^{-i\varphi} = \frac{1}{\sqrt{64\pi}}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, \frac{x-iy}{r_0}. \end{aligned} \tag{5.54}$$

Полученные укороченные волновые функции нормированы, взаимно ортогональны и линейно независимы. Через них может быть выражена любая волновая функция для атома водорода. Как нетрудно убедиться, любая линейная комбинация

$$\psi = c_1\psi_{2,0,0} + c_2\psi_{2,1,0} + c_3\psi_{2,1,1} + c_3\psi_{2,1,-1}$$

будет удовлетворять тому же уравнению Шредингера, что и выражения (5.54), и ей будет соответствовать энергия E_2. При условии, что $\sum\limits_{k=1}^{k=4} \left|C_k^2\right| = 1$ эти функции будут нормированы и могут являться укороченными волновыми функциями. В частности, этим методом можно получить следующие укороченные волновые функции с энергией, равной E_2:

$$\begin{gathered}
\psi'_{2,0,0} = \psi'_{2,0,0} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\, e^{-\frac{\rho}{2}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right), \\
\psi'_{2,X} = \frac{1}{\sqrt{2}}\, \psi'_{2,1,1} + \frac{1}{\sqrt{2}}\, \psi'_{2,1,-1} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, \frac{x}{r_0}, \\
\psi'_{2,Y} = \frac{1}{i\sqrt{2}}\, \psi'_{2,1,1} - \frac{1}{i\sqrt{2}}\, \psi'_{2,1,-1} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, \frac{y}{r_0}, \\
\psi'_{2Z} = \psi'_{2,1,0} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, \frac{z}{r_0},
\end{gathered} \tag{5.55}$$

которые симметричны относительно осей x, y, z и все являются статическими и взаимно ортогональными. С помощью их можно также выразить любую волновую функцию для атома водорода, соответствующую энергии E_2.

Беря $n = 3$, получим $3^2 = 9$ взаимно независимых решений. Тут все решения также могу быть сделаны статическими (стационарными), и так далее.

Глава 6

Нестационарные процессы

6.1. В этой главе рассмотрим нестационарные процессы в квантонах. Будем рассматривать поведение квантона, волновая функция которого удовлетворяет уравнению Шредингера (1.3), причем квантон не обязательно находится в стационарном состоянии, как это было рассмотрено в главе 5. В частности, мы рассмотрим переход квантона из стационарного состояния с одной энергией в состояние с другой энергией, другими словами, излучение и поглощение энергии квантоном при переходе с одного энергетического уровня на другой.

Возьмем для простоты квантон, имеющий дискретные волновые функции, которые в соответствии с 5.1 должны иметь вид

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\psi'_n(\mathbf{r}). \tag{6.1}$$

Волновая функция такого квантона в общем виде может быть представлена рядом

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\psi'_n(r), \tag{6.2}$$

который будет удовлетворять тому же уравнению Шредингера, что и (6.1). При этом функции $\psi'_n(\mathbf{r})$ и $\psi'_m(\mathbf{r})$ при $n \neq m$ будут, как было показано в 5.1, ортогональны между собой.

Волновую функцию автономного квантона в нестационарном состоянии представим как сумму волновых функций стационарных состояний с различными энергиями, удовлетворяющих одному и тому же уравнению Шредингера. Эта сумма будет тоже удовлетворять этому уравнению.

Таким образом, будем считать, что волновую функцию квантона в общем виде можно записать, учитывая уравнение (5.4), так:

$$\psi = ae^{i\beta} = \sum_k \lambda_k e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}\psi'_k(\mathbf{r}) = \sum_k \lambda_k a_k(r)\, e^{i\varphi_k}, \tag{6.3}$$

где λ_k — постоянная, $\psi'_k = a_k(\mathbf{r})\, e^{i\beta_k(\mathbf{r})}$ — укороченная волновая функция, E_k— ее энергетический уровень, $\varphi_k = -\dfrac{E_k}{\hbar}t + \beta_k$. При этом будем считать, что $E_k \neq E_l$ при $k \neq l$ $(E_1 < E_2 < E_3 < \ldots)$. Это всегда можно сделать, объединив члены с одинаковыми значениями E.

Величины λ_k могут быть выбраны не совсем произвольно. Действительно, функция ψ должна удовлетворять уравнению $\int\limits_Q \psi{*}\psi\, dq = 1$. Подставляя в это уравнение ψ из (6.1) и учитывая (5.5а), получим, что λ_k должно удовлетворять условию

$$\int\limits_Q \psi^*\psi\, dq = \sum_k\sum_l \lambda_k^*\lambda_l e^{i\frac{E_k}{\hbar}t}e^{-i\frac{E_l}{\hbar}t}\int\limits_Q \psi_k^*\psi_l\, dq = \sum_k \lambda_k^*\lambda_k = 1. \tag{6.4}$$

Отметим, что в нестационарном состоянии, несмотря на то, что волновая функция является суммой нескольких волновых функций, Т-частица будет, как всегда, одна на весь квантон.

6.2. Рассмотрим энергию квантона в общем виде. В стационарном состоянии она определялась выражением (5.3). Если мы это выражение используем для случая свободного полета квантона, рассмотренного в главе 3, то окажется, что энергия квантона в этом случае будет меняться со временем, хотя на него в рассматриваемом случае не действуют внешние силы. Причиной этого является то, что мы при рассмотрении стационарного состояния в (5.3) имели выражение $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\nabla^2 a}{a}$, не зависящее от времени, и его можно было принять за потенциальную энергию. Между тем, в случае главы 3 это не так. Таким образом, в случае нестационарного состояния выражение (5.3) не соответствует полной энергии квантона. Выражение для полной энергии должно удовлетворять следующим условиям:

а) его размерность должна соответствовать размерности энергии,
б) для стационарного состояния оно должно соответствовать выражению (5.3),
в) энергия для автономной системы, т. е. системы, удовлетворяющей уравнению Шредингера, в котором $U = U(\mathbf{r})$, не должна зависеть от времени.

В качестве выражения для энергии квантона попробуем взять

$$E_{\text{кв}} = i\hbar\int\limits_Q \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\, dq, \tag{6.5}$$

где ψ — волновая функция.

Тогда:

а) $E_{\text{кв}}$ будет иметь размерность энергии,

б) для стационарного состояния будем иметь

$$E_{\text{кв}} = i\hbar \int\limits_Q \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t}\, dq = i\hbar \int\limits_Q e^{i\,\frac{E}{\hbar}t}\psi'^*(-i\,\frac{E}{\hbar})e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t}\psi'\, dq =$$
$$= E\int\limits_Q \psi'^*\psi\, dq = E,$$

т. е. $E_{\text{кв}}$ имеет постоянное значение E, соответствующее (5.3),

в) наконец, величина $E_{\text{кв}}$, даваемая выражением (6.5), не будет зависеть от времени, если ее уравнение Шредингера имеет U, также не зависящее от времени. Действительно, в этом случае $\dfrac{\partial\psi}{\partial t}$ будет удовлетворять тому же уравнению Шредингера, что и ψ. В этом нетрудно убедиться, взяв частную производную от уравнения Шредингера по времени. Действительно,

$$\frac{\partial}{\partial t}(i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t}) = \frac{\partial}{\partial t}(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi) + \frac{\partial}{\partial t}(U\psi),$$

или

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}(\frac{\partial\psi}{\partial t}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(\frac{\partial\psi}{\partial t}) + U\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

На основании приложения 2, положив $\psi_1 = \psi$ и $\psi_2 = \dfrac{\partial\psi}{\partial t}$, получим, что $E_{\text{кв}}$, даваемое выражением (6.5), не будет зависеть от времени и его можно принять за полную энергию квантона. Тут было принято во внимание соотношение (5.5а). Получим

$$E_{\text{кв}} = i\hbar \int\limits_Q \sum_k \lambda_k^* e^{i\,\frac{E_k}{\hbar}t}\psi_k'^* \sum_l \lambda_l\left(-i\,\frac{E_l}{\hbar}\right)e^{-i\,\frac{E_l}{\hbar}t}\psi_l'\, dq =$$
$$= \sum_k\sum_l E_l\lambda_k^*\lambda_l e^{i\,\frac{E_k-E_l}{\hbar}t}\int\limits_Q \psi_k'^*\psi_l'\, dq = \sum_l \lambda_l^*\lambda_l E_l. \qquad (6.6)$$

Найдем еще выражение для энергии квантона через модуль и аргумент его волновой функции:

$$E_{\text{кв}} = ih \int\limits_Q \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t}\, dq = i\hbar\int\limits_Q ae^{-i\beta}\left(\frac{\partial a}{\partial t}e^{i\beta} + ia\,\frac{\partial\beta}{\partial t}e^{i\beta}\right) dq =$$
$$= i\hbar\int\limits_Q a\,\frac{\partial a}{\partial t}\, dq - \hbar\int\limits_Q a^2\,\frac{\partial\beta}{\partial t}\, dq = -\hbar\int\limits_Q a^2\,\frac{\partial\beta}{\partial t}\, dq. \qquad (6.7)$$

Таким образом, энергия квантона равна среднему значению величины $-\hbar\,\dfrac{\partial\beta}{\partial t}$ по всему объему квантона.

6.3. Найдем модуль и аргумент волновой функции для ψ, даваемой уравнением (6.3).

Как было принято в главе 1, квантон состоит из квазиполя, параметры которого определяются волновой функцией, и находящейся в нем Т-частицы. Полная энергия квантона $E_{\text{кв}}$, согласно (6.7), зависит только от параметров волновой функции, т. е. от квазиполя. Другими словами, она не зависит от того, какая будет реализация движения Т-частицы при данной волновой функции. Для автономной системы, т. е. для системы, в которой $U(\mathbf{r})$ в уравнении Шредингера не зависит от времени, полная энергия квантона, согласно условию, также не зависит от времени. Она определяется выражением

$$E = U + \frac{mV^2}{2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 a}{a} + U_\partial, \tag{6.8}$$

где U — потенциальная энергия внешних сил, действующих на квантон (в случае электрона — это потенциальная энергия электрона во внешнем электрическом поле),

$\dfrac{mV^2}{2}$ — кинетическая энергия точечной частицы (V — ее скорость, m — масса),

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\nabla^2 a}{a}$ — потенциальная энергия квазиполя (a^2 — интенсивность квазиполя, или, что то же, квадрат модуля волновой функции вблизи точки нахождения Т-частицы в данной реализации и в данный момент),

$U_\partial = E + \hbar\dfrac{\partial b}{\partial t}$ — динамическая энергия квазиполя (ее величина зависит от скорости изменения параметра b в месте нахождения Т-частицы в данной реализации в данный момент, и в стационарных состояниях она равна нулю).

Таким образом, отдельные члены выражения (6.8) могут зависеть от времени и меняться при различных реализациях с одной и той же волновой функцией, в то время как суммарная энергия $E_{\text{кв}}$ при заданной волновой функции остается одной и той же при различных реализациях, не зависит от времени и описывается уравнениями (6.5) и (6.7).

Из (6.3) следует

$$\psi = \sum_k \lambda_k a_k(\cos\varphi_k + i\sin\varphi_k) = \\ = \sum_k \lambda_k a_k \cos\varphi_k + i\sum_k \lambda_k a_k \sin\varphi_k. \tag{6.9}$$

Поэтому квадрат модуля ψ будет равен

$$a^2 = \left(\sum_k \lambda_k a_k \cos\varphi_k\right)^2 + \left(\sum_k \lambda_k a_k \sin\varphi_k\right)^2,$$

или после преобразования

$$a^2 = \sum_k \sum_l \lambda_k \lambda_l a_k a_l \cos(\varphi_k - \varphi_l) =$$
$$= \sum_k \sum_l \lambda_k \lambda_l a_k a_l \cos\left(\frac{E_k - E_l}{\hbar}\, t - \beta'_k + \beta'_l\right). \quad (6.10)$$

Таким образом, плотность квазиполя a^2 будет в нестационарном состоянии состоять из суммы слагаемых, часть которых, при $k = l$, постоянны, а часть, при $k \neq l$, синусоидальны с угловыми частотами $\dfrac{E_k - E_l}{\hbar}$. Отсюда следует, что квантон с волновой функцией (6.3) будет являться колебательной системой с $(n-1)$ степенями свободы, где n — число членов в сумме формулы (6.3).

Найдем скорость движения $\mathbf{V}$ квазиполя и Т-частицы. Для β из (6.9) получим

$$\beta = \operatorname{arctg} \frac{\sum\limits_k \lambda_k a_k \sin\varphi_k}{\sum\limits_l \lambda_l a_l \cos\varphi_l}. \quad (6.11)$$

Скорость движения элементов квазиполя и Т-частицы, согласно (1.8), будет $\mathbf{V} = \dfrac{\hbar}{m}\nabla\beta$. Далее:

$$\nabla\beta = \mathbf{i}\,\frac{\partial\beta}{\partial x} + \mathbf{j}\,\frac{\partial\beta}{\partial y} + \mathbf{k}\,\frac{\partial\beta}{\partial z}, \quad (6.12)$$

где $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ — орты,

$$\frac{\partial\beta}{\partial x} = \frac{1}{1 + \left(\dfrac{\sum\limits_k \lambda_k a_k \sin\varphi_k}{\sum\limits_l \lambda_l a_l \cos\varphi_l}\right)^2} \times$$
$$\times \left[\sum_k \lambda_k \left(\frac{\partial a_k}{\partial x}\sin\varphi_k + a_k\,\frac{\partial\varphi_k}{\partial x}\cos\varphi_k\right)\sum_l \lambda_l a_l \cos\varphi_k - \right.$$
$$\left. - \sum_k \lambda_k a_k \sin\varphi_k \sum_l \lambda_l \left(\frac{\partial a_l}{\partial x}\cos\varphi_l - a_l\,\frac{\partial\varphi_l}{\partial x}\sin\varphi_l\right)\right] \frac{1}{\left|\sum\limits_l \lambda_l a_l \cos\varphi_l\right|^2} =$$
$$= \frac{1}{a^2}\left[\sum_k \sum_l \lambda_k \lambda_l \frac{\partial a_k}{\partial x} a_l \sin\varphi_k \cos\varphi_l + \right.$$
$$\left. + \sum_k \sum_l \lambda_k \lambda_l a_k a_l \frac{\partial\varphi_k}{\partial x}\cos\varphi_k \cos\varphi_l\right] +$$
$$+ \frac{1}{a^2}\left[-\sum_k \sum_l \lambda_k \lambda_l a_k\,\frac{\partial a_l}{\partial x}\sin\varphi_k \cos\varphi_l + \right.$$
$$\left. + \sum_k \sum_l \lambda_k \lambda_l a_k a_l\,\frac{\partial\varphi_l}{\partial x}\sin\varphi_k \sin\varphi_l\right].$$

Меняя k и l местами во второй и третьей суммах и складывая первую сумму с третьей, а вторую с четвертой, получим

$$\frac{\partial\beta}{\partial x} = \frac{1}{a^2}\sum_k\sum_l \lambda_k\lambda_l\,\frac{\partial a_k}{\partial x}a_l \sin\left(\varphi_k-\varphi_l\right) + \\ + \frac{1}{a^2}\sum_k\sum_l \lambda_k\lambda_l a_k a_l\,\frac{\partial\varphi_l}{\partial x}\cos\left(\varphi_k-\varphi_l\right).$$

Аналогичные выражения получим для $\dfrac{\partial\beta}{\partial y}$ и $\dfrac{\partial\beta}{\partial z}$. Отсюда, с помощью (6.12) , получим

$$\nabla\beta = \frac{1}{a^2}\sum_k\sum_l \lambda_k\lambda_l\left[a_l\nabla a_k\sin\left(\varphi_k-\varphi_l\right) + a_k a_l\nabla\varphi_l\cos\left(\varphi_k-\varphi_l\right)\right] = \\ = \frac{1}{2a^2}\sum_k\sum_l \lambda_k\lambda_l\left[\left(a_l\nabla a_k - a_k\nabla a_l\right)\sin\left(\varphi_k-\varphi_l\right) + \right. \\ \left. + a_k a_l\left(\nabla\varphi_k+\nabla\varphi_l\right)\cos\left(\varphi_k-\varphi_l\right)\right].$$

Скорость движения элементов квазиполя и Т-частицы будет

$$\mathbf{V} = \frac{\hbar}{m}\nabla\beta = \\ = \frac{\hbar}{2ma^2}\sum_k\sum_l \lambda_k\lambda_l\left[\left(a_k\nabla a_l - a_l\nabla a_k\right)\sin\left(\frac{E_l-E_k}{\hbar}t+\beta_k-\beta_l\right) + \right. \\ \left. + a_k a_l\left(\nabla\beta_k+\nabla\beta_l\right)\cos\left(\frac{E_l-E_k}{\hbar}t+\beta_k-\beta_l\right)\right]. \quad (6.13)$$

Таким образом, если все слагаемые волновой функции будут соответствовать статическим стационарным состояниями, то есть все $\nabla\beta = 0$, то все слагаемые скорости будут синусоидальными. При наличии динамических слагаемых члены, у которых $k = l$, дадут постоянные слагаемые скорости.

6.4. Рассмотрим более подробно случай, когда волновая функция состоит только из двух слагаемых и эти слагаемые статические. Этот случай соответствует переходу из одного статического состояния в другое. Будем иметь

$$\psi' = \lambda_1\psi_1' + \lambda_2\psi_2' = ae^{i\beta}, \quad \psi_1' = a_1e^{i\beta_1} = a_1e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}, \\ \psi_2' = a_2e^{i\beta_2} = a_2e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}, \quad \lambda_1^2+\lambda_2^2 = 1.$$

Энергия такого квантона будет равна, в соответствии с (6.6),

$$E = \lambda_1^2E_1 + \lambda_2^2E_2 = \left(1-\lambda_2^2\right)E_1 + \lambda_2^2E_2 = E_1 - \lambda_2^2\left(E_1-E_2\right).$$

Плотность квазиполя, на основании (6.10), будет равна

$$a^2 = \lambda_1^2a_1^2 + \lambda_2^2a_2^2 + 2\lambda_1\lambda_2a_1a_2\cos\left(\frac{E_1-E_2}{\hbar}\,t-\beta_1+\beta_2\right).$$

Поскольку в этом выражении все величины, кроме t, постоянны по времени, то a^2 во всех точках пространства будет меняться в такт по косинусу с угловой частотой $\omega = \dfrac{E_1 - E_2}{\hbar}$, одновременно достигая максимума или минимума в зависимости от знака произведения $a_1 a_2$. Найдем теперь выражение для $a^2 V$ — интенсивности движения квазиполя и Т-частицы. В рассматриваемом случае, на основании (6.13), получим

$$a^2\mathbf{V} = \frac{\hbar}{2m}\lambda_1\lambda_2\left(a_1\nabla a_2 - a_2\nabla a_1\right)\sin\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t + \beta_1 - \beta_2\right). \tag{6.14}$$

Отметим, что β_kи β_l влияют только на фазу колебаний. Интенсивность движения квазиполя $a^2\mathbf{V}$ будет изменяться во всем пространстве в такт по синусоидальному закону. Направление движения будет совпадать с направлением вектора $\mathbf{A} = a_1\nabla a_2 - a_2\nabla a_1$, которое не зависит от времени. Таким образом, элементы квазиполя будут двигаться взад и вперед вдоль вектора $\mathbf{A}$ во всем пространстве.

В качестве примера рассмотрим случай суммы волновых функций атома водорода $\psi_{2,0,0}$ и $\psi_{1,0,0}$ (обозначения см. гл. 5). В этом случае

$$a_1 = \psi'_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-\rho}, \quad \nabla a_1 = -\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-\rho}\,\frac{\boldsymbol{\rho}}{\rho}.$$

$$a_2 = \psi'_{2,0,0} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}e^{-\rho/2}\left(1 - \frac{\rho}{2}\right),\ \nabla a_2 = -\frac{1}{\sqrt{32\pi}}\boldsymbol{\rho}\left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2}\right)e^{-\rho/2},$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{4\sqrt{2}\,\pi}e^{-3\rho/2}\left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2}\right)\boldsymbol{\rho} + \frac{1}{2\sqrt{2}\,\pi}e^{-3\rho/2}\left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2}\right)\boldsymbol{\rho} = \\ = \frac{3}{4\sqrt{2}\,\pi}e^{-3\rho/2}\left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2}\right)\boldsymbol{\rho}.$$

Таким образом, движение элементов квазиполя и Т-частицы будет происходить по прямым, идущим через начало координат.

Картина траекторий в плоскости, проходящей через начало координат, изображена на рис. 6. В моменты, когда в формуле (6.14) синусы положительны, движение идет по стрелке, когда отрицательны, то в обратном направлении. Элементы квазиполя, находящиеся на сфере с $\rho = 2$, неподвижны.

Вместе с одним из элементов квазиполя движется Т-частица. Ее начальное положение случайно. Вероятность его дается выражением (2.4).

Траектории движения квазиполя по времени нетрудно получить из уравнения (6.3). Следует отметить, что траектория элемента квазиполя и, значит, Т-частицы, согласно (6.14), будет периодической, но при достаточно больших амплитудах не синусоидальной, так как множитель перед синусом в (6.14) будет меняться во времени.

На рис. 6.1 отдельными отрезками показаны примеры различных вариантов траекторий, по которым будет двигаться Т-частица. Она будет попадать в точки $+1$ в моменты, когда синус равен $+1$, и в точки -1, когда синус равен -1. Размах колебаний зависит от произведения $\lambda_1\lambda_2$. Из соотношения (6.14) следует, что это произведение будет стремиться к нулю, когда одно из λ стремится к нулю или единице, и принимать максимальное значение, равное $1/2$, когда они равны.

Из сказанного выше следует, что амплитуды колебаний должны оставаться постоянными, что противоречит и опыту и закону сохранения энергии, если Т-частица имеет заряд. Действительно, в этом случае, колеблясь, она будет излучать электромагнитное поле, и квантон должен терять энергию, что потребует изменения со временем картины его колебаний.

6.5. Из классической электродинамики известно, что при синусоидальном движении заряженного тела со скоростью $\mathbf{V} = \mathbf{V}_0 \sin\omega t$ на него будет действовать дополнительная сила торможения, которая отнимает энергию, идущую на излучение электромагнитного поля. В системе (СИ) эта сила равна $\mathbf{f} = \dfrac{-\mu_0 q^2 \omega^2}{6\pi c}\mathbf{V}n$, где q — заряд тела в кулонах, $c = 3 \cdot 10^8$ м/с — скорость света.

Таким образом, эта сила действует вдоль направления, обратного скорости. Очевидно, эта сила не меняет фазу и частоту колебаний, а сказывается только на их амплитуде.

Потеря мощности за период будет

$$\int\limits_{-T/2}^{T/2} -f_0 \cos\omega t \cdot V_0 \cos\omega t\, dt = -fV_0 \int\limits_{-T/2}^{T/2} \cos^2\omega t\, dt =$$

$$= -\frac{1}{2} f_0 V_0 T = -\frac{\pi}{\omega} f_m V_m = \frac{\pi\mu_0 q\omega V_m^2}{6\pi c}\,\text{Дж} = \frac{\mu_0 q\omega^3 l^2}{6c}\,\text{эВ} =$$
$$= \frac{\mu_0 q 8\pi^3 c^3 l^2}{6c\lambda^3} = \frac{4}{3}\pi^3 \mu_0 q\, \frac{c^2 l^2}{\lambda^3}.$$

Для оптического диапазона $\lambda = 5 \cdot 10^{-7}$ см, $l = 0{,}3 \cdot 10^{-10}$ м,

$$\frac{\pi}{\omega} f_m V_m = \frac{4\pi^3 12,567 \cdot 10^{-7} \cdot 1{,}6022 \cdot 10^{-19} \cdot 9 \cdot 10^{16} \cdot 0{,}3^2 \cdot 10^{-20}}{3 \cdot 125 \cdot 10^{-21}} =$$
$$= 0{,}546 \cdot 10^{-9}\,\text{эВ}.$$

При переходе с одного уровня энергии на другой, в случае излучения в оптическом диапазоне, расходуется энергия порядка 1 эВ. Для этого в атоме, если на него подействуют внешние поля, должно совершаться порядка 10^9 колебаний. Ясно, что если рассматриваются процессы длительностью несколько сотен или тысяч периодов и на атом не действуют внешние поля для торможения или излучения электрона, то собственным излучением можно пренебречь.

Рассмотрим случай, когда квантон вначале был в статическом стационарном состоянии с энергией E_k и составляющие с другими энергиями в этой волновой функции отсутствовали. В этом состоянии квантон может пребывать сколь угодно долго — в нем колебаний нет, он энергии не теряет. Пусть далее, благодаря внешним воздействиям, в волновой функции появились колебания, соответствующие стационарному колебанию с энергией $E_l > E_k$.

При этом, как было показано в этой главе, Т-частица начнет колебаться с частотой $\omega = \frac{E_l - E_k}{\hbar}$ и начнет излучаться энергия. Энергия квантона равна

$$E = \lambda_k^2 E_k + \lambda_l^2 E_l = \left(1 - \lambda_l^2\right) E_k + \lambda_l^2 E_l = E_k + \lambda_l^2 \left(E_l - E_k\right).$$

Она должна со временем уменьшаться. Для этого λ_l должна уменьшаться и стремиться к нулю. Сначала, пока λ_l не очень мала и колебания Т-частицы, которые пропорциональны $\lambda_l \lambda_k = \sqrt{1 - \lambda_l^2}\,\lambda_l$, еще значительны, скорость уменьшения λ_l будет больше. Затем, по мере уменьшения λ_l, она будет замедляться и асимптотически стремиться к нулю. Квазиполе будет асимптотически переходить в начальное состояние с $E = E_k$.

Рассмотрим теперь случай, когда возникнут дополнительные колебания с $E_l < E_k$. В этом случае при уменьшении энергии из-за излучения λ_l должно увеличиваться. Это приводит к увеличению произведения $\lambda_k \lambda_l$. Колебания Т-частицы будут со временем расти, и скорость роста λ_l увеличится.

Если система находится в стационарном статическом состоянии, так будет продолжаться до тех пор, пока не будет $\lambda_l = \lambda_k = 1/\sqrt{2}$. Затем, с дальнейшей потерей энергии, λ_l будет продолжать расти, но произведение $\lambda_k \lambda_l$ будет уменьшаться, и рост λ_l замедлится. Замедлится и рост амплитуды колебаний. В пределе мы подойдем асимптотически к состоянию, когда $\lambda_l = 1$ а $\lambda_k = 0$, т. е. квантон окажется в статическом стационарном состоянии с энергией E_l. Таким образом, он потратит на излучение энергию кванта, равную $E_k - E_l$.

Итак, если система находится в стационарном состоянии с энергией E_k и нет внешних воздействий, то она может находиться в этом состоянии сколь угодно долго. Если система имеет волновую функцию, состоящую из двух слагаемых, соответствующих энергиям E_k и E_l , то в ней будут происходить колебания с частотой $|E_k - E_l|/\hbar$, и она будет терять энергию, идущую на электромагнитное излучение. В результате чего коэффициент у члена, соответствующего большей энергии, будет уменьшаться, а у члена с меньшей энергией — увеличиваться, и система асимптотически перейдет в состояние, характеризующееся меньшей энергией.

6.6. Рассмотрим воздействие синусоидального периодического поля на квантон, находящийся в статическом нестационарном состоянии. В качестве примера возьмем атом водорода и электрическое поле. Пусть вначале атом находится в стационарном статическом состоянии и имеет энергетический уровень E_k. Пусть на него начинает действовать синусоидальное электрическое поле с частотой $\omega = (E_k - E_l)/\hbar$, где $E_l < E_k$ и является также одним из уровней возможной стационарной энергии атома. Как было показано в 6.3, в этом случае в квантоне могут возникнуть слабо затухающие синусоидальные колебания с частотой ω. Энергия его будет $E = \lambda_k^* \lambda_k E_k - \lambda_l^* \lambda_l E_l = E_k - (E_k - E_l)\, \lambda_l^* \lambda_l$. По мере раскачки внешним полем энергия атома будет уменьшаться и переходить в поле излучения.

Рассмотрим воздействие синусоидального поля на квантовую систему. Как видно из (6.10) и (6.13), такая система может совершать слабо затухающие периодические колебания с угловыми частотами, равными $(E_k - E_l)/\hbar$. Если на нее будет воздействовать периодическая сила с одной из таких частот, то в случае, когда направление действия внешней силы, действующей на Т-частицу, будет совпадать со скоростью движения частицы, она будет передавать ей энергию. Если она будет противоположна скорости, то — отнимать. Если частота внешнего поля будет близка к собственной частоте квантовой системы, то часть времени ей будет передаваться энергия, а часть времени отниматься из нее. При больших разностях частот внешнее поле будет действовать мало.

Приложение 1

Пусть задано поле скоростей $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, которые будет иметь Т-частица, если будет находиться в момент t в точке с радиус-вектором $\mathbf{r}$. Тогда, если задать начальное положение частицы, то мы, зная это поле скоростей, будем знать траекторию полета частицы. Найдем ее ускорение при движении по этой траектории. Очевидно

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = \frac{\mathbf{V}(\mathbf{r} + \mathbf{V}dt, t + dt) - \mathbf{V}(\mathbf{r}, t)}{dt}.$$

Тут было учтено, что за время dt частица переместится на отрезок $\mathbf{V}\,dt$. Найдем сначала проекцию ускорения на ось x. Очевидно

$$\begin{aligned}
\frac{dV_X}{dt} &= \frac{V_X(x + V_X dt, y + V_Y dt, z + V_Z dt, t + dt) - V_X(x, y, z, t)}{dt} = \\
&= \frac{\partial V_X}{\partial x} V_X + \frac{\partial V_X}{\partial y} V_Y + \frac{\partial V_X}{\partial z} V_Z + \frac{\partial V_X}{\partial t} = \\
&= \frac{\partial V_X}{\partial x} V_X + \frac{\partial V_Y}{\partial x} V_Y + \frac{\partial V_Z}{\partial x} V_Z - \frac{\partial V_Y}{\partial x} V_Y - \\
&\quad - \frac{\partial V_Z}{\partial x} V_Z + \frac{\partial V_X}{\partial y} V_Y + \frac{\partial V_X}{\partial z} V_Z + \frac{\partial V_X}{\partial t} = \\
&= \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{V}^2}{\partial x} - V_Y \left(\frac{\partial V_Y}{\partial x} - \frac{\partial V_X}{\partial y} \right) + V_Z \left(\frac{\partial V_X}{\partial z} - \frac{\partial V_Z}{\partial x} \right) + \frac{\partial V_X}{\partial t} = \\
&= \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{V}^2}{\partial x} - V_Y \{\nabla \times \mathbf{V}\}_Z + V_Z \{\nabla \times \mathbf{V}\}_Y + \frac{\partial V_X}{\partial t} = \\
&= \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{V}^2}{\partial x} - \{\mathbf{V} \times (\nabla \times \mathbf{V})\}_X + \frac{\partial V_X}{\partial t},
\end{aligned}$$

где через $\{\nabla \times \mathbf{V}\}_Z$, $\{\nabla \times \mathbf{V}\}_Y$, $\{\mathbf{V} \times (\nabla \times \mathbf{V})\}_X$ обозначены проекции на оси z, y, x векторов, стоящих в фигурных скобках.

Аналогичные выражения получим для проекций $d\mathbf{V}/dt$ на оси y, z. Умножая эти проекции на соответствующие орты и складывая полученные результаты, будем иметь для ускорения выражение

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = \frac{1}{2}\,\nabla(\mathbf{V}^2) - \mathbf{V} \times (\nabla \times \mathbf{V}) + \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t}. \tag{П1.1}$$

Приложение 2

Докажем математическую теорему, касающуюся функций, удовлетворяющих уравнению Шредингера.

Теорема. *Если* $\psi_1\,(\mathbf{r}, t)$ и $\psi_2\,(\mathbf{r}, t)$ *меняются со временем согласно одному и тому же уравнению Шредингера, т. е.*

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1 + U\psi_1, \tag{П2.1}$$

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2 + U\psi_2, \tag{П2.2}$$

то

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_q \psi_1^*\psi_2\,dq = i\,\frac{\hbar}{2m}\int\limits_S (\psi_1^*\nabla\psi_2 - \psi_2\nabla\psi_1^*)\,d\mathbf{S}. \tag{П2.3}$$

Здесь первый интеграл берется по любому объему q, а второй по замкнутой поверхности S вокруг этого объема.

Значком * здесь и далее обозначается комплексно сопряженная величина.

Очевидно, что из (П2.1) следует

$$-i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi_1^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1^* + U\psi_1^*. \tag{П2.4}$$

Умножая уравнение (П2.2) на ψ_1^* и уравнении (П2.4) на ψ_2, получим

$$i\hbar\psi_1^*\,\frac{\partial}{\partial t}\psi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1^*\nabla^2\psi_2 + U\psi_1^*\psi_2, \tag{П2.5}$$

$$-i\hbar\psi_2\,\frac{\partial}{\partial t}\psi_1^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2\nabla^2\psi_1^* + U\psi_1^*\psi_2. \tag{П2.6}$$

Затем, вычитая из (П2.5) выражение (П2.6), будем иметь

$$i\hbar\left(\psi_1^*\,\frac{\partial}{\partial t}\psi_2 + \psi_2\,\frac{\partial}{\partial t}\psi_1^*\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi_1^*\nabla^2\psi_2 - \psi_2\nabla^2\psi_1^*\right),$$

или

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi_1^*\psi_2\right) = \frac{i\hbar}{2m}\nabla\left(\psi_1^*\nabla\psi_2 - \psi_2\nabla\psi_1^*\right).$$

Наконец, интегрируя по объему q и используя теорему Гаусса–Остроградского, получим

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_q \psi_1^*\psi_2\,dq = i\,\frac{\hbar}{2m}\int\limits_q \nabla\left(\psi_1^*\nabla\psi_2 - \psi_2\nabla\psi_1^*\right)dq = \\ = i\,\frac{\hbar}{2m}\oint\limits_S \left(\psi_1^*\nabla\psi_2 - \psi_2\nabla\psi_1^*\right)d\mathbf{S},$$

что доказывает теорему.

Следствие 1. *Если ψ_1 и ψ_2 меняются со временем согласно одному и тому же уравнению Шредингера и область, где $|\psi_1| \neq 0$, можно окружить замкнутой поверхностью, на которой ψ_1 и $\nabla\psi_1$ равны нулю, то интеграл*

$$\int\limits_q \psi_1^*\psi_2\,dq \tag{П2.7}$$

не зависит от времени.

Действительно, в этом случае можно при интегрировании по поверхности считать ψ_1^* и $\nabla\psi_1^*$ равными нулю. Тогда правая часть равенства (П.2.3) оказывается равной нулю, откуда следует, что $\dfrac{\partial}{\partial t}\int\limits_q \psi_1^*\psi_2\,dq = 0$.

Приложение 3

Пусть имеются две системы координат, которые могут перемещаться друг относительно друга так, что радиус-вектор некоторой точки в первой системе $\mathbf{r}_1$ и радиус-вектор той же точки во второй системе координат $\mathbf{r}_2$ удовлетворяют соотношению

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{S}\,(t)\,, \tag{П3.1}$$

где $\mathbf{S}\,(t)$ вектор смещения второй системы координат относительно первой (см. рис. П3.1), причем $\mathbf{S}\,(t)$ может зависеть только от времени, но не от координат.

Пусть волновая функция в первой системе координат будет

$$\psi_1\,(\mathbf{r}_1,\,t) = a_1\,(\mathbf{r}_1,\,t)\,e^{i\beta_1(\mathbf{r}_1,\,t)} \tag{П3.2}$$

и пусть она удовлетворяет в этой системе уравнению Шредингера

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}\psi_1\,(\mathbf{r}_1,\,t) = -\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi_1\,(\mathbf{r}_1,\,t) + \psi_1\,(\mathbf{r}_1,\,t)\,U_1\,(\mathbf{r}_1,\,t)\,. \tag{П3.3}$$

Найдем выражение для волновой функции того же процесса во второй системе координат

$$\psi_2\,(\mathbf{r}_2,\,t) = a_2\,(\mathbf{r}_2,\,t)\,e^{i\beta_2(\mathbf{r}_2 t)} \tag{П3.4}$$

и уравнение Шредингера, которому она должна удовлетворять.

Очевидно, для квазиполя будем иметь

$$a_2^2(\mathbf{r}_2, t) = a_1^2(\mathbf{r}_1, t) = a_1^2(\mathbf{r}_2 + \mathbf{S}, t)\,, \tag{П3.5}$$

$$\mathbf{V}_2(\mathbf{r}_2, t) = \mathbf{V}_1(\mathbf{r}_1, t) - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = \mathbf{V}_1(\mathbf{r}_2 + \mathbf{S}, t) - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t}, \tag{П3.6}$$

где $\mathbf{V}_2$ и $\mathbf{V}_1$ — скорости движения квазиполя и Т-частицы в соответствующих системах координат.

С волновой функцией дело будет сложнее. Очевидно, что для a_2 остается справедливым выражение (П3.5). Далее, из формулы (П3.6) , учитывая (1.8), получим

$$\frac{\hbar}{m}\nabla\beta_2(\mathbf{r}_2, t) = \frac{\hbar}{m}\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1, t) - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = \frac{\hbar}{m}\nabla\beta_1(\mathbf{r}_2 + \mathbf{S}, t) - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t}. \tag{П3.7}$$

Здесь и далее мы будем считать, что при взятии частных производных при вычислении ∇ они берутся по переменным $\mathbf{r}_1$ или $\mathbf{r}_2$, присутствующим в скобках.

Поэтому в уравнении (П3.7) частные производные при подсчете $\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1, t)$ берутся в первой системе координат, считая t постоянным и $\mathbf{r}_1$ переменным, а при подсчете $\nabla\beta_1(\mathbf{r}_2 + \mathbf{S}, t)$ берутся во второй системе координат, считая t постоянным и $\mathbf{r}_2$ переменным. Поскольку при постоянном t, в соответствии с (П3.1), приращения $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ равны, то частные производные по координатам в обоих случаях будут также равны и $\nabla\beta_1(\mathbf{r}_2 + \mathbf{S}, t) = \nabla\beta_1(\mathbf{r}_1, t)$.

Равенство (П3.7) будет удовлетворяться, если принять

$$\begin{aligned}\beta_2(\mathbf{r}_2, t) = \beta_1(\mathbf{r}_1, t) - \frac{m}{\hbar}\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t}\mathbf{r}_2 + f(t) = \\ = \beta_1(\mathbf{r}_2 + S, t) - \frac{m}{\hbar}\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t}\mathbf{r}_2 + f(t)\,,\end{aligned} \tag{П3.8}$$

где $f(t)$ — произвольная функция времени, не зависящая от координат. В справедливости (П3.8) можно убедиться, умножив обе части этого уравнения на ∇.

Поскольку ψ_1 удовлетворяет уравнению Шредингера, то, согласно уравнениям (1.6а) и (1.7), должно быть

$$\frac{\partial a_1(\mathbf{r}_1 t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\left[2\nabla a_1(\mathbf{r}_1, t)\cdot\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1, t) + a_1(\mathbf{r}_1, t)\cdot\nabla^2\beta_1(\mathbf{r}_1, t)\right] \tag{П3.9}$$

и

$$-\hbar\,\frac{\partial\beta_1(\mathbf{r}_1, t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\left\{-\frac{\nabla^2 a_1(\mathbf{r}_1, t)}{a_1(\mathbf{r}_1, t)} + [\beta_1(\mathbf{r}_1, t)]^2\right\} + U_1(\mathbf{r}_1, t)\,, \tag{П3.10}$$

где производные берутся в первой системе.

Для a_2 и β_2 должно быть справедливо уравнение Шредингера во второй системе координат или, что то же, уравнения, аналогичные (П3.9) и (П3.10):

$$\frac{\partial a_2(\mathbf{r}_2,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\left[2\nabla a_2(\mathbf{r}_2,t)\cdot\nabla\beta_2(\mathbf{r}_2,t) + \right.$$
$$\left. + a_2(\mathbf{r}_2,t)\cdot\nabla^2\beta_2(\mathbf{r}_2,t)\right], \quad (\text{П3.11})$$

$$-\hbar\frac{\partial\beta_2(\mathbf{r}_2,t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\left\{-\frac{\nabla^2 a_2(\mathbf{r}_2,t)}{a_2} + \left[\nabla\beta_2(\mathbf{r}_2,t)\right]^2\right\} + U_2(\mathbf{r}_2,t). \quad (\text{П3.12})$$

Проверим это, подставив значения a_2 и β_2 из (П3.5) и (П3.8), и найдем значения $f(t)$ и U_2. Левая часть уравнения (П3.11) будет

$$\frac{\partial a_2(\mathbf{r}_2,t)}{\partial t} = \frac{\partial a_1(\mathbf{r}_2+\mathbf{S},t)}{\partial t} = \nabla a_1(\mathbf{r}_2+\mathbf{S},t)\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t} + \frac{\partial a_1(\mathbf{r}_1,t)}{\partial t}. \quad (\text{П3.13})$$

Здесь в $a_2(\mathbf{r}_2+\mathbf{S},t)$ с изменением t меняются оба аргумента. Первый член правой части (П3.13) является производной по времени за счет изменения первого аргумента $\mathbf{r}_2+\mathbf{S}(t)$ при постоянном втором, а второй — при изменении второго аргумента t при постоянном первом, равным $\mathbf{r}_1$.

Правая часть равенства (П3.11) при замене a_2 и β_2, в соответствии с (П3.5) и (П3.7), будет

$$-\frac{\hbar}{2m}\left[2\nabla a_2(\mathbf{r}_2,t)\cdot\nabla\beta_2(\mathbf{r}_2,t) + a_2(\mathbf{r}_2,t)\cdot\nabla^2\beta_2(\mathbf{r}_2,t)\right] =$$
$$= -\frac{\hbar}{2m}\left\{2\nabla a_1(\mathbf{r}_1,t)\cdot\left[\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1,t) - \frac{m}{\hbar}\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}\right] + \right.$$
$$\left. + a_1(\mathbf{r}_1,t)\cdot\nabla^2\beta_1(\mathbf{r}_1,t)\right\} = -\frac{\hbar}{m}\nabla a_1(\mathbf{r}_1,t)\cdot\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1,t) +$$
$$+ \nabla a_1(\mathbf{r}_1,t)\cdot\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t} - \frac{\hbar}{2m}a_1(\mathbf{r}_1,t)\cdot\nabla^2\beta_1(\mathbf{r}_1,t). \quad (\text{П3.14})$$

В соответствии со сказанным ранее, принято, что $\nabla a_2(\mathbf{r}_2,t) = \nabla a_1(\mathbf{r}_1,t)$, $\nabla\beta_2(\mathbf{r}_2,t) = \nabla\beta_1(\mathbf{r}_1,t,)$ и $\nabla\dfrac{\partial\mathbf{S}(t)}{\partial t} = 0$.

Вычитая из выражений (П3.13) и (П3.14) одинаковый член $\nabla a_1(\mathbf{r}_1,t)\cdot\dfrac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}$, мы получим, что выражение (П3.13) будет равно левой части уравнения (П3.9), а выражение (П3.14) — правой части этого уравнения. Таким образом, выражения (П3.11) и (П3.9) оказываются идентичными, а это значит, что уравнение (П3.11) справедливо.

Перейдем к уравнению (П3.12). Для левой части этого уравнения, пользуясь выражением (П3.8) и рассуждая аналогично предыдущему, получим

$$-\hbar\frac{\partial\beta_2(\mathbf{r}_2,t)}{\partial t} = -\hbar\frac{\partial\beta_1(\mathbf{r}_2+\mathbf{S},t)}{\partial t} + m\frac{\partial^2\mathbf{S}}{\partial t^2}\mathbf{r}_2 - \hbar\frac{\partial f}{\partial t} =$$
$$= -\hbar\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1,t)\cdot\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial tt} - \hbar\frac{\partial\beta_1(\mathbf{r}_1,t)}{\partial t} + m\frac{\partial^2\mathbf{S}}{\partial t^2}\mathbf{r}_2 - \hbar\frac{\partial f}{\partial t}. \quad (\text{П3.15})$$

Для правой части уравнения (П3.11) после замены переменных, учитывая (П3.7) и переходя ко второй системе координат, будем иметь, действуя аналогично предыдущему,

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left\{-\frac{\nabla^2 a_1(\mathbf{r}_1, t)}{a_1(\mathbf{r}_1, t)}+\left[\nabla\beta_1(r_1, t)-\frac{m}{\hbar}\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}\right]^2\right\}+U_2(\mathbf{r}_2, t)=$$
$$=\frac{\hbar^2}{2m}\left\{-\frac{\nabla^2 a_1(\mathbf{r}_1, t)}{a_1(\mathbf{r}_1, t)}+[\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1, t)]^2\right\}-\hbar\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1, t)\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}+$$
$$+\frac{m}{2}\left(\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}\right)^2+U_2(\mathbf{r}_2, t). \quad (\text{П}3.16)$$

Приравнивая правые части (П3.15) и (П3.16), получим вместо (П3.12) уравнение

$$-\hbar\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1 t)\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}-\hbar\frac{\partial\beta_1(\mathbf{r}_1, t)}{\partial t}+m\frac{\partial^2\mathbf{S}}{\partial t^2}\mathbf{r}_2-\hbar\frac{\partial f}{\partial t}=$$
$$=\frac{\hbar^2}{2m}\left\{-\frac{\nabla^2 a_1(\mathbf{r}_1, t)}{a_1(\mathbf{r}, t)}+[\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1, t)]^2\right\}-\hbar\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1, t)\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}+$$
$$+\frac{m}{2}\left(\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}\right)^2+U_2(\mathbf{r}_2, t)$$

и, вычитая из него уравнение (П3.10), получим

$$-\hbar\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1 t)\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}+m\frac{\partial^2\mathbf{S}}{\partial t^2}\mathbf{r}_2-\hbar\frac{\partial f}{\partial t}=$$
$$=-\hbar\nabla\beta_1(\mathbf{r}_1, t)\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}+\frac{m}{2}\left(\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}\right)^2+U_2(\mathbf{r}_2 t)-U_1(\mathbf{r}_1 t). \quad (\text{П}3.17)$$

Чтобы удовлетворялось уравнение Шредингера (П3.12), должно удовлетворяться уравнение (П3.17). Исходя из этого, найдем значения U_2 и f, которые у нас пока не были определены. Приравнивая в (П3.17) члены, зависящие только от времени, получим

$$-\hbar\frac{\partial f}{\partial t}=\frac{m}{2}\left(\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}\right)^2$$

или

$$f(t)=-\frac{m}{2\hbar}\int\left(\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}\right)^2 dt. \quad (\text{П}3.18)$$

И приравнивая остальные члены в (П3.17), получим

$$U_2(\mathbf{r}_2, t)=U_1(\mathbf{r}_1, t)+m\frac{\partial^2\mathbf{S}}{\partial t^2}\mathbf{r}_2. \quad (\text{П}3.19)$$

Для внешней силы во второй системе координат получим

$$\mathbf{F}_{02}(\mathbf{r}_2, t)=-\nabla U_2(\mathbf{r}_2, t)=-\nabla U_1(\mathbf{r}_2+\mathbf{S}, t)-m\frac{\partial^2\mathbf{S}}{\partial t^2}=$$
$$=\mathbf{F}_{01}(\mathbf{r}_2+\mathbf{S}, t)-m\frac{\partial^2\mathbf{S}}{\partial t^2}, \quad (\text{П}3.19)$$

где $\mathbf{F}_{01}$ внешняя сила в первой системе. И для силы квазиполя во второй системе

$$\mathbf{F}_{q2}(\mathbf{r}_2, t) = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\,\frac{\nabla^2 a_2(\mathbf{r}_2, t)}{a_2(\mathbf{r}_2, t)} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\,\frac{\nabla^2 a_1(\mathbf{r}_2+\mathbf{S}, t)}{a_1(\mathbf{r}_2+\mathbf{S}, t)} = \\ = \mathbf{F}_{q1}(\mathbf{r}_2+\mathbf{S}, t), \quad (\text{П3.20})$$

где $\mathbf{F}_{q1}$ — силы квазиполя в первой системе.

На основании сказанного можно сформулировать следующее *правило преобразования координат*.

Если в некоторой системе координат, которую назовем первой, волновая функция $\psi_1(\mathbf{r}_1, t) = a_1(\mathbf{r}_1, t)\, e^{i\beta_1(\mathbf{r}_1, t)}$ *удовлетворяет уравнению Шредингера*

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi_1(\mathbf{r}_1 t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1(\mathbf{r}_1, t) + \psi_1(\mathbf{r}_1, t)\, U_1(\mathbf{r}_1, t), \qquad (\text{П3.21})$$

то во второй системе координат, для которой

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{S}(t), \qquad (\text{П3.22})$$

эта волновая функция будет

$$\psi_2(\mathbf{r}_2, t) = a_2(\mathbf{r}_2, t)\, e^{i\beta_2(\mathbf{r}_2, t)},$$

где

$$a_2(\mathbf{r}_2, t) = a_1(\mathbf{r}_1, t), \qquad (\text{П3.23})$$

$$\beta_2(\mathbf{r}_2, t) = \beta_1(\mathbf{r}_1, t) - \frac{m}{\hbar}\,\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}\mathbf{r}_2 - \frac{m}{2\hbar}\int\left(\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}\right)^2 dt, \qquad (\text{П3.24})$$

$$\nabla\beta_2(\mathbf{r}_2, t) = \nabla\beta_1(\mathbf{r}_1, t) - \frac{m}{\hbar}\,\frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}. \qquad (\text{П3.25})$$

Здесь и далее индекс 1 *соответствует первой системе координат, индекс* 2 — *второй.*

$\psi_2(\mathbf{r}_2, t)$ *будет удовлетворять уравнению Шредингера* (*П3.21*), *в котором индексы* 1 *заменены на индексы* 2 *и*

$$U_2(\mathbf{r}_2, t) = U_1(\mathbf{r}_1, t) + \frac{m}{\hbar}\,\frac{\partial^2\mathbf{S}}{\partial t^2}\mathbf{r}_2. \qquad (\text{П3.26})$$

Для скоростей Т-частицы и элементов квазиполя во второй системе координат будем иметь

$$\mathbf{V}_2(\mathbf{r}_2, t) = \mathbf{V}_1(\mathbf{r}_1, t) + \frac{\partial\mathbf{S}}{\partial t}. \qquad (\text{П3.27})$$

И, наконец, для силы внешнего поля

$$\mathbf{F}_{02}(\mathbf{r}_2, t) = \mathbf{F}_{01}(\mathbf{r}_1, t) + m\,\frac{\partial^2\mathbf{S}}{\partial t^2} \qquad (\text{П3.28})$$

и сил квазиполя

$$\mathbf{F}_{q2}(\mathbf{r}_2, t) = \mathbf{F}_{q1}(\mathbf{r}_1, t). \qquad (\text{П3.29})$$

Приложение 4

Будем считать N функций ψ_k линейно независимыми, если при любых постоянных c_k, из которых хотя бы одна не равнялась нулю, функция

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{N} c_k \psi_k(\mathbf{r}) \qquad (\text{П}4.1)$$

не может равняться нулю при любых значениях $\mathbf{r}$.

Теорема. *Если имеются N линейно независимых функций $\psi_k(\mathbf{r})$, то можно выбрать N взаимно ортогональных функций $\psi'_k(\mathbf{r})$, с помощью которых любая из функций вида* (П4.1) *может быть представлена выражением*

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{N} c'_k \psi'_k(\mathbf{r}). \qquad (\text{П}4.2)$$

Для доказательства предложим следующую процедуру образования ψ'_k. Возьмем $\psi'_1 = \psi_1$. Дальше последовательно, в порядке возрастания k, будем определять ψ'_k по формуле

$$\psi'_k = \psi_k - \sum_{l=1}^{k-1} \psi'_l \frac{\int \psi_k \psi'^*_l \, dq}{\int \psi'_l \psi'^*_l \, dq}. \qquad (\text{П}4.3)$$

Здесь интегралы берутся по всему пространству.

Для $k = 2$ получим

$$\psi'_2 = \psi_2 - \psi'_1 \frac{\int \psi_2 \psi'^*_1 \, dq}{\int \psi'_1 \psi'^*_1 \, dq},$$

ψ'_2 будет ортогональна ψ'_1, поскольку

$$\int \psi'_2 \psi'^*_1 \, dq = \int \psi_2 \psi'^*_1 \, dq - \int \psi_1 \psi'^*_1 \, dq \frac{\int \psi_2 \psi'^*_1 \, dq}{\int \psi'_1 \psi'^*_1 \, dq} = 0.$$

Далее докажем, что ψ'_k будет ортогональна всем ψ'_m при $m < k$. Действительно,

$$\int \psi'_k \psi'^*_m \, dq = \int \psi_k \psi'^*_m \, dq - \sum_{l=1}^{k-1} \psi'_l \psi'^*_m \, dq \frac{\int \psi_k \psi'^*_l \, dq}{\int \psi'_l \psi'^*_l \, dq} =$$

$$= \int \psi_k \psi'^*_m \, dq - \int \psi_m{}' \psi'^*_m \, dq \frac{\int \psi_k \psi'^*_m \, dq}{\int \psi'_m \psi'^*_m \, dq} = 0.$$

Тут было принято, что

$$\int \psi'_l \psi'^*_m \, dq = 0 \qquad (\text{П}4.4)$$

при $l < k$, $m < k$ и $l \neq m$, поэтому в сумме останется только один член с $l = m$. Таким образом, если (П4.4) справедливо для $l < k$ и $m < k$, то оно будет справедливо и для $l \leqslant k$ и $m \leqslant k$. Как было показано, оно справедливо для $k = 2$. Таким образом оно будет справедливо и для всех $k \leqslant N$.

Представленное доказательство будет непригодно, если одно из ψ'_l окажется равным нулю, так как в этом случае в формуле (П4.3) в знаменателе окажется ноль. Но это невозможно по условиям теоремы. Действительно, пусть при $m < k \quad \psi'_m \neq 0$, а $\psi'_k = 0$ для всех $\mathbf{r}$. Тогда из (П4.3) получим

$$0 = \psi_k - \sum_{m=1}^{k-1} \psi'_m \frac{\int \psi_k \psi'^*_m \, dq}{\int \psi'_m \psi'^*_m \, dq}. \tag{П4.5}$$

В этом выражении дроби будут постоянными конечными величинами, и при замене ψ'_m через ψ_m мы получим выражение типа (П4.1), которое, по условию теоремы, не должно равняться нулю.