

лучевой трубки входят также КЭ на основе водородного генератора.

**Единица длины (метр).** В течение более 20 лет единица длины поддерживалась с помощью КЭ на основе длины волны  $\lambda$  излучения  $^{86}\text{Kr}$ . С 1983 12-й Генеральной конференцией по мерам и весам рекомендовано новое определение метра, основанное на соотношении  $\lambda = c\nu$  и канонизированном значении скорости света в вакууме  $c = 299\,792\,458$  м/с. Для реализации эталона используют, как правило, гелий-неоновый лазер, частота генерации к-рого  $\nu$  измеряется с помощью КЭ секунды. Это позволяет связать эталоны единиц времени и длины (см. *Оптические стандарты частоты*).

**Единица силы тока (ампер)** воспроизводится измерением магн. индукции методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) на протонах или лёгких ядрах (напр.,  $^4\text{He}$ ). Магн. поле создаётся эталонной катушкой точно измеренной геом. конфигурации с рассчитываемым коэф. преобразования тока в индукцию поля. Воспроизведение ампера реализуется в соответствии с соотношением

$$I = \frac{\omega}{K\gamma'} \quad (1)$$

где  $\omega$  — частота сигнала ЯМР,  $K$  — постоянная эталонной катушки,  $\gamma'$  — гиромагнитное отношение ядра. Для протонов  $\gamma'$  отличается от идеального значения  $\gamma = 2\mu_p/\hbar$  ( $\mu_p$  — магн. момент протона) поправками  $\sim 10^{-6}$  вследствие экранировки протона в сферич. объёме  $\text{H}_2\text{O}$ .

**Единица эдс (вольт)** воспроизводится КЭ, основанном на Джозефсона эффекте [1, 3]; при этом используется соотношение

$$V = Nv \frac{h}{2e} \quad (2)$$

где  $N$  — номер ступеньки на вольт-амперной характеристике джозефсоновского перехода ( $N \sim 10^8$ , целое число),  $v$  — частота эл.-магн. излучения, подаваемого на переход. Значение  $(h/2e)$  устанавливается в результате согласования значений фундам. констант [2]. Согласованное (1986) значение [4]:  $h/2e = 2,06783461(61) \times 10^{-15}$  Вб.

**Единица электрич. сопротивления (ом).** В КЭ используется квантовый Холла эффект. Воспроизводимое квантованное значение сопротивления выражается соотношением

$$R = \frac{h}{pe^2} \quad (3)$$

где  $p$  — целое число (номер плато в квантовом эффекте Холла), отношение  $h/e^2$  связано с безразмерной постоянной тонкой структуры:

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{h}{e^2} \cdot \frac{2}{\mu_0 c}$$

где  $\mu_0$  — магн. проницаемость вакуума. Значение  $\alpha$  может быть установлено независимо от размеров единиц, поддерживаемых эталонами, напр. из измерений аномального магн. момента электрона. Согласованное (1986) значение:  $\alpha^{-1} = 137,0359895(61)$  [4].

**Методы измерений с наивысшей точностью и минимальным порогом чувствительности.** Наиб. широко применяется эффект Джозефсона. На основе сверхпроводящих квантовых интерферометров (*сквидов*) разработаны методы измерений, порог чувствительности к-рых снижен вплоть до ограничений фундам. характера. Сюда относятся, напр., пиковольтметры (порог чувствительности  $10^{-14}$  В), пикоамперметры ( $10^{-16}$  А), веберметр ( $10^{-19}$  Вб, т. е.  $\sim 10^{-6}$  кванта потока). Из др. КЭ следует отметить эталоны, основанные на туннельном эффекте, позволяющем в сканирующем туннельном микроскопе достичь при исследовании профиля поверхности разрешающей способности порядка атомных размеров.

*Лит.:* 1) Современная система эталонов единиц электрических величин на основе фундаментальных физических констант и стабильных физических эффектов, М., 1977; 2) Квантовая метрология и фундаментальные константы. Сб. ст., пер. с англ., М., 1981; 3) Слабая сверхпроводимость. Квантовые интерферометры и их применения. [Сб. ст.], пер. с англ., М., 1980; 4) Cohen E. R., Taylor B. N., The 1986 adjustment of the fundamental physical constants, «Revs Mod. Phys.», 1987, v. 59, p. 1121; 5) Краснополь И. Я., Пудалов В. М., Семенчик С. Г., Физический репер сопротивления на основе квантового эффекта Холла, «Приборы и техн. эксперимента», 1987, № 6, с. 5. В. М. Пудалов.

## КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

### Содержание

Место К. м. среди других наук о движении . . . . .	274
История создания К. м. . . . .	274
Физические основы К. м. . . . .	276
Корпускулярно-волновой дуализм . . . . .	276
Принцип суперпозиции состояний . . . . .	276
Вероятностное описание в К. м. . . . .	278
Математический аппарат К. м. . . . .	278
Векторы состояния и линейные эрмитовы операторы . . . . .	278
Основные постулаты К. м. . . . .	279
Представления вектора состояния . . . . .	280
Эволюция системы во времени . . . . .	280
Принцип соответствия и временное уравнение Шрёдингера . . . . .	280
Среднее значение физической величины. Дисперсия . . . . .	281
Соотношение неопределённостей . . . . .	281
Производная физической величины по времени . . . . .	282
Перестановочные соотношения и классические скобки Пуассона . . . . .	283
Симметрия гамильтониана и сохраняющиеся величины . . . . .	283
Обратимость уравнения Шрёдингера во времени . . . . .	284
Плотность потока вероятности . . . . .	284
Стационарные состояния . . . . .	284
Соотношение неопределённостей для энергии и времени . . . . .	285
Стационарное уравнение Шрёдингера . . . . .	285
Движение в периодическом поле . . . . .	287
Движение в центральном поле . . . . .	288
Квазистационарные состояния . . . . .	289
Спин. Полный момент . . . . .	289
Системы многих частиц. Тонкие частицы . . . . .	290
Обменное взаимодействие. Химическая связь . . . . .	291
Приближённые методы К. м. . . . .	292
Парадоксы К. м. . . . .	292

**К. м. (волновая механика)** — теория, устанавливающая способ описания и законы движения физ. систем, для к-рых величины, характеризующие систему и имеющие размерность *действия*, оказываются сравнимыми с постоянной Планка  $h$ . Этому условию удовлетворяет, как правило, движение микрочастиц (электронов в атоме, атомов в молекулах, нуклонов в ядрах и т. д.). Однако в нек-рых случаях специфич. квантовыми свойствами обладают макроскопич. системы как целое (см. *Макроскопические квантовые эффекты*).

К. м. представляет собой систему понятий и адекватный ей матем. аппарат, необходимый и достаточный для описания всех наблюдаемых свойств соответствующих систем и их движения.

Законы К. м. составляют фундамент наук о строении вещества. Они позволили выяснить строение электронных оболочек атомов и расшифровать атомные и молекулярные спектры, установить природу хим. связи, объяснить периодич. систему элементов Менделеева, понять строение и свойства атомных ядер. Поскольку свойства макроскопич. тел определяются движением и взаимодействием частиц, из к-рых они состоят, законы К. м. объясняют многие макроскопич. явления, напр. температурную зависимость и величину теплоёмкости макроскопич. систем (газов, твёрдых тел). Законы К. м. лежат в основе теории строения твёрдых тел (металлов, диэлектриков, полупроводников) и её многочисл. техн. приложений. Только на основе К. м. удалось последовательно объяснить магн. свойства веществ и создать теорию *ферромагнетизма* и *антиферромагнетизма*. К. м. естеств. образом решила ряд проблем классич. статистич. физики, напр. обосновала теорему Нерста (см. *Третье начало термодинамики*), разрешила *Гиббса парадокс*. Важное значение имеют макроскопич. квантовые эффекты, проявляющиеся,

в частности, в таких свойствах *квантовых жидкостей*, как *сверхтекучесть* и *сверхпроводимость* (см. также *Джозефсона эффект*, *Квантовый Холла эффект*). На основе К. м. удалось объяснить природу *белых карликов*, *нейтронных звёзд*, выяснить механизм протекания *термоядерных реакций* в Солнце и звёздах.

Ряд крупнейших техн. достижений 20 в. основан по существу на специфич. явлениях К. м., не имеющих аналогов в классич. механике. Так, квантовомеханич. резонансное рассеяние частиц (обуславливающее тот факт, что эфф. сечение поглощения нейтронов может быть на неск. порядков больше геом. размеров ядер) весьма существенно для работы ядерных реакторов, а явление квантовомеханич. туннелирования (подбарьерный переход) позволяет осуществить в земных условиях термоядерные реакции (в т. ч. УТС), получать большие токи (см. *Автоэлектронная эмиссия*), а также использовать в техн. целях туннельные переходы в твёрдых телах (см., напр., *Туннельный диод*, *Сканирующей туннельный микроскоп*).

Фундамент *квантовой электроники* составляет квантовомеханич. теория излучения. Законы К. м. используются при целенаправл. поиске и создании новых материалов (особенно магнитных, полупроводниковых и сверхпроводящих). Т. о., открытие законов К. м. явилось одним из важнейших факторов, приведших к совр. научно-техн. революции, а К. м. стала в значит. мере «инженерной» наукой, знание к-рой необходимо не только физикам-исследователям, но и инженерам.

### Место К. м. среди других наук о движении

В нач. 20 в. выяснилось, что классич. механика Ньютона имеет огранич. область применимости и нуждается в обобщении. Во-первых, она неприменима при скоростях движения тел, сравнимых со скоростью света. Здесь её заменила релятивистская механика, построенная на основе специальной (частной) теории относительности Эйнштейна (см. *Относительности теория*). Релятивистская механика включает в себя Ньютонову (нерелятивистскую) механику как частный случай. (Ниже термин «классич. механика» будет объединять Ньютонову и релятивистскую механику.)

Для классич. механики в целом характерно описание частиц путём задания их координат и скоростей в зависимости от времени. Такому описанию соответствует движение частиц по вполне определ. траекториям. Однако опыт показал, что это описание не всегда справедливо в случае частиц с очень малой массой (микро-частиц). В этом состоит второе ограничение применимости механики Ньютона. Более общее описание движения даёт К. м., к-рая включает в себя как частный случай классич. механику. К. м. делится на нерелятивистскую, справедливую при малых скоростях, и релятивистскую, удовлетворяющую требованиям спец. теории относительности. В статье изложены основы нерелятивистской К. м. (однако нек-рые общие положения относятся к квантовой теории в целом). Нерелятивистская К. м. (как и механика Ньютона для своей области применимости) — вполне законченная и логически непротиворечивая теория, способная в области своей применимости количественно описать в принципе любое физ. явление. Напротив, релятивистская К. м., за исключением отд. частных задач, не может считаться замкнутой теорией, а представляет собой составную часть *квантовой теории поля* (со всеми присущими ей трудностями). Это связано с тем, что при взаимодействии релятивистских частиц в игру неизбежно вовлекаются полевые степени свободы.

Соотношение между классической механикой и К. м. определяется универс. мировой постоянной — постоянной Планка  $h \approx 6,62 \cdot 10^{-27}$  эрг·с (или  $\hbar = h/2\pi \approx 1,05 \times 10^{-27}$  эрг·с), наз. также к в а н т о м д е й с т в и я. Если в условиях данной задачи физ. величины размерности действия значительно больше  $\hbar$  (так что  $\hbar$  можно

считать очень малой величиной), то применима классич. механика, — именно это условие и является критерием её применимости.

### История создания К. м.

В нач. 20 в. были обнаружены две (казалось, не связанные между собой) группы явлений, свидетельствующих о неприменимости механики Ньютона и классич. электродинамики к процессам взаимодействия света с веществом и к процессам, происходящим в атоме. Первая группа явлений была связана с установленной на опыте двойственной природой света — ду а л и з м о м с в е т а (см. ниже), вторая — с невозможностью объяснить на основе классич. представлений существование устойчивых атомов, а также их оптич. спектры. Установление связи между этими группами явлений и попытки их объяснения и привели, в конечном счёте, к открытию законов К. м.

Первые квантовые представления (в т. ч. величина  $h$ ) были введены в 1900 М. Планком (M. Planck) в работе, посвящённой теории теплового излучения тел (см. *Планка закон излучения*). Существовавшая к тому времени теория теплового излучения, построенная на основе классич. электродинамики и статистич. физики, приводила к бессмысленному выводу о невозможности термодинамич. равновесия между излучением и веществом, т. к. вся энергия должна перейти в излучение. Планк разрешил это противоречие и получил результаты, прекрасно согласующиеся с опытом, предположив, что свет испускается не непрерывно (как это следовало из классич. теории излучения), а определ. дискретными порциями энергии — к в а н т а м и. Величина такого кванта энергии пропорциональна частоте света  $\nu$  и равна:  $\epsilon = h\nu$ . Попытки обосновать гипотезу Планка в рамках классич. физики оказались безуспешными. Несовместимость гипотезы Планка с классическими представлениями отмечалась, в частности, А. Пуанкаре (H. Poincaré).

От работы Планка можно проследить две взаимосвязанные линии развития, завершившиеся к 1927 окончат. формулировкой К. м. в двух её формах. Первая начинается с работы А. Эйнштейна (1905), в к-рой была дана теория *фотоэффекта*. Развивая идею Планка, Эйнштейн предположил, что свет не только испускается и поглощается, но и распространяется квантами, т. е. что дискретность присуща самому свету: свет состоит из отд. порций — световых квантов, названных позднее *фотонами*. Энергия фотона  $\epsilon = h\nu$ . На основании этой гипотезы Эйнштейн объяснил установленные на опыте закономерности фотоэффекта, к-рые противоречили классической (базирующейся на классич. электродинамике) теории света.

Дальнейшее доказательство корпускулярного характера света было получено в 1922 А. Комптоном (A. Compton), показавшим экспериментально, что при рассеянии рентгеновских лучей свободными электронами происходит изменение их частоты в соответствии с законами упругого столкновения двух частиц — фотона и электрона (см. *Комптона эффект*). Кинематика столкновения определяется законами сохранения энергии и импульса, причём фотону наряду с энергией следует приписать импульс  $p = h/\lambda = h\nu/c$  (где  $\lambda$  — длина световой волны). Энергия и импульс фотона связаны соотношением  $\epsilon = cp$ , справедливым в релятивистской механике для частицы с нулевой массой покоя. Т. о., было доказано экспериментально, что наряду с известными волновыми свойствами (проявляющимися в интерференции, дифракции и поляризации) свет обладает и корпускулярными свойствами. В этом состоит дуализм света, его корпускулярно-волновая природа. Дуализм содержится уже в ф-ле  $\epsilon = h\nu$ , не позволяющей выбрать к.-л. одну из двух концепций: энергия  $\epsilon$  характеризует частицу, а частота  $\nu$  является характеристикой волны. Возникло формальное логич. противоречие: для объяснения одних явлений необходимо

было считать, что свет имеет волновую природу, а для объяснения других — корпускулярную. По существу разрешение этого противоречия и привело к созданию физ. основ К. м.

В 1924 Л. де Бройль (L. de Broglie), пытаясь найти объяснение постулированным в 1913 Н. Бором (N. Bohr) условиям квантования атомных орбит (см. ниже), выдвинул гипотезу о всеобщности *корпускулярно-волнового дуализма*. Согласно де Бройлю, каждой частице, независимо от её природы, следует поставить в соответствие волну, длина  $k$ -рой  $\lambda$  связана с импульсом частицы  $p$  соотношением  $\lambda = h/p$ . По этой гипотезе не только фотоны, но и все «обыкновенные частицы» (электроны, протоны и др.) обладают волновыми свойствами (см. *Волны де Бройля*),  $k$ -рые, в частности, должны проявляться в *дифракции частиц*. В 1927 К. Дэвиссон (C. Davisson) и Л. Джермер (L. Germer) впервые наблюдали дифракцию электронов. Позднее волновые свойства были обнаружены и у др. частиц и справедливость ф-лы де Бройля была подтверждена экспериментально. В 1926 Э. Шрёдингер (E. Schrödinger) предложил ур-ние, описывающее поведение таких «волн» во внеш. силовых полях, а М. Борн (M. Born) дал им статистическую, вероятностную интерпретацию. Так возникла *волновая механика*. Волновое *Шрёдингера уравнение* является осн. ур-нием нерелятивистской К. м. В 1928 П. Дирак (P. A. M. Dirac) сформулировал релятивистское ур-ние, описывающее движение электрона во внеш. силовом поле; *Дирака уравнение* стало одним из основных ур-ний релятивистской К. м.

Вторая линия развития (также являющаяся обобщением гипотезы Планка) начинается с работы Эйнштейна (1907), посвящённой теории теплоёмкости твёрдых тел. Эл.-магн. излучение, представляющее собой набор эл.-магн. волн разл. частот, динамически эквивалентно некоторому набору *осцилляторов*. Испускание или поглощение волн эквивалентно возбуждению или, напротив, переходу в основное (невозбуждённое) состояние соответствующих осцилляторов. Тот факт, что испускание и поглощение эл.-магн. излучения веществом происходят квантами с энергией  $h\nu$ , можно выразить так: осциллятор поля не может обладать произвольной энергией, он может иметь только определ. дискретные уровни энергии, расстояния между  $k$ -рыми равно  $h\nu$ . Эйнштейн обобщил идею квантования энергии осциллятора эл.-магн. поля на осциллятор произвольной природы. Поскольку тепловое движение твёрдых тел сводится к колебаниям атомов, то и твёрдое тело динамически эквивалентно набору осцилляторов. Энергия таких осцилляторов тоже квантована, т. е. разность соседних уровней энергии должна равняться  $h\nu$ , где  $\nu$  — частота колебаний атомов. Теория Эйнштейна, уточнённая П. Дебаем (P. Debye), Борном и Т. Карманом (Th. Karman), сыграла выдающуюся роль в развитии теории твёрдых тел.

В 1913 Бор применил идею квантования энергии к планетарной модели строения атома,  $k$ -рая вытекала из результатов опытов Э. Резерфорда (E. Rutherford, 1911). Согласно этой модели, в центре атома находится положительно заряж. ядро, в  $k$ -ром сосредоточена почти вся масса атома; вокруг ядра вращаются по орбитам отрицательно заряж. электроны. Рассмотрение такого движения на основе классич. представлений приводило к парадоксальному результату — невозможности существования стабильных атомов: согласно классич. электродинамике, электрон не может устойчиво двигаться по орбите, поскольку вращающийся электрич. заряд должен излучать эл.-магн. волны и, следовательно, терять энергию; радиус его орбиты должен непрерывно уменьшаться, и за время  $\sim 10^{-11}$  с электрон должен упасть на ядро. Это означало, что законы классич. физики неприменимы к движению электронов в атоме, т. к. атомы не только существуют, но и весьма устойчивы.

Для объяснения устойчивости атомов Бор предположил, что излучение электрона в атоме подчиняется квантовым законам, т. е. происходит дискретными порциями. Он постулировал, что из всех орбит, допускаемых ньютоновой механикой для движения электрона в электрич. поле атомного ядра, реально осуществляются лишь те,  $k$ -рые удовлетворяют определ. усл о в и я м к в а н т о в а н и я, требующим [как показал позже А. Зоммерфельд (A. Sommerfeld)], чтобы величина действия для классич. орбиты была целым кратным постоянной Планка  $h$ . Такие орбиты были названы стационарными. Им отвечают определ. уровни энергии. Далее Бор постулировал, что при движении по стационарным орбитам электрон не испускает световых волн. Излучение происходит лишь при переходе электрона с одной стационарной орбиты на другую, т. е. с одного уровня энергии  $\mathcal{E}_i$  на другой, с меньшей энергией,  $\mathcal{E}_k$ , и при этом рождается квант света с энергией  $h\nu = \mathcal{E}_i - \mathcal{E}_k$ . Так возникает линейчатый спектр атома. Исходя из этих постулатов, Бор получил правильную ф-лу для частот спектральных линий атома водорода (и водородоподобных атомов), охватывающую совокупность открытых ранее эмпирич. ф-л (см. *Спектральная серия*). При этом числ. значение *Ридберга постоянной*,  $k$ -рое Бор выразил через фундам. константы  $m$ ,  $e$ ,  $h$  ( $m$  и  $e$  — масса и заряд электрона), оказалось в прекрасном согласии с её значением, измеренным на опыте. Размеры атома в теории Бора также выражались через фундам. константы: радиус нижней боровской орбиты  $a = h^2/me^2 \approx 0,5 \cdot 10^{-8}$  см совпадал с эксперим. оценками размеров атома.

Т. о., Бор, используя квантовую постоянную  $h$ , отражающую дуализм света, показал, что эта величина определяет также и движение электронов в атоме. Впоследствии стало ясно, что этот вывод — одно из следствий универсальности корпускулярно-волнового дуализма. Существование дискретных уровней энергии в атомах было непосредственно установлено *Франка—Герца опытами* (1913—14).

Успех теории Бора, как и предыдущие успехи теории квантов, был достигнут за счёт нарушения логич. цельности классич. теории: с одной стороны, использовалась Ньютонова механика, с другой, — привлекались чуждые ей искусств. правила квантования. Кроме того, теория Бора оказалась не в состоянии объяснить движение электронов в сложных атомах (даже в атоме гелия), возникновение хим. связи между атомами, приводящей к образованию молекул, и др. «Полуклассич.» теория Бора не могла также ответить на вопрос, как движется электрон при переходе с одного уровня энергии на другой. Дальнейшая разработка вопросов теории атома привела к убеждению, что движение электрона в атоме нельзя описывать в терминах (понятиях) классич. механики (как движение по определ. траектории, или орбите), что вопрос о движении электрона между стационарными орбитами несовместим с характером законов, определяющих поведение электронов в атоме, и что необходима новая теория, в  $k$ -рую входили бы только величины, относящиеся к нач. и конечному стационарному состояниям атома. В 1925 В. Гейзенберг (W. Heisenberg) построил такую форм. схему, в  $k$ -рой вместо координат и скоростей электрона фигурировали некие абстрактные алгебр. величины — матрицы; связь матриц с наблюдаемыми величинами (уровнями энергии и интенсивностями квантовых переходов) давалась простыми непротиворечивыми правилами. Работа Гейзенберга была развита Борном и П. Йорданом (P. Jordan). Так возникла *матричная механика*. Вскоре после появления ур-ния Шрёдингера была показана матем. эквивалентность волновой (основанной на ур-нии Шрёдингера) и матричной механики.

Большую роль в создании К. м. сыграли работы Дирака, выдвинувшего важнейшую роль принципа суперпозиции состояний. Окончат. формирование К. м. как последоват. теории с ясными физ. основами произошло

после работы Гейзенберга (1927), в к-рой было сформулировано *неопределённости соотношение* — важнейшее соотношение, освещающее физ. смысл ур-ний К. м., её связь с классич. механикой и ряд др. принципиальных вопросов К. м. Эта работа была продолжена и обобщена в трудах Бора и Гейзенберга.

Детальный анализ спектров атомов привел к представлению [введённому Дж. Уленбеком (G. Uhlenbeck) и С. Гаудсмитом (S. Goudsmit)] и развитому В. Паули (W. Pauli) о том, что электроню кроме заряда и массы должна быть приписана ещё одна внутр. характеристика — *спин*. [Ранее представление о внутр. моменте электрона развивалось Р. Кронигем (R. Kronig), но его работа не была опубликована.] Важную роль сыграл открытый Паули (1925) т. н. принцип запрета (*Паули принцип*, см. ниже), имеющий фундам. значение в теории атомов, молекул, ядер, твёрдых тел.

В течение короткого времени К. м. была с успехом применена для описания широкого круга явлений. Были созданы теории атомных спектров, строения молекул, хим. связи, периодич. системы элементов, металлич. проводимости и ферромагнетизма. Дальнейшее принципиальное развитие квантовой теории связано гл. обр. с релятивистской К. м. Нерелятивистская К. м. развивалась в осн. в направлении охвата разнообразных конкретных задач физики атомов, молекул, твёрдых тел, а также совершенствования матем. аппарата и разработки количеств. методов решения разл. задач. Вместе с тем не прекращалась разработка и принципиальных проблем К. м. — альтернативных схем её интерпретации (в т. ч. с помощью *скрытых параметров*), теории измерений (*квантовые неразрушающие измерения*) и т. д., продолжали возникать и новые разделы и методы К. м. — теория движения в нерегулярном поле (*андерсоновская локализация*), теория комплексного углового момента (*Редже полюсов метод*), суперсимметричная К. м. (см. *Суперсимметрия*) и др. Р. Фейнманом (R. Feynman) была предложена новая формулировка К. м. в виде т. н. интегралов по траекториям (см. *Функционального интеграла метод*).

### Физические основы К. м.

**Корпускулярно-волновой дуализм.** Физ. основой К. м. является корпускулярно-волновой дуализм — всеобщее и универс. свойство материи, согласно к-рому не только любой волне с частотой  $\omega$  и волновым вектором  $k$  отвечает частица с энергией  $\mathcal{E}$  и импульсом  $p$ , соответственно равными:

$$\mathcal{E} = \hbar\omega, \quad p = \hbar k, \quad (1)$$

но и, обратно, с любой частицей, обладающей энергией  $\mathcal{E}$  и импульсом  $p$ , связана волна, частота и волновой вектор к-рой определяются соотношениями (1). Наличие у частиц волновых свойств доказано в огромном числе экспериментов. Интерференция и дифракция наблюдались для электронов, нейтронов, атомных ядер, атомов, молекул. Волновые свойства нейтронов лежат в основе *нейтронной оптики* (имеющей, в частности, прикладное значение) и широко используются при изучении структуры вещества (см. *Нейтронграфия*). Т. о., теория движения микрочастиц с необходимостью обязана учитывать наличие у них волновых свойств. Это с неизбежностью ведёт к отказу от нек-рых классич. представлений, сформировавшихся в результате наблюдения движения макроскопич. тел. В частности, наблюдение волновых явлений несовместимо с представлением о движении частицы по определённой классич. траектории.

В качестве примера рассмотрим дифракцию света на двух щелях (рис. 1). Если характерные размеры в рассматриваемой задаче соизмеримы с длиной волны света (а источник  $S$  можно считать точечным), то на экране Э будет наблюдаться интерференц. полосы. При корпус-

кулярной интерпретации данного результата это означает, что в точку  $M$ , отвечающую минимуму интерференции, фотоны не попадают. С точки зрения классич. представлений движения частиц по траекториям, фотоны не должны попадать в точку  $M$  ни по пути  $SaM$ , ни по пути  $SbM$ . Это, однако, противоречит след. опыту: закрывая щель  $b$ , можно наблюдать нек-рую освещённость в точке  $M$ , что указывает на возможность распространения фотонов по пути  $SaM$ . Аналогично, закрывая щель  $a$ , можно убедиться, что фотоны могут распространяться и по пути  $SbM$ . Исходя из классич. представлений о

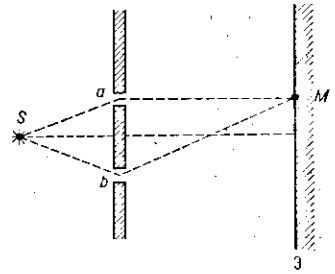


Рис. 1.

движении частиц, нельзя объяснить, почему фотоны, способные попадать в точку  $M$  как по пути  $SaM$ , так и по  $SbM$  в отдельности, не попадают в неё, когда оказывается возможным движение по обоим путям сразу. [Представление о том, что между фотонами, движущимися по разным путям, существует взаимодействие, обуславливающее интерференц. явления, опровергается опытом, из к-рого следует, что картина интерференции не зависит от интенсивности источника  $S$ . Более того, если вместо экрана использовать, напр., фотоэмульсию, накапливающую эффект, то при достаточно большой экспозиции интерференция будет наблюдаться при столь малой интенсивности источника, когда от него летят практически единичные фотоны. Образно говоря, каждый фотон интерферирует сам с собой, что и даёт в результате интерференц. картину (хотя попадание каждого отд. фотона на фотоэмульсию — случайно).] Причиной возникшего парадокса является предположение о том, что каждый фотон движется по волне и определяет траектории. Это предположение представляет собой необоснованное распространение понятия траектории (возникшего в результате наблюдения движения макроскопич. тел) на движение фотона, для к-рого оно не имеет места. Напротив, наблюдение интерференц. явлений [для осуществления к-рых необходимо по крайней мере два возможных пути движения фотонов (или к.-л. др. частиц)] указывает на то, что в этом случае нельзя считать, что частица движется по определ. траектории. Существенно, что соотношения (1), согласно к-рым с волной может быть сопоставлена частица, определяют лишь энергию и импульс этой частицы, не требуя её движения по к.-л. определ. траектории.

**Принцип суперпозиции состояний.** Для того чтобы устранить противоречие между корпускулярным и волновым описанием явлений (существующее в рамках классич. представлений о частицах как матер. точках, движущихся по определ. траекториям), оказывается необходимым спец. постулат — т. н. принцип суперпозиции состояний. Этот принцип позволяет описать волновые явления в терминах корпускулярных представлений ценой отказа от нек-рых классич. понятий, взятых из макроскопич. опытов и неприменимых к микропроцессам в квантовой области. Тем самым принцип суперпозиции состояний лежит в основе физ. содержания К. м. и определяет её матем. аппарат. К необходимости указанного принципа и его формулировке можно прийти, рассматривая конкретные примеры волновых процессов и попытку их интерпретации в терминах корпускулярных представлений. Рассмотрим 2 таких примера.

1. **Отражение и преломление волн.** Пусть волна  $\psi_0 = A_0 \exp(-i\omega t + ik_0 r)$  падает на границу двух сред, в результате чего возникает отражённая  $[\psi_1 = A_1 \exp(-i\omega t + ik_1 r)]$  и преломлённая  $[\psi_2 = A_2 \times \exp(-i\omega t + ik_2 r)]$  волны (рис. 2) ( $\omega$  — частота волны,  $k$  — соответствующие волновые векторы,  $A$  — ам-

плитуды). Неиспользуя граничные условия, волновая теория позволяет определить отношения  $A_1/A_0$  и  $A_2/A_0$  и, следовательно, найти коэф. отражения  $R = |A_1/A_0|^2$  и преломления  $D$  ( $R+D=1$ ) (см., напр., *Формулы*); для простоты используется лишь одна компонента волны).

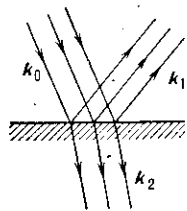


Рис. 2.

Рассмотрим это явление с корпускулярной точки зрения. Согласно корпускулярно-волновому дуализму, падающей волне отвечают частицы с импульсом  $p_0 = \hbar k_0$ , а отражённой и преломлённой волнам — частицы с импульсами  $p_1 = \hbar k_1$  и  $p_2 = \hbar k_2$ .

Поскольку частота волн при отражении и преломлении не меняется, частицы в каждой из волн имеют одинаковую энергию:  $\epsilon_0 = \epsilon_1 = \epsilon_2 = \hbar \omega$ . В мысленном (и в принципе осуществимом) эксперименте, когда на границу двух сред падает одна частица, возникает вопрос, в какой из волн — отражённой или преломлённой — она окажется. Специфика корпускулярного описания (в отличие от волнового описания, позволяющего падающей волне разделиться на две) не допускает разделения одной падающей частицы на две, т. к. в противном случае при одинаковых энергиях частиц не выполнялся бы, напр., закон сохранения энергии. Поэтому приходится считать, что частица оказывается случайным образом либо в отражённой, либо в преломлённой волне. Т. о., корпускулярное описание процесса требует прежде всего отказа от полностью детерминированного описания движения отд. частицы и вследствие этого предположения о том, что законы движения могут предсказывать лишь вероятности, с к-рыми частица отразится от границы раздела двух сред или пройдет через неё.

Обозначим символом  $|X\rangle$  состояние частицы, возникающее в результате взаимодействия падающей частицы с границей двух сред, а символами  $|p_1\rangle$  и  $|p_2\rangle$  — состояния частицы, отвечающие отражённой и преломлённой волнам (с единичными амплитудами). Поскольку в состоянии  $|X\rangle$  существует вероятность обнаружить частицу как в отражённой, так и в преломлённой волне, описание процесса в терминах корпускулярных представлений может быть получено, если предположить, что состояние  $|X\rangle$  является суперпозицией состояний  $|p_1\rangle$  и  $|p_2\rangle$ :

$$|X\rangle = c_1 |p_1\rangle + c_2 |p_2\rangle, \quad (2)$$

причём квадраты коэф.  $|c_1|^2$  и  $|c_2|^2$  пропорциональны вероятностям обнаружить частицу в соответствующих состояниях. Соотношение (2) по виду полностью аналогично суперпозиции отражённой и преломлённой волн на границе двух сред. Однако по своему смыслу суперпозиция состояний (2) принципиально отличается от суперпозиции к.-л. полей или волн. В то время как суперпозиция двух колебаний (напр., в упругой волне) имеет наглядный смысл и соответствует реальному сложению двух возможных колебаний, суперпозиция состояний (2) содержит альтернативные состояния и одной и той же частицы  $|p_1\rangle$  и  $|p_2\rangle$ , т. е. допускает возможность того, что частица одновременно находится в двух альтернативных (по отношению к выбранному способу регистрации) состояниях. Это является отказом от наглядных классич. представлений о частицах как матер. точках, движущихся по определ. траекториям. Необходимость такого отказа диктуется корпускулярно-волновым дуализмом, к-рый следует принять как надёжно установленное на опыте первичное свойство материи. При этом только вероятностная интерпретация суперпозиции двух альтернативных состояний (2) позволяет избежать логич. противоречия, т. к., согласно этой интерпретации, в каждом отд. эксперименте частица с определ. вероят-

ностью может быть обнаружена лишь в одном из этих состояний. Возможность нахождения частицы одновременно в разных состояниях реализуется только при повторных измерениях в ансамбле тождественно «приготовленных» состояний частицы. Разумеется, если система состоит из большого числа независимых тождеств. частиц (как, напр., монохроматич. световая волна, состоящая из большого числа одинаковых фотонов), измерение сразу даёт распределение частицы по возможным состояниям в соответствии с вероятностями обнаружить её в этих состояниях.

Аналогия (2) с суперпозицией волн может быть распространена далее. Между преломлённой и отражённой волнами существует разность фаз, определяемая условиями на границе двух сред. Она является наблюдаемой величиной и может быть измерена, если посредством к.-л. устройства осуществить интерференцию этих волн (или их интерференцию с падающей волной). Для того чтобы при корпускулярном описании сохранились фазовые соотношения между соответствующими волнами, необходимо в качестве коэф.  $c_1, c_2$  в соотношении (2) использовать комплексные числа и считать, что физ. смысл имеет разность фаз этих комплексных чисел. Т. о., для полного описания волнового явления на корпускулярном языке необходимо приписать физ. смысл не только вероятностям  $|c_1|^2, |c_2|^2$ , но и самим коэф.  $c_1, c_2$  — т. н. амплитудам вероятности — с точностью до общей фазы. При этом для измерения разности фаз амплитуд необходимы интерференц. опыты.

2. Поляризационные явления (суперпозиция состояний, отличающихся значениями внутр. характеристики частиц).

Поляризация представляет собой чисто волновое свойство, поскольку она определяется направлением колебаний в волне. Тем не менее частицам, соответствующим волне с определ. поляризацией, можно приписать дополнит. (внутр.) степень свободы, принимающую разл. значения для разных состояний поляризации. Для определенности рассмотрим фотоны, отвечающие световой волне. Опыт показывает, что угл. распределение электронов в фотоэффекте зависит от направления поляризации световой волны. А т. к. фотоэффект является чисто корпускулярным эффектом, то это означает, что фотон обладает дополнит. степенью свободы, связанной с поляризацией световой волны, к-рой он соответствует. Не рассматривая физ. смысла этой дополнит. степени свободы (связанной со спином фотона), можно убедиться, что она формально удовлетворяет всем требованиям, к-рые можно предъявить к наблюдаемой (физ.) величине (см. *Наблюдаемая*), а именно: а) у фотона существуют состояния, в к-рых указанная величина с достоверностью принимает вполне определ. (собственные) значения; б) результатом измерения этой величины в произвольном состоянии фотона всегда является одно из её собств. значений. Пусть устройство П (поляризатор) пропускает эл.-магн. волну с поляризацией, параллельной оси  $y$  или оси  $x$  (рис. 3, а; 3, б; двойными стрелками обозначены направления поляризации). Обозначим состояние фотона, прошедшего поляризатор в положении 3, а и 3, б, соответственно символами  $|p, \uparrow\rangle$  и  $|p, \rightarrow\rangle$ ,

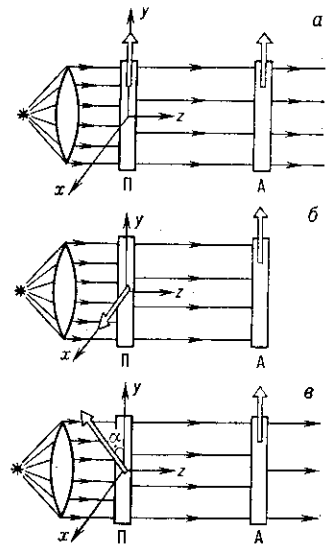


Рис. 3.

277

где  $p$  — импульс фотона, а направление стрелок отвечает поляризации волны вдоль осей  $y$  и  $x$ . Оба эти состояния являются собств. состояниями рассматриваемой внутр. переменной фотона, поскольку устройство  $A$  (анализатор), пропускающее (без поглощения) волну с поляризацией вдоль оси  $y$ , с достоверностью пропустит каждый одиночный фотон, «приготовленный» поляризатором в состоянии  $|p, \uparrow\rangle$  (рис. 3,  $a$ ), и поглотит каждый фотон в состоянии  $|p, \rightarrow\rangle$ . Рассмотрим теперь фотон, «приготовленный» поляризатором, пропускающим световую волну с поляризацией под углом  $\alpha$  к оси  $y$ ; соответствующее состояние обозначим символом  $|p, \nearrow\rangle$  (рис. 3,  $a$ ). Пройдет ли этот фотон анализатор  $A$  или будет в нём поглощён, с достоверностью предсказать нельзя. Т. о., в этом случае (как и в предыдущем примере) необходимо отказаться от полностью детерминированного описания движения каждого отд. фотона. Вместе с тем следует считать (имея в виду прохождение световой волны, содержащей большое число фотонов), что для отд. фотона существуют вполне определ. вероятности прохождения и поглощения в анализаторе. Адекватное этому матем. описание основывается на предположении, что состояние  $|p, \nearrow\rangle$  является линейной суперпозицией состояний  $|p, \uparrow\rangle$  и  $|p, \rightarrow\rangle$ :

$$|p, \nearrow\rangle = c_1 |p, \uparrow\rangle + c_2 |p, \rightarrow\rangle, \quad (3)$$

причём вероятности обнаружить фотон в состояниях  $|p, \uparrow\rangle$  и  $|p, \rightarrow\rangle$  равны  $|c_1|^2$  и  $|c_2|^2$ . (Согласно волновому описанию,  $|c_1|^2 = \cos^2\alpha$ ,  $|c_2|^2 = \sin^2\alpha$ .) Для линейно поляризованной под углом  $\alpha$  к оси  $y$  световой волны разность фаз в волнах, поляризованных вдоль оси  $y$  и перпендикулярно к ней, равна нулю. Соответственно коэф.  $c_1, c_2$  в (2) можно рассматривать как действит. числа [точнее,  $\text{Im}(c_1/c_2) = 0$ ]. В более общем случае эллиптически поляризованной световой волны состояние отвечающего ей фотона может быть описано суперпозицией (3) с комплексными коэф., разность фаз  $k$ -рых соответствует разности фаз колебаний вдоль осей  $x$  и  $y$ . Для измерения этой разности фаз необходимо, помимо анализатора, использовать спец. устройства (напр., пластинку в четверть длины волны). Т. о., как и в предыдущем примере, физ. смысл имеют амплитуды вероятности  $c_1, c_2$  (а не только вероятности  $|c_1|^2, |c_2|^2$ ), причём в общем случае они должны быть комплексными числами, разность фаз  $k$ -рых равна разности фаз соответствующих волн.

На основе рассмотренных (и мн. др.) примеров можно прийти к заключению, что для описания волновых явлений в терминах корпускулярных представлений необходимо принять в качестве постулата след. принцип: если система может находиться в состояниях  $|f_1\rangle, |f_2\rangle, \dots, |f_n\rangle$ , в  $k$ -рых физ. величина  $f$  принимает с достоверностью соответственно значения  $f_1, f_2, \dots, f_n$ , то система может находиться и в состоянии  $|X\rangle$ , являющемся линейной суперпозицией состояний  $|f_i\rangle$ :

$$|X\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |f_i\rangle, \quad (4)$$

при этом вероятность обнаружить систему в состоянии  $|f_i\rangle$  (т. е. получить в результате измерения физ. величины её значение  $f_i$ ) равна  $|c_i|^2$ .

Принцип суперпозиции состояний тривиально обобщается на бесконечное (счётное или континуальное) множество состояний.

**Вероятностное описание в К. м.** Отказ от полностью детерминированного описания движения отд. частицы и переход к вероятностному описанию, адекватному принципу суперпозиции состояний, позволяет совместить волновые и корпускулярные свойства материи. Вероятностное описание, т. о., отвечает фундам. свойствам движения микрообъектов и не связано с к.-л. неполнотой сведений о них. Подчеркнём, однако, что в его основе лежит чуждое классич. теории вероятностей понятие амплитуды вероятности, т. е. комплексного чис-

ла, у  $k$ -рого физ. смысл имеет не только квадрат модуля (равный вероятности), но и фаза (точнее, разность фаз двух амплитуд, соответствующая разности фаз волн). Именно использование амплитуд вероятности позволяет отразить волновые свойства объектов при их корпускулярном описании.

### Математический аппарат К. м.

**Векторы состояния и линейные эрмитовы операторы.** Принцип суперпозиции состояний диктует выбор матем. аппарата К. м. Первым осн. понятием К. м. является квантовое состояние. Согласно принципу суперпозиции состояний, суперпозиция любых возможных состояний системы, взятых с произвольными (комплексными) коэф., является также возможным состоянием системы. Т. о., состояния системы образуют линейное векторное пространство. Тем самым принцип суперпозиции состояний вскрывает матем. природу квантового состояния. Он указывает на то, что состояние системы должно описываться нек-рым вектором — *вектором состояния*, являющимся элементом линейного пространства состояний. Это позволяет использовать матем. аппарат, развитый для линейных (векторных) пространств. Вектор состояния обозначается, по Дираку, символом  $|\psi\rangle$ . Если система находится в состоянии, в  $k$ -ром физ. величина  $f$  имеет определ. (собств.) значение  $f_i$ , вектор состояния системы удобно обозначать символом  $|f_i\rangle$ . Кроме сложения и умножения на комплексное число, вектор  $|\psi\rangle$  может подвергаться ещё двум операциям. Во-первых, его можно проектировать на др. вектор, т. е. составить скалярное произведение  $|\psi\rangle$  с любым др. вектором состояния  $|\psi'\rangle$ ; оно обозначается как  $\langle\psi'|\psi\rangle$  и является комплексным числом, причём

$$\langle\psi'|\psi\rangle = \langle\psi|\psi'\rangle^*. \quad (5)$$

Скалярное произведение вектора  $|\psi\rangle$  с самим собой,  $\langle\psi|\psi\rangle$ , — положит. число; оно определяет длину, или норму, вектора. Норму вектора состояния удобно выбрать равной единице; его фазовый множитель произволен. Разл. состояния отличаются друг от друга направлением вектора состояния в пространстве состояний.

Во-вторых, можно рассмотреть операцию перехода от вектора  $|\psi\rangle$  к др. вектору  $|\psi'\rangle$ . Символически эту операцию можно записать как результат действия на  $|\psi\rangle$  нек-рого оператора  $\hat{L}$ :

$$\hat{L}|\psi\rangle = |\psi'\rangle. \quad (6)$$

При этом  $|\psi'\rangle$  может отличаться от  $|\psi\rangle$  длиной и направлением. В силу принципа суперпозиции состояний в К. м. особое значение имеют линейные операторы, в результате воздействия  $k$ -рых на суперпозицию произвольных векторов  $|\psi_1\rangle$  и  $|\psi_2\rangle$  получается, по определению, суперпозиция преобразованных векторов:

$$\begin{aligned} \hat{L}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) &= c_1\hat{L}|\psi_1\rangle + c_2\hat{L}|\psi_2\rangle = \\ &= c_1|\psi'_1\rangle + c_2|\psi'_2\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Важную роль для оператора  $\hat{L}$  играют такие векторы  $|\psi\rangle = |\psi_\lambda\rangle$ , для  $k$ -рых  $|\psi'\rangle$  совпадает по направлению с  $|\psi\rangle$ , т. е.

$$\hat{L}|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle, \quad (8)$$

где  $\lambda$  — число. Векторы  $|\psi_\lambda\rangle$  наз. *собственными* и *векторами* оператора  $\hat{L}$ , а числа  $\lambda$  — его *собственными значениями*. Собств. векторы  $|\psi_\lambda\rangle$  принято обозначать просто  $|\lambda\rangle$ , т. е.  $|\psi_\lambda\rangle \equiv |\lambda\rangle$ . Собств. значения  $\lambda$  образуют либо дискретный ряд чисел (тогда говорят, что оператор  $\hat{L}$  имеет дискретный спектр), либо непрерывный набор (непрерывный, или сплошной, спектр), либо частично дискретный, частично непрерывный (смешанный спектр).

Очень важным для К. м. класс операторов составляю-т линейные *эрмитовы операторы*, собств. значения

к-рых вещественны. Собств. векторы эрмитового оператора, принадлежащие разл. собств. значениям, ортогональны друг к другу, т. е.  $\langle \lambda | \lambda' \rangle = 0$ . Из них можно построить ортогональный базис в пространстве состояний. Удобно нормировать эти базисные векторы на единицу:  $\langle \lambda | \lambda \rangle = 1$ . Произвольный вектор  $|\psi\rangle$  можно разложить по этому базису:

$$|\psi\rangle = \sum_{\lambda} c_{\lambda} |\lambda\rangle; \quad c_{\lambda} = \langle \lambda | \psi \rangle. \quad (9)$$

При этом

$$\sum_{\lambda} |c_{\lambda}|^2 = \langle \psi | \psi \rangle, \quad (10)$$

если вектор  $|\psi\rangle$  нормирован на единицу, то  $\sum_{\lambda} |c_{\lambda}|^2 = 1$ .

Знак суммы в этих ф-лах означает суммирование по дискретному и интегрирование по непрерывному спектру значений  $\lambda$ . В последнем случае собств. векторы предполагаются нормированными на  $\delta$ -функцию:

$$\langle \lambda | \lambda' \rangle = \delta(\lambda - \lambda'). \quad (11)$$

Любой линейный оператор  $\hat{M}$  в выбранном базисе  $|\lambda\rangle$  может быть представлен матрицей:

$$M_{\lambda_i, \lambda_k} = \langle \lambda_i | \hat{M} | \lambda_k \rangle. \quad (12)$$

Если  $\hat{M}$  — эрмитов оператор, то  $M_{\lambda_i, \lambda_k} = M_{\lambda_k, \lambda_i}^*$ . (Для  $|\lambda_i\rangle$ , являющихся собств. векторами оператора  $\hat{M}$ , матрица  $M_{\lambda_i, \lambda_k}$  диагональна.) Если сопоставлять с произвольным вектором  $|\psi\rangle$  столбец из его коэффи-

циентов  $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$  в выбранном базисе (9), то действие оператора  $\hat{M}$  на  $|\psi\rangle$ ,  $\hat{M}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$ , сводится к матричному умножению:

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & \dots \\ M_{21} & M_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (13)$$

где столбец  $\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$  отвечает координатам вектора  $|\psi'\rangle$

в том же базисе:  $c'_i = \sum_k M_{ik} c_k$ .

Принципиальное значение для построения матем. аппарата К. м. имеет тот факт, что для каждой физ. величины существуют нек-рые выделенные состояния системы, в к-рых эта величина принимает вполне определ. (единств.) значение. По существу это свойство является определением измеримой (физ.) величины, а состояния, в к-рых физ. величина имеет определ. значение, наз. собственными состояниями этой величины.

Т. к. в результате измерений физ. величины  $f$  в любом произвольном состоянии системы  $|\psi\rangle$  должно получаться одно из собств. значений измеряемой величины  $f$ , то  $|\psi\rangle$  должно быть представимо в виде линейной комбинации собств. состояний этой физ. величины:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |f_i\rangle. \quad (14)$$

Т. о., совокупность собств. состояний физ. величины должна составлять (аналогично совокупности собств. векторов линейного эрмитова оператора) полный базис.

Амплитуды вероятности  $c_i$  представляют собой координаты вектора состояния  $|\psi\rangle$  в выбранном базисе (для простоты ограничимся системой с одной степенью свободы). Задание  $c_i$  полностью определяет вектор состояния системы. Совокупность коэф.  $c_i$  наз. в о л о в о й ф у н к ц и е й состояния в представлении величины  $f$ . Согласно вероятностной трактовке принципа супер-

позиции состояний, сумма  $\sum_i |c_i|^2 = \langle \psi | \psi \rangle$  должна быть равна единице, т. е. вектор состояния должен иметь конечную (приводимую к единице) норму. Между собств. состояниями физ. величины и собств. векторами линейного эрмитова оператора можно заметить аналогию: во-первых, каждое из них отвечает определ. числу (собств. значению физ. величины или собств. значению оператора), и, во-вторых, произвольный вектор линейного пространства должен быть представим в виде линейных комбинаций собств. векторов [ср. (14) и (9)]. Эта аналогия указывает на то, что физ. величине следует поставить в соответствие линейный эрмитов оператор, действующий в пространстве векторов состояния. На основании приведённых физ. соображений формулируются след. постулаты К. м.

**Основные постулаты К. м. I.** Состояние системы полностью описывается вектором состояния, к-рый должен быть однозначным (с точностью до произвольной фазы) и иметь конечную норму.

Полнота описания подразумевает, что задание вектора состояния в к.-л. определ. момент времени позволяет найти вектор состояния в любой др. момент времени и указать вероятности результатов измерения всех физ. величин в заданном состоянии системы.

Полное в указанном смысле описание квантовомеханич. системы (с помощью вектора состояния) оказывается невозможным в случае, когда рассматриваемая система является подсистемой нек-рой большей системы и существенно взаимодействует с её остальными частями. В этом случае система не обладает определ. вектором состояния, и её описание производится с помощью матрицы плотности. Состояния, описываемые вектором состояния, наз. ч и с т ы м и с о с т о я н и я м и, в отличие от смешанных состояний, описываемых матрицей плотности. Описание с помощью матрицы плотности является наиб. общей формой квантовомеханич. описания. Оно лежит в основе квантовой статистики.

**II.** Каждой физ. величине соответствует линейный эрмитов оператор, собств. значения к-рого являются возможными значениями физ. величины, а собств. векторы — её собств. состояниями, отвечающими выбранному собств. значению.

Конкретный вид линейных эрмитовых операторов, соответствующих таким физ. величинам, как импульс, угловой (орбитальный) момент, энергия, постулируется исходя из соответствия принципа, требующего, чтобы в пределе  $\hbar \rightarrow 0$  рассматриваемые физ. величины принимали «классич.» значения, и согласуется с общими принципами определения этих величин на основе законов сохранения (см. ниже). Вместе с тем в К. м. существуют такие линейные эрмитовы операторы [напр., отвечающие преобразованию векторов состояния при отражении осей координат (пространственной инверсии), перестановке одинаковых частиц и др.], к-рым соответствуют измеримые физ. величины, не имеющие классич. аналогов, напр. чётность (см. Операторы).

**III.** В разложении (14) произвольного вектора состояния системы по ортонормированной системе собств. векторов  $|f_i\rangle$  физ. величины  $f$  значения  $|c_i|^2 = |\langle f_i | \psi \rangle|^2$  равны вероятностям обнаружить систему в состояниях  $|f_i\rangle$ , т. е. вероятностям того, что при измерении  $f$  её значение окажется равным  $f_i$ .

В случае, когда величина  $f$  имеет непрерывный спектр, а собств. состояния нормированы условием:

$$\langle f | f' \rangle = \delta(f - f'), \quad (15)$$

выражение  $|c_f|^2 = \langle f | \psi \rangle^2$  представляет собой плотность вероятности, т. е. вероятность  $dw_{f, f+df}$  обнаружить величину  $f$  в интервале  $(f, f+df)$  равна:

$$dw_{f, f+df} = |c_f|^2 df. \quad (16)$$

Условие (15) формально противоречит постулату I, т. к. вектор состояния  $|\psi\rangle$ , принадлежащий непрерывному спектру, имеет бесконечную норму. Это связано с тем, что «монокроматич.» состояние  $|\psi\rangle$ , выделенное из непрерывного спектра, является матем. идеализацией. Подобной идеализацией является, напр., монокроматич. плоская эл.-магн. волна, к-рая должна была бы заполнять всё пространство и иметь поэтому бесконечную энергию. В действительности, любая физ. величина, принимающая непрерывные значения, может быть определена лишь с нек-рой точностью — в нек-ром интервале  $\Delta f$ , зависящем от точности прибора. Вектор состояния, отвечающий такому определению, представляет собой *волновой пакет*, составленный из монокроматич. состояний  $f$  в интервале  $\Delta f$  и имеющий конечную норму. Т. о., для физ. векторов состояния противоречия с постулатом I нет. Учитывая, однако, матем. преимущества использования монокроматич. состояний для описания непрерывного спектра, производится форм. расширение допустимого постулатом I класса векторов состояний путём включения в него нек-рых собств. векторов с бесконечной нормой (при условии, что из них может быть составлен волновой пакет с конечной нормой).

Постулат, определяющий зависимость вектора состояния от времени, будет сформулирован ниже [см. (29)].

**Представления вектора состояния.** Состояние системы определяется заданием нек-рой совокупности физ. величин, характеризующих систему, — т. н. *полного набора*. Число физ. величин, составляющих полный набор, равно числу степеней свободы системы (включая возможные внутр. степени свободы). Естественно, что физ. величины, входящие в полный набор, должны быть одновременно измеримыми, способными принимать одновременно определ. значения. Это свидетельствует о том, что соответствующие данным величинам операторы должны иметь общие собств. векторы. Необходимым и достаточным условием этого является коммутативность (переставимость) соответствующих операторов. Т. о., для физ. величин  $F, G, \dots, H$ , составляющих полный набор, должны выполняться условия коммутации:

$$\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}, \dots, \hat{F}\hat{H} = \hat{H}\hat{F}, \dots, \hat{G}\hat{H} = \hat{H}\hat{G}, \dots \quad (17)$$

Общий собств. вектор этих величин удобно обозначать индексами их собств. значений:  $|F_i, G_k, \dots, H_l\rangle$ . Любой вектор состояния системы  $|\psi\rangle$  может быть представлен в виде:

$$|\psi\rangle = \sum_{\xi} a(\xi) |\xi\rangle; \quad a(\xi) = \langle \xi | \psi \rangle, \quad (18)$$

где  $\xi$  — совокупность собств. значений величин, входящих в выбранный полный набор, а совокупность координат  $a(\xi)$  вектора состояний — волновая ф-ция системы в представлении, используемом в качестве базиса собств. векторы этого полного набора. Задание волновой ф-ции в к.-л. представлении полностью определяет вектор состояния системы и, в частности, её волновую ф-цию в любом др. представлении. Если  $\eta$  — совокупность собств. значений величин, составляющих др. полный набор (отличный от  $\xi$ ), то волновая ф-ция  $b(\eta)$  в этом представлении

$$|\psi\rangle = \sum_{\eta} b(\eta) |\eta\rangle, \quad b(\eta) = \langle \eta | \psi \rangle, \quad (19)$$

выражается через волновую ф-цию  $a(\xi)$ , и, наоборот,  $a(\xi)$  может быть выражена через  $b(\eta)$ :

$$b(\eta) = \sum_{\xi} \langle \eta | \xi \rangle a(\xi), \quad a(\xi) = \sum_{\eta} \langle \xi | \eta \rangle b(\eta). \quad (20)$$

Как отмечалось, для непрерывного спектра собств. значений символы суммы в этих ф-лах означают интегрирование. Если в качестве измеряемых величин взять координаты частиц, то волновая ф-ция системы будет задана в т. н. *конфигурационном представлении*. В частности, для одной частицы волновая ф-ция  $\psi(\mathbf{r})$  представляет собой коэф. разложения вектора состояния  $|\psi\rangle$  по собств. векторам  $|\mathbf{r}\rangle$  операторов координаты  $\mathbf{r} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ ,  $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$ . В этом случае  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  определяет вероятность  $dw$  обнаружить частицу в бесконечно малом объёме  $dV$  вокруг точки  $\mathbf{r}$ :  $dw = |\psi(\mathbf{r})|^2 dV$ .

В ряде задач оказывается полезным *импульсное представление*, в к-ром в качестве полного набора используются операторы проекций импульса частицы  $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ .

### Эволюция системы во времени

Полнота описания системы, согласно постулату I, подразумевает, что задание вектора состояния в к.-л. момент времени  $t_0$ ,  $|\psi(t_0)\rangle$ , позволяет найти вектор состояния  $|\psi(t)\rangle$  в любой последующий момент времени  $t$ . Т. о., имеется соответствие  $|\psi(t_0)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle$ , т. е. должен существовать оператор  $\hat{U}(t, t_0)$  (о п е р а т о р э в о л ю ц и и) такой, что

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (21)$$

Сохранение нормы вектора состояния (сохранение полной вероятности) требует, чтобы  $\hat{U}$  был унитарным оператором:  $\hat{U}^+ \hat{U} = 1$  (где  $\hat{U}^+$  эрмитово сопряжён  $\hat{U}$ ). Рассматривая эволюцию за бесконечно малое время  $dt$ , можно представить оператор  $\hat{U}(t+dt, t)$  [с точностью до  $dt^2$ ] в виде

$$\hat{U}(t+dt, t) = 1 + \hat{A} dt + 0(dt^2) \quad (22)$$

(использовано, что  $\hat{U}(t, t) = 1$ ). Условие унитарности приводит в этом случае к условию  $\hat{A}^+ = -\hat{A}$ , к-рое будет выполняться, если  $\hat{A} = \pm i\hat{K}$ , где  $\hat{K}$  — нек-рый эрмитов оператор. Полагая  $\hat{A} = -i\hat{K}$  и используя разложение  $|\psi(t+dt)\rangle \approx |\psi(t)\rangle + dt \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle$ , можно получить ур-ние:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{K} |\psi\rangle, \quad (23)$$

к-рому в соответствии с постулатом I должен подчиняться вектор состояния системы. Для того чтобы установить, какой физ. величине соответствует  $\hat{K}$ , необходим дополнительный физический принцип — принцип соответствия.

### Принцип соответствия и временное уравнение Шрёдингера

Естественно потребовать, чтобы в пределе, когда дебройлевская длина волны частицы значительно меньше размеров, характерных для данной задачи (в частности, для макроскопических тел), законы К. м. переходили бы в законы движения классической механики, отвечающие движению частиц (тел) по классическим траекториям, а действия квантовомеханических операторов на векторы состояния сводились бы к умножению их на соответствующие классические величины. Эти требования составляют содержание принципа соответствия в К. м. Аналогичный предельный переход при дл. волны  $\lambda \rightarrow 0$  от законов волновой оптики к законам геом. оптики хорошо известен. С др. стороны, существует тесная аналогия между классич. механикой и геом. оптикой. Лучи света в геом. оптике можно сопоставить с траекториями частиц; при этом закон распространения лучей между двумя точками определяется *Ферма принципом*, аналогичным *наименьшего действия принципу* для движения частиц. Предельному переходу от волновой оптики к геометриче-



ской отвечает определённое поведение волновых полей, к-рые могут быть представлены в виде

$$u = a \exp(i\varphi). \quad (24)$$

При длине волны  $\lambda \rightarrow 0$  фаза  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  (наз. *эйконалом*) очень быстро меняется с расстоянием, и её изменение на характерных размерах  $L \gg \lambda$  велико. Волновой вектор и частота волны определяются производными эйконала:

$$\mathbf{k} = \nabla\varphi, \quad \omega = -\frac{\partial\varphi}{\partial t}. \quad (25)$$

Согласно принципу Ферма, лучи света между двумя точками распространяются по траекториям, соответствующим миним. изменению эйконала. Исходя из отме-

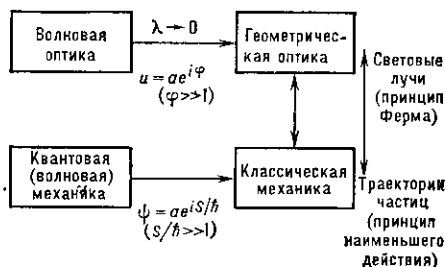


Рис. 4.

ченных аналогий (рис. 4), можно ожидать, что волновая ф-ция частицы в конфигурац. представлении в предельном случае  $\lambda \rightarrow 0$  должна иметь вид

$$\psi(\mathbf{r}, t) = a \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right), \quad (26)$$

где  $S$  — действие, а  $\hbar$  выступает как обезразмеривающий множитель в экспоненте. В классич. пределе  $S/\hbar \gg 1$ , и траектория частицы между двумя точками определяется минимумом  $S$ . Обобщённый импульс  $\mathcal{P}$  и ф-ция Гамильтона  $H$  частицы при этом равны:

$$\mathcal{P} = \nabla S, \quad H = -\frac{\partial S}{\partial t}. \quad (27)$$

Ф-лы (25)–(27) при  $\varphi = S/\hbar$  соответствуют гипотезе де Бройля. Используя (27) и дифференцируя ф-цию (26) по времени, получаем выражение:

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi. \quad (28)$$

Сравнивая (28) с общей зависимостью вектора состояния от времени (23), можно на основании принципа соответствия заключить, что оператор  $K$  отвечает ф-ции Гамильтона, делённой на  $\hbar$ . Обобщая полученный результат на произвольные системы, принимают в виде специального постулата:

IV—эволюция вектора состояния описывается временным уравнением Шрёдингера,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle, \quad (29)$$

где  $\hat{H}$  — гамильтониан системы.

Аналогично, дифференцируя (26) по координатам, имеем:

$$-i\hbar \nabla\psi = \mathcal{P}\psi. \quad (30)$$

Обобщая этот результат (с учётом принципа соответствия), принимают в качестве постулата выражение для оператора обобщённого импульса в конфигурац. пространстве:

$$\hat{\mathcal{P}} = -i\hbar \nabla. \quad (31)$$

Ввиду непрерывного (континуального) характера конфигурац. пространства матрица оператора импульса представляет собой обобщённую функцию. Для одно-

мерного случая, напр., она выражается через производную  $\delta$ -функцию:

$$\mathcal{P}_x, x' = -i\hbar \frac{d}{dx} \delta(x-x'). \quad (32)$$

Действие оператора координаты частицы в конфигурац. пространстве сводится к умножению волновой ф-ции на координату.

В конфигурац. представлении гамильтониан получается заменой обобщённых импульсов в ф-ции Гамильтона соответствующими операторами. Так, для частицы с массой  $m$  в потенц. поле гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(x, y, z) = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z), \quad (33)$$

где  $V(x, y, z)$  — потенц. энергия частицы в этом поле, а для частицы с зарядом  $e$  в эл.-магн. поле, описываемом скалярным  $\varphi$  и векторным  $\mathbf{A}$  потенциалами:

$$\hat{H} = \frac{(-i\hbar\nabla - (e/c)\mathbf{A})^2}{2m} + e\varphi. \quad (34)$$

(Существенно, что оператор  $-i\hbar\nabla$  отвечает именно обобщённому импульсу  $\mathcal{P}$  частицы в эл.-магн. поле, к-рый в классич. механике имеет вид:  $\mathcal{P} = m\mathbf{v} + (e/c)\mathbf{A}$ .)

С помощью постулатов I–IV может быть полностью построена матем. схема К. м. [Для описания систем из одинаковых частиц необходим дополнит. постулат (см. ниже)]. Спец. исследования показали, что система постулатов К. м. полна и непротиворечива. Чёткие правила устанавливаются соотношения между элементами матем. схемы и физ. величинами.

#### Среднее значение физической величины. Дисперсия

Согласно постулату III, вероятность получить в результате измерения физ. величины  $f$  её собствен. значение  $f_i$  равна  $|c_i|^2$ , где  $c_i$  являются коэф. разложения вектора состояния системы  $|\psi\rangle$  по собствен. состояниям измеряемой величины. Поэтому ср. значение  $\bar{f}$  физ. величины  $f$  в данном состоянии системы равно:

$$\bar{f} = \sum_i |c_i|^2 f_i. \quad (35)$$

Используя условие  $\hat{f}|f_i\rangle = f_i|f_i\rangle$  и разложение (14), имеем:

$$\bar{f} = \langle\psi | \hat{f} | \psi\rangle. \quad (36)$$

Если вектор состояния задан в базисе  $|g_i\rangle$ , отличным от собствен. векторов измеряемой величины, т. е.  $|\psi\rangle = \sum_i a_i |g_i\rangle$ , то матрица оператора  $\hat{f}$  недиагональна и (36)

принимает вид

$$\bar{f} = \sum_{i,k} a_i^* f_{i,k} a_k, \quad (37)$$

соответствующий матричному произведению в (36):

$$\bar{f} = (a_1^* a_2^* \dots) \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & \dots \\ f_{21} & f_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \end{pmatrix}.$$

В случае, когда система находится в собствен. состоянии измеряемой величины, ср. значение совпадает с её собствен. значением в этом состоянии. В общем случае существует разброс возможных значений измеряемой величины от ср. значения, характеризуемый дисперсией (ср. квадратичным отклонением):

$$\Delta f^2 = \overline{(\hat{f} - \bar{f})^2} = \langle\psi | (\hat{f} - \bar{f})^2 | \psi\rangle = \overline{\hat{f}^2} - (\bar{f})^2. \quad (38)$$

#### Соотношение неопределённостей

Если операторы  $\hat{f}$ ,  $\hat{g}$  двух физ. величин  $f$ ,  $g$  не коммутируют, эти величины не могут быть точно измерены

одновременно. В любом состоянии системы между дисперсиями этих величин существует соотношение неопределённости (СН):

$$\Delta f^2 \cdot \Delta g^2 \geq \frac{1}{4} |[\hat{f}, \hat{g}]|^2, \quad (39)$$

где  $[f, g] = \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$  — коммутатор операторов  $\hat{f}$  и  $\hat{g}$ . Поскольку коммутатор физ. величин в классич. пределе должен обращаться в нуль, величина его пропорциональна  $\hbar$ . Поэтому правая часть соотношения (39) пропорциональна  $\hbar^2$ . В частности, для оператора компоненты импульса и соответствующей координаты

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar, \quad (40)$$

и СН для этих величин имеет вид:

$$\Delta p_x^2 \cdot \Delta x^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (41)$$

Оно означает, что для состояния, в к-ром частица локализована в области пространства  $\Delta x$  (рис. 5, а),

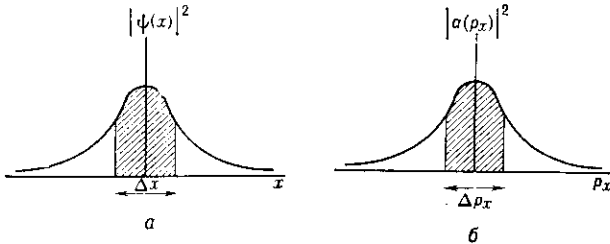


Рис. 5.

возможный разброс значений её импульса (около его ср. значения) заключён в области  $\Delta p_x$  (рис. 5, б), определяемой соотношением

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim \hbar. \quad (42)$$

Т. о., монохроматич. волна с определ. импульсом ( $\Delta p_x \rightarrow 0$ ) должна заполнять всё пространство ( $\Delta x \rightarrow \infty$ ). Соотношение (39) может быть уточнено путём использования новой характеристики — корреляции величин  $f, g$ . Если определить коэф. корреляции  $r$ :

$$r = \frac{1}{2} \cdot \frac{(\bar{f} - \bar{f})(\bar{g} - \bar{g}) + (\bar{g} - \bar{g})(\bar{f} - \bar{f})}{\sqrt{\Delta f^2 \cdot \Delta g^2}},$$

то для состояний, в к-рых  $r \neq 0$  (39), принимает вид:

$$\Delta f^2 \cdot \Delta g^2 \geq \frac{1}{4} \frac{|[\hat{f}, \hat{g}]|^2}{1 - r^2}.$$

Состояния системы, минимизирующие СН (т. е. отвечающие знаку равенства), наз. *когерентными состояниями*.

СН играет большую эвристич. роль, т. к. мн. результаты задач, рассматриваемых в К. м., могут быть получены и поняты на основе комбинации законов классич. механики с СН. Важный пример — проблема устойчивости атома. Рассмотрим эту задачу для атома водорода. Пусть электрон движется вокруг ядра (протона) по круговой орбите радиуса  $r$  со скоростью  $v$ . По закону Кулона сила притяжения электрона к ядру равна  $e^2/r^2$ , где  $e$  — заряд электрона, а центростремит. ускорение равно  $v^2/r$ . По второму закону Ньютона,  $mv^2/r = e^2/r^2$  ( $m$  — масса электрона), т. е. радиус орбиты  $r = e^2/mv^2$  может быть сколь угодно малым, если  $v$  достаточно велика. Но в К. м. должно выполняться СН. Если допустить неопределённость положения электрона в пределах радиуса его орбиты  $r$ , а неопределённость скорости — в пределах  $v$ , т. е. неопределённость импульса в пределах  $\Delta p = mv$ , то (41) можно представить в виде:  $mvr \geq \hbar$ . Отсюда можно получить  $v \leq e^2/\hbar$  и  $r \geq \hbar^2/me^2$ . Следовательно, движение электрона по орби-

те с  $r \leq a_B = \hbar^2/me^2 \approx 0,5 \cdot 10^{-8}$  см невозможно, т. е. электрон не может упасть на ядро — атом устойчив. Величина  $a_B$  и является радиусом атома водорода (боровским радиусом). Ему соответствует максимально возможная энергия связи атома  $\mathcal{E}_0 = -e^2/2a_B \approx -13,6$  эВ, определяющая его минимальную энергию — энергию основного состояния.

Т. о., квантовомеханические представления впервые дали возможность теоретически оценить размеры атома, выразив его радиус через мировые постоянные  $\hbar, m, e$ .

Указанные соображения позволяют понять устойчивость др. систем и оценить их характерные энергии. Действительно, из СН следует, что для частицы с массой  $m$ , совершающей движение в области с линейными размерами  $\sim r_0$ , ср. кинетич. энергия будет  $\bar{T} \geq \hbar^2/mr_0^2$ . Применяя эту оценку к нуклонам в ядре [ $m \approx 1,6 \times 10^{-24}$  г,  $r_0 \approx (10^{-13} - 10^{-12})$  см], получаем характерные энергии порядка (1—10) МэВ. В то же время для вращат. уровней молекулы водорода ( $r_0 \sim 10^{-8}$  см) она даёт оценку  $10^{-2}$  эВ.

Для некоммутирующих величин СН являются частным случаем общего *дополнительности принципа* Бора.

СН для энергии и времени требует особого рассмотрения (см. ниже).

### Производная физической величины по времени

Ср. значение физ. величины является, вообще говоря, ф-цией времени. Это определяется зависимостью от времени вектора состояния  $|\psi\rangle$ , рассматриваемого в (36) в *Шрёдингера представлении*. (Помимо этого возможна явная зависимость оператора  $\hat{f}$  от времени.) Производная ср. значения  $\bar{f}$  по времени является ср. значением некоего оператора, к-рый, по определению, наз. производной физ. величины по времени:

$$\frac{d\bar{f}}{dt} = \overline{\left(\frac{d\hat{f}}{dt}\right)}, \quad (43)$$

где

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}]. \quad (44)$$

С др. стороны, если использовать ф-лу (21), то зависимость в (36) от времени может быть перенесена с векторов состояния на операторы  $\hat{f}_H$ :

$$\bar{f} = \langle \psi_0 | \hat{f}_H | \psi_0 \rangle,$$

$$\hat{f}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{f} \hat{U}(t, t_0). \quad (45)$$

Это соответствует *Гейзенберга представлению*. Используя ур-ние  $i\hbar \partial \hat{U} / \partial t = \hat{H} \hat{U}$ , к-рому подчиняется оператор эволюции, можно получить для производной  $d\hat{f}_H/dt$  выражение, по форме аналогичное (44), но имеющее др. смысл, т. к. оно относится непосредственно к производной физ. величины, представленной её гейзенберговым оператором:

$$\frac{d\hat{f}_H}{dt} = \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\right)_H + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H, \hat{f}_H]. \quad (46)$$

Можно использовать также *взаимодействия представления*, являющееся в нек-ром смысле промежуточным между представлениями Шрёдингера и Гейзенберга.

Из (44) и (46) следует, в частности, что ср. значения физ. величин изменяются по законам классич. механики; это положение наз. *Эренфеста теоремой*. В соответствии с ним центр волнового пакета в предельном случае малых длин волн будет двигаться по классич. траектории.

### Перестановочные соотношения и классические скобки Пуассона

Выражения (44) и (46) можно сопоставить с полной производной по времени функции  $f(t, \dots, q_i, \dots, p_i)$ , зависящей явно от времени и от обобщённых классич. координат и импульсов системы, подчиняющихся Гамильтона уравнениям:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\}_{\text{кл.}} \quad (47)$$

где  $\{H, f\}_{\text{кл.}}$  — классич. скобка Пуассона:

$$\{H, f\}_{\text{кл.}} = \sum_i \left( \frac{\partial H}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial p_i} \right) \quad (48)$$

Сравнение (44) с (47) указывает на то, что коммутатору  $[\hat{H}, \hat{f}]$  можно сопоставить классич. скобку Пуассона, умноженную на  $-i\hbar$ :

$$[\hat{H}, \hat{f}] \rightarrow -i\hbar \{H, f\}_{\text{кл.}} \quad (49)$$

Обобщая (49) на произвольные величины  $f, g$ , можно рассматривать это соотношение как особую формулировку принципа соответствия: коммутатор операторов двух физ. величин в предельном случае, когда действие для системы  $S \gg \hbar$ , переходит с коэф.  $-i\hbar$  в величину, равную классич. скобке Пуассона для этих величин,

$$[\hat{f}, \hat{g}] \rightarrow -i\hbar \{f, g\}_{\text{кл.}} \quad (50)$$

Если физ. величине  $C$ , определяемой равенством  $C = \{f, g\}_{\text{кл.}}$ , отвечает оператор  $\hat{C}$ , то обобщением (50) является соотношение

$$[\hat{f}, \hat{g}] = -i\hbar \hat{C} \quad (51)$$

Соотношения коммутации (51) дают все известные перестановочные соотношения для механич. величин (координат, компонент импульса и момента). В представлении Гейзенберга они вместе с ур-нием (46) полностью описывают поведение физ. системы.

### Симметрия гамильтониана и сохраняющиеся величины

Если оператор физ. величины не зависит явно от времени и коммутирует с гамильтонианом, то, согласно (44), её ср. значение не меняется со временем, а отвечающий ей гейзенбергов оператор не зависит от времени. В частности, если в нач. момент времени такая физ. величина принимала к.-л. своё собств. значение, то с течением времени система не выйдет из соответствующего собств. состояния. Существование таких сохраняющихся величин тесно связано с симметрией гамильтониана. Пусть гамильтониан системы  $\hat{H}$  не меняется при нек-ром преобразовании системы, к-рое осуществляется с помощью оператора  $\hat{O}$ , действующего на векторы состояния. Тогда из равенства  $\hat{H}' = \hat{H}$ , где  $\hat{H}' = \hat{O}\hat{H}\hat{O}^{-1}$  — гамильтониан, действующий на преобразованные векторы состояния системы, следует:  $\hat{O}\hat{H} = \hat{H}\hat{O}$ . Вследствие сохранения нормы вектора состояния при преобразованиях симметрии оператор  $\hat{O}$  должен быть унитарен. Для преобразований симметрии, характеризующих непрерывным изменением к.-л. параметра  $\lambda$  (такими являются, напр., сдвиги или повороты системы), унитарный оператор при бесконечно малом изменении параметра  $\delta\lambda$  имеет вид:

$$\hat{O} = 1 + i\hat{K} \delta\lambda + 0(\delta\lambda^2), \quad (52)$$

где  $\hat{K}$  — эрмитов оператор, и предполагается, что  $\lambda = 0$  отвечает тождеств. преобразованию. Условие  $\hat{H}\hat{O} = \hat{O}\hat{H}$  сводится к коммутации с гамильтонианом оператора  $\hat{K}$ ,  $[\hat{H}, \hat{K}] = 0$ , и, следовательно, к сохранению физ. величины, к-рой он может соответствовать. Для операции сдвига системы на бесконечно малый вектор  $\delta\alpha$  волновая

ф-ция системы частиц в конфигурац. пространстве преобразуется по закону

$$\begin{aligned} \Psi(\dots, \mathbf{r}_i, \dots) &\rightarrow \Psi(\dots, \mathbf{r}_i + \delta\alpha, \dots) = \\ &= \Psi(\dots, \mathbf{r}_i, \dots) + \delta\alpha \sum_i \nabla_{\mathbf{r}_i} \Psi(\dots, \mathbf{r}_i, \dots) \end{aligned}$$

( $\mathbf{r}_i$  — координаты  $i$ -й частицы). Т. о., оператор бесконечно малого сдвига имеет вид:

$$\hat{O}_{\delta\alpha} = 1 + \delta\alpha \sum_i \nabla_{\mathbf{r}_i} = 1 + \frac{i}{\hbar} \hat{P} \delta\alpha, \quad (53)$$

где  $\hat{P} = \sum_i \hat{p}_i = \sum_i (-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}_i})$  — оператор полного импульса системы частиц. Если рассматриваемая система замкнута, а потенциалы взаимодействия между частицами зависят лишь от расстояния между ними, то её гамильтониан не меняется при сдвиге, и, следовательно, компоненты импульса, коммутируя с гамильтонианом, согласно (52), (53), сохраняются. Это находится в полном соответствии с законом сохранения импульса в классич. механике. При операции пространств. поворота на бесконечно малый угол  $\delta\varphi$  вокруг оси, направление к-рой задаётся единичным вектором  $\mathbf{v}$ , координаты частиц системы преобразуются по закону:

$$\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_i + \delta\mathbf{r}_i, \quad \delta\mathbf{r}_i = [\delta\varphi \mathbf{r}_i], \quad \delta\varphi = \mathbf{v}\delta\varphi,$$

и оператор поворота имеет вид:

$$\hat{O}_{\delta\varphi} = 1 + \delta\varphi \sum_i [\mathbf{r}_i \nabla_{\mathbf{r}_i}] = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \cdot \hat{L}, \quad (54)$$

где  $\hat{L}$  — оператор полного орбит. момента системы:

$$\hat{L} = \sum_i \hat{l}_i, \quad \hat{l}_i = [\hat{\mathbf{r}}_i \hat{\mathbf{p}}_i]. \quad (55)$$

Для замкнутой системы частиц, взаимодействующих по центр. закону, гамильтониан не меняется при поворотах, и поэтому компоненты момента, коммутируя с гамильтонианом, должны сохраняться. То же относится к компонентам момента отд. частицы, находящейся в центр. поле.

Если гамильтониан системы не меняется лишь при сдвиге вдоль к.-л. одного направления или поворота вокруг к.-л. одной осей, то будут сохраняться соответственно проекция импульса на это направление или проекция момента на выделенную ось.

Законы сохранения возникают не только для непрерывных симметрий гамильтониана. Так, для частицы, находящейся в периодич. поле, что является хорошей моделью движения электрона в кристалле, гамильтониан не меняется при сдвигах на векторы, кратные периодам решетки, и коммутирует с операторами соответствующих сдвигов. Это приводит к существованию особой сохраняющейся в периодич. поле величины — *квазиимпульса* (значения к-рого, в отличие от обычного импульса, определены лишь с точностью до векторов *обратной решетки*). Аналогичным образом для гамильтониана, периодически зависящего от времени, может быть определена величина *квазиэнергии*. Наличие у гамильтониана дискретных симметрий приводит в К. м. к сохранению ряда мультипликативных физ. величин, к-рые (в отличие от аддитивных импульса и момента) не имеют аналогов в классич. механике. Так, если гамильтониан системы инвариантен относительно отражения пространств. координат частиц:  $\mathbf{r}_i \rightarrow -\mathbf{r}_i$ , то он коммутирует с оператором пространств. инверсии  $\hat{P}$ , определяемым соотношением:

$$\hat{P}\Psi(\dots, \mathbf{r}_i, \dots) = \Psi(\dots, -\mathbf{r}_i, \dots). \quad (56)$$

Поскольку операция  $\hat{P}^2$  является тождеств. преобразованием, собств. значения  $\hat{P}^2$  равны 1, т. е. собств. значения оператора  $\hat{P}$  должны быть равными  $P = \pm 1$  (верхний знак отвечает чётным, нижний — нечётным вол-

новым ф-циям относительно изменения знака координат частиц). В случае коммутации  $\hat{P}$  с гамильтонианом система, находящаяся первоначально в состоянии с к.-л. определ. собств. значением  $P$ , будет с течением времени оставаться в этом состоянии, т. е. пространств. чётность в процессе эволюции системы сохраняется. Т. к. пространств. чётность системы, состоящей из неск. невзаимодействующих подсистем, равна произведению пространств. чётностей подсистем, она является мультипликативным квантовым числом.

Др. пример мультипликативного квантового числа — зарядовая чётность. Поскольку гамильтониан сильного и эл.-магн. взаимодействий не меняется при зарядовом сопряжении (замене всех частиц на античастицы), он коммутирует с оператором зарядового сопряжения  $\hat{C}$ , собств. значения к-рого, как и для пространств. инверсии, равны  $C = \pm 1$ . Собств. состояния оператора  $\hat{C}$  могут быть только у истинно нейтральных систем (см. Истинно нейтральные частицы), т. к. только такие системы при зарядовом сопряжении переходят сами в себя. Именно для них в процессах сильного и эл.-магн. взаимодействий сохраняется зарядовая чётность. В процессах слабого взаимодействия, гамильтониан к-рого не меняется при  $CP$ -преобразовании (см.  $CP$ -инвариантность), сохраняется  $CP$ -чётность.

Особое значение имеет инвариантность гамильтониана системы относительно перестановки одинаковых частиц. Коммутативность гамильтониана с операторами перестановки любой пары одинаковых частиц означает, что в процессе эволюции системы тип симметрии её волновой ф-ции относительно перестановок одинаковых частиц не меняется со временем. В частности, волновые ф-ции, симметричные (антисимметричные) относительно перестановки любой пары одинаковых частиц, остаются симметричными (антисимметричными). Это позволяет ввести особые постулаты К. м., необходимые для описания систем одинаковых частиц (см. ниже).

### Обратимость уравнения Шрёдингера во времени

Ур-ние Шрёдингера для системы бесспиновых частиц, взаимодействующих по центр. закону или (и) находящихся в электрич. поле (в отсутствие магнитного), сохраняет свой вид при замене  $t$  на  $-t$  и одноврем. переходе к комплексному сопряжению (т. к. для таких систем  $\hat{H}^* = \hat{H}$ ). На этом основана симметрия К. м. по отношению к обращению времени: если возможно к.-л. квантовомеханич. движение, описываемое вектором состояния  $|\psi\rangle$ , то возможно и движение, описываемое вектором состояния  $|\psi^*\rangle$ , при к-ром система проходит во времени те же состояния в обратном порядке. Для частиц со спином симметрия относительно обращения времени будет выполняться, если одновременно с переходом от  $|\psi\rangle$  к  $|\psi^*\rangle$  изменить направление проекции спинов частиц (т. к. она меняет знак при замене  $t \rightarrow -t$ ). При наличии магн. поля симметрия относительно обращения времени будет выполняться, если одновременно с заменой  $t \rightarrow -t$  рассматривать движение в магн. поле, знак к-рого изменён на противоположный. Это естественно, т. к. ур-ния эл.-магн. поля (Максвелла уравнения) симметричны относительно обращения времени при одноврем. замене напряжённости магн. поля  $\mathbf{H} \rightarrow -\mathbf{H}$  (или эквивалентной замене скалярного и векторного потенциалов:  $\varphi \rightarrow \varphi$ ,  $\mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$ ). Формально обратимость ур-ния Шрёдингера в этом случае имеет место благодаря тому, что комплексно-сопряжённый гамильтониан для частиц в эл.-магн. поле совпадает с гамильтонианом, преобразованным в соответствии с заменой  $\varphi \rightarrow \varphi$ ,  $\mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$ .

Симметрия относительно обращения времени приводит к ряду важных следствий, таких, как Крамерса теорема, равенство коэф. туннельных переходов при прохождении потенциального барьера с разных сторон, теорема взаимности (согласно к-рой совпадают ампли-

туды двух процессов рассеяния, являющихся обращёнными по времени по отношению друг к другу). Существование, что в К. м. эта симметрия относится лишь к эволюции вектора состояния и не включает процесс измерения, к-рый носит необратимый характер.

### Плотность потока вероятности

Из ур-ния Шрёдингера в конфигурац. представлении с гамильтонианом (33) вытекает уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0, \quad (57)$$

где  $\rho$  — плотность вероятности обнаружить частицу в точке с координатами  $(x, y, z)$  в момент времени  $t$ , а вектор

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (58)$$

по своему смыслу представляет собой плотность потока вероятности. Т. о., вероятность частице пройти за ед. времени через площадку  $d\sigma$  равна:  $d\delta w/dt = (\mathbf{j}\mathbf{n})d\sigma$  ( $\mathbf{n}$  — единичная нормаль к  $d\sigma$ ). Соотношение (57) аналогично ур-нию непрерывности в гидродинамике и является непосредств. следствием сохранения полной вероятности (и отвечающего этому требованию условия эрмитовости гамильтониана). Если волновая ф-ция представлена в виде  $\psi = A \exp(i\Phi)$  (где амплитуда  $A(x, y, z, t)$  и фаза  $\Phi(x, y, z, t)$  — действит. числа), то

$$\mathbf{j} = \rho \frac{\hbar}{m} \nabla \Phi, \quad \rho = |\psi|^2. \quad (59)$$

В частности, для плоской волны ( $\Phi = -\omega t + \mathbf{k}\mathbf{r}$ ) ур-ние (59) по аналогии с гидродинамикой даёт:  $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$ , где  $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m = \hbar \mathbf{k}/m$ . (В связи с этим отметим, что оператор  $(-i/m)\nabla$  в (58) представляет собой оператор скорости  $\hat{v} = \hat{p}/m$ .) Из (59) следует, что отличный от нуля поток вероятности существует только в том случае, если волновая ф-ция имеет зависящую от координат фазу (если  $\psi$  — действительная, то  $\mathbf{j} = 0$ ). Несколько др. ситуация будет для заряж. частицы в эл.-магн. поле, волновая ф-ция к-рой оказывается неоднозначной из-за неоднозначности потенциалов поля, определённых с точностью до градиентного преобразования:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f; \quad \varphi \rightarrow \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (60)$$

где  $f(x, y, z, t)$  — произвольная ф-ция координат и времени. Поскольку преобразования (60) не меняют значений напряжённостей полей, они не должны влиять и на любые др. величины, имеющие физ. смысл. Действительно, ур-ние Шрёдингера с гамильтонианом (34) не меняется при преобразовании (60), если одновременно проводится преобразование волновой ф-ции:

$$\psi \rightarrow \psi \exp\{i(e/\hbar c) f\}. \quad (61)$$

При этом плотность потока вероятности равна

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{e}{mc} \mathbf{A} |\psi|^2 \quad (62)$$

и также остаётся неизменной при одноврем. проведении преобразований (60) и (61).

Зависимость фазы волновой ф-ции от потенциалов поля может приводить к наблюдаемым интерференц. эффектам даже в отсутствие прямого силового воздействия на заряж. частицу (см. Ааронова — Бома эффект).

### Стационарные состояния

В классич. механике ф-ция Гамильтона, не зависящая явно от времени, равна сохраняющейся со временем энергии системы. Соответственно в К. м. физ. система, гамильтониан к-рой не зависит от времени, может находиться в состояниях с определ. энергией. Эти состояния наз. с т а ц и о н а р н ы м и. Отвечающие им векторы состояния являются частными решениями

временного уравнения Шрёдингера (29) и имеют вид:

$$|\Psi\rangle = \exp\{(-i\varepsilon/\hbar)t\} |\psi_\varepsilon\rangle, \quad (63)$$

где  $|\psi_\varepsilon\rangle$  не зависит от времени и представляет собой собств. вектор оператора Гамильтона:

$$\hat{H}|\psi_\varepsilon\rangle = \varepsilon|\psi_\varepsilon\rangle, \quad (64)$$

принадлежащий собств. значению энергии  $\varepsilon$ . Ур-ние (64) является одним из осн. ур-ний К. м. и наз. стационарным уравнением Шрёдингера.

В стационарном состоянии постоянны и не меняются со временем ср. значение (любой) физ. величины  $f$  (не зависящей явно от времени) и вероятности  $w_{f_i}$  обнаружить при измерении то или иное значение  $f_i$  этой величины,

$$\bar{f} = \langle\Psi|\hat{f}|\Psi\rangle = \langle\psi_\varepsilon|\hat{f}|\psi_\varepsilon\rangle = \text{const},$$

$$w_{f_i} = |a_{f_i}|^2 = |\langle f_i|\Psi\rangle|^2 = |\langle f_i|\psi_\varepsilon\rangle|^2 = \text{const}.$$

В частности, не меняется со временем вероятность обнаружить частицу в окрестности к.-л. точки (поскольку для волновой ф-ции  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\{(-i\varepsilon/\hbar)t\}\psi(\mathbf{r})$  стационарного состояния  $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2$ ). Т. о., стационарное состояние аналогично стоячей волне, в к-рой зависимость от времени факторизована и амплитуда колебаний в каждой точке не зависит от времени.

### Соотношение неопределённостей для энергии и времени

Для энергии и времени СН

$$\Delta\varepsilon \cdot \Delta t \geq \hbar \quad (65)$$

отличается по смыслу от аналогичного соотношения (42), поскольку время  $t$  не является динамич. переменной и должно рассматриваться как параметр. Для нестационарных состояний с характерным разбросом энергии  $\Delta\varepsilon$  под величиной  $\Delta t$  в (65) следует понимать промежуток времени, в течение к-рого существенно (на величину соответствующей дисперсии) изменяются ср. значения физ. величин, характеризующих систему. Так, для волнового пакета шириной  $\Delta x \approx 1/\Delta k$  величина  $\Delta t$  соответствует времени его прохождения через заданную точку:  $\Delta t \approx \Delta x/v_{гp} \approx 1/\Delta\omega$  (где  $v_{гp} = \partial\omega/\partial k$  — групповая скорость пакета, а  $\Delta\omega$  — характерный разброс частот). Для квазистационарного состояния (см. ниже) в качестве  $\Delta t$  выступает его время жизни  $\tau$ , и из соотношения (65) получается выражение для его ширины:  $\Gamma \sim \hbar/\tau$ .

Др. аспект соотношения (65) заключается в том, что возмущение, действующее на систему в течение времени  $\Delta t$ , вызывает в ней (независимо от своей величины) переходы между уровнями энергии в интервале  $\Delta\varepsilon$ , определяемом (65) [отсюда получается, напр., критерий адиабатичности (см. Адиабатические возмущения)]. Этот аспект тесно связан с первым. Действительно, если рассматривать данную и возмущающую её системы как подсистемы единой замкнутой системы, то можно заключить, что последняя должна быть нестационарной и обладать характерным временем  $\Delta t$  изменения своих параметров (поскольку именно на это время включается взаимодействие между подсистемами). Отсюда следует, что объединённая система обладает разбросом по энергии  $\Delta\varepsilon \geq \hbar/\Delta t$ . Если рассматриваемая подсистема первоначально находилась в стационарном состоянии, то таким разбросом энергии обладала бы возмущающая подсистема. Данная же подсистема приобретает его в результате обмена энергией при взаимодействии с возмущающей подсистемой. Условно можно сказать, что физ. система на короткие времена  $\Delta t \sim \hbar/\Delta\varepsilon$  может переходить в виртуальные состояния с нарушением закона сохранения энергии на величину  $\Delta\varepsilon$ . Из (65) следует, что взаимодействие, приносимое виртуальными частицами с массой  $M$ , должно иметь радиус  $\hbar/Mc$ .

### Стационарное уравнение Шрёдингера

В общем случае каждая квантовомеханич. система характеризуется своим энергетич. спектром, определяемым из ур-ния (64). В зависимости от вида потенц. энергии (т. е. от характера взаимодействия в системе), энергетич. спектр может быть либо дискретным (как у осциллятора), либо непрерывным (как у свободной частицы), либо смешанным (напр., уровни атома при энергиях возбуждения, меньших энергий ионизации, дискретны, а при больших энергиях — непрерывны).

Характер квантовомеханич. движения, описываемого ур-нием (64), можно понять, рассматривая одномерное движение частицы (вдоль оси  $x$ ) в случае, когда потенц. энергия  $V$  зависит только от  $x$ . Ур-ние Шрёдингера в конфигурац. пространстве

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = \varepsilon\psi \quad (66)$$

сводится к ур-нию

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{p^2(x)}{\hbar^2}\psi = 0, \quad (67)$$

где выражение  $p^2(x) = 2m[\varepsilon - V(x)]$  совпадает с квадратом классич. импульса частицы (с энергией  $\varepsilon$ ) в точке  $x$ . В классич. механике должно всегда выполняться условие  $\varepsilon \geq V(x)$ , причём точки  $x_0$ , в к-рых  $V(x_0) = \varepsilon$ , являются точками остановки и ограничивают область возможного классич. движения. В отличие от классич. механики, ур-ние (66) имеет смысл и в области  $V(x) > \varepsilon$ , где классич. импульс формально становится мнимым. Эту область движения наз. «неклассической». Для действит. решения ур-ния (67)  $\psi''(x)$  обращается в нуль в точках остановки и в точках, где обращается в нуль сама  $\psi(x)$ . Эти точки являются точками перегиба ф-ции  $\psi(x)$ . Отсюда вытекает, что в неклассич. области  $\psi(x)$  либо вовсе не обращается в нуль (будучи направленной выпуклостью вниз при  $\psi > 0$  или выпуклостью вверх при  $\psi < 0$ ), либо имеет всего один нуль, где происходит перегиб и поэтому сохраняется монотонное изменение  $\psi(x)$ . В классич. же области движения возможны осцилляции ф-ции  $\psi(x)$ . Т. о., поведение  $\psi(x)$  в классич. и неклассич. областях качественно различно.

Рассмотрим квантовомеханич. движение во внеш. поле с  $V(x)$ , изображённой на рис. 6. Для большей общ-

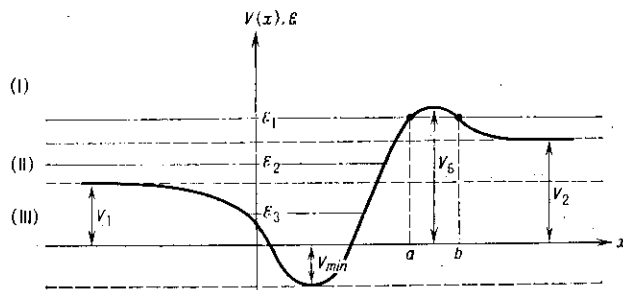


Рис. 6.

ности будем полагать наличие у  $V(x)$  как потенц. барьера, так и потенциальной ямы, а также считать, что предельные значения  $V$  при  $x \rightarrow \pm\infty$  отличаются друг от друга (для определённости  $V_2 > V_1$ ). Характер движения в таком поле качественно определяется положением энергии  $\varepsilon$  по отношению к предельным значениям потенц. энергии  $V_1$  и  $V_2$  на бесконечности. Он существенно различен в трёх областях:  $\varepsilon > V_2 \geq V_1$  (I);  $V_2 > \varepsilon > V_1$  (II);  $V_{min} < \varepsilon < V_1 \leq V_2$  (III) ( $V_{min}$  — мин. значение потенц. энергии). В области (I) при  $x \rightarrow -\infty$  существуют два приближённых линейно независимых решения ур-ния (67):  $e^{\pm ik_1 x}$ ,  $k_1^2 = 2m(\varepsilon - V_1)/\hbar^2 > 0$ , к-рые можно рассматривать как асимптотику нек-рых

двух точных линейно независимых решений  $\psi_1(x)$  и  $\psi_2(x)$ . Общее решение  $\psi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$  при  $x \rightarrow -\infty$  имеет асимптотич. вид

$$\psi(x) \sim c_1 e^{ik_1 x} + c_2 e^{-ik_1 x} \quad (68)$$

и полностью определяется заданием коэф.  $c_1, c_2$ . С др. стороны, при  $x \rightarrow +\infty$  существуют приближённые решения ур-ния (67)  $e^{\pm ik_2 x}$ ,  $k_2^2 = 2m(\mathcal{E} - V_2)/\hbar^2 > 0$ , к-рые являются асимптотиками двух др. точных линейно независимых решений  $\psi_3(x)$  и  $\psi_4(x)$ . Точное решение  $\psi(x) = c_3\psi_3(x) + c_4\psi_4(x)$  при  $x \rightarrow +\infty$  имеет асимптотич. вид

$$\psi(x) \sim c_3 e^{ik_2 x} + c_4 e^{-ik_2 x}. \quad (69)$$

Поскольку  $\psi_3(x), \psi_4(x)$  должны линейно выражаться через  $\psi_1(x), \psi_2(x)$  (и наоборот), коэф.  $c_3, c_4$  являются линейными ф-циями  $c_1, c_2$ :

$$\begin{aligned} c_3 &= \alpha_{11}c_1 + \alpha_{12}c_2 \\ c_4 &= \alpha_{21}c_1 + \alpha_{22}c_2. \end{aligned} \quad (70)$$

Матричные элементы  $\alpha_{jk}(\mathcal{E})$  являются нек-рыми функциями потенц. энергии и зависят от энергии. Из осциллирующих при  $x \rightarrow \pm\infty$  решений (68), (69) можно составить волновые пакеты, имеющие конечную норму. Поэтому никаких ограничений на значения энергии в области (I) не возникает, спектр энергий непрерывный, а движение инфинитно (неограниченно) в обе стороны. Каждое значение энергии при этом двукратно вырождено в соответствии с существованием в области (I) двух физически разл. движений. Первое из них отвечает движению частицы слева направо и выделяется граничным условием  $c_4 = 0$  (т. е. требованием, чтобы при  $x \rightarrow +\infty$  существовала только прошедшая слева волна), второе (выделяемое условием  $c_1 = 0$ ) — движению справа налево. Отношение плотностей вероятности прошедшего и падающего потоков наз. коэф. прохождения ( $D$ ), а отношение отражённого к падающему — коэф. отражения ( $R$ ). Для первого из упомянутых движений

$$D = \frac{k_2}{k_1} \frac{|c_3|^2}{|c_1|^2}, \quad R = \frac{|c_2|^2}{|c_1|^2}. \quad (71)$$

Из сохранения плотности потока следует, что  $R + D = 1$ . Используя обратимость ур-ния Шрёдингера во времени [к-рая для стационарного случая сводится к тому, что наряду с любым решением  $\psi(x)$  решением (65) будет также комплексно-сопряжённая ф-ция  $\psi^*(x)$ ], можно получить соотношение для матричных элементов в (70):  $\alpha_{11} = \alpha_{22}^*$ ,  $\alpha_{12} = \alpha_{21}^*$ . Т. о., коэф. отражения (и соответственно прохождения) для частиц, движущихся слева направо ( $R = |c_2|^2/|c_1|^2 = |\alpha_{21}/\alpha_{22}|^2$ ) и справа налево ( $R' = |c_3|^2/|c_4|^2 = |\alpha_{12}/\alpha_{11}|^2$ ), одинаковы:  $R' = R$ ,  $D' = D$ .

В отличие от классич. механики, коэф. прохождения для квантовомеханич. движения не равен нулю даже в случае, когда энергия ( $\mathcal{E}_1$ ) меньше высоты барьера  $V_B$ . В этой ситуации при классич. движении слева направо частица должна была бы остановиться в точке  $a$  и затем, отразившись от барьера, двинуться налево (аналогично частица, двигавшаяся из области  $x \rightarrow +\infty$  налево, должна была бы отразиться в точке остановки  $b$ ). Область  $a < x < b$  запрещена для классич. движения. В квантовом случае существует конечная вероятность подбарьерного, туннельного, перехода (см. *Туннельный эффект*). Для гладкого барьера в квазиклассическом приближении коэф. туннельного перехода равен

$$\begin{aligned} D &= \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\} = \\ &= \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(V(x) - \mathcal{E}_1)} dx \right\}, \end{aligned} \quad (72)$$

где  $a(\mathcal{E})$  и  $b(\mathcal{E})$  — классич. точки остановки. Величина  $D$  в классич. пределе ( $\hbar \rightarrow 0$ ) обращается в нуль (в

согласии с принципом соответствия). Существенно, что показатель экспоненты (72) зависит как квадратный корень от высоты барьера и линейно — от его длины. Поэтому вероятность туннельного перехода оказывается большей для сравнительно высоких и узких барьеров (часто встречающихся в ядерной физике), чем для низких и длинных (встречающихся, напр., в хим. реакциях). Характерна также зависимость экспоненты в (72) от массы частиц, обуславливающих заметную вероятность туннелирования для наиб. лёгких частиц — электронов.

Наряду с туннельным переходом чисто квантовым эффектом является надбарьерное отражение и е, происходящее при энергиях, превосходящих высоту барьера (и даже в отсутствие к.-л. барьера, напр. при прохождении частицы над потенц. ямой). «Классич.» частица в этом случае свободно проходит над барьером и лишь её кинетич. энергия изменяется от величины  $(\mathcal{E} - V_1)$  до величины  $(\mathcal{E} - V_2)$  [при прохождении слева направо в поле с  $V(x)$ , изображённой на рис. 6]. Волновым аналогом надбарьерного отражения частиц является частичное отражение световой волны от границы раздела двух прозрачных сред. Для гладких  $V(x)$  коэф. надбарьерного отражения экспоненциально мал в случаях, когда энергия частиц значительно превышает высоту барьера.

В области энергий (II) асимптотич. решение при  $x \rightarrow -\infty$  имеет вид (68) (т. к.  $\mathcal{E} > V_1$ ), а решением при  $x \rightarrow +\infty$  (т. к.  $\mathcal{E} < V_2$ ) имеет вид:

$$\psi \sim c_3 e^{-\kappa_2 x} + c_4 e^{\kappa_2 x}, \quad \kappa_2^2 = \frac{2m(V_2 - \mathcal{E})}{\hbar^2}. \quad (73)$$

Поскольку общее решение ур-ния (67) определяется двумя константами, можно положить  $c_4 = 0$  и тем самым избежать физически неприемлемого экспоненциально растущего при  $x \rightarrow +\infty$  решения. Никаких ограничений на значения энергии в области (II) [так же, как в области (I)] не возникает, т. е. спектр энергии непрерывный. Однако уровни энергии [в отличие от двукратного вырождения в области (I)] невырожденные. Это связано с необходимостью определ. выбора коэф. в одном из линейно независимых решений ( $c_4 = 0$ ). Благодаря невырожденности уровней энергии решения ур-ния (67)  $\psi(x)$  и  $\psi^*(x)$  должны совпадать с точностью до множителя, т. е. волновая ф-ция в области (II) может быть выбрана действительной. Отсюда следует, что коэф.  $c_1, c_2$  в (68) удовлетворяют условию  $c_1^* = c_2$ , т. е. плотности потоков в волнах, идущих при  $x \rightarrow -\infty$  налево и направо, одинаковы. Т. о., в области (II) квантовомеханич. движение, как и в классич. механике, финитно с одной стороны и соответствует полному отражению частицы, падающей слева на потенц. стенку. Однако, в отличие от классич. механики, в квантовомеханич. движении частица способна с экспоненциально затухающей вероятностью проникать внутрь барьера [см. (73)]. Это и обуславливает возможность подбарьерных переходов в случаях, когда барьер имеет конечную ширину. Точным волновым аналогом движения частиц в области (II) является полное внутреннее отражение света на границе двух сред.

В области (III) асимптотика решения ур-ния (67) при  $x \rightarrow +\infty$  [так же, как и в области (II)] имеет вид (73), а при  $x \rightarrow -\infty$  вместо (68) будет

$$\psi(x) \sim c_1 e^{-\kappa_1 x} + c_2 e^{\kappa_1 x}, \quad \kappa_1^2 = \frac{2m(V_1 - \mathcal{E})}{\hbar^2}. \quad (74)$$

При этом коэф.  $c_3, c_4$  в (73) будут выражаться через  $c_1, c_2$  линейно с помощью (70). Условие ограниченности  $\psi(x)$  при  $x \rightarrow -\infty$  приводит к требованию  $c_1 = 0$ . Однако при этом для произвольного значения энергии из области (III) нельзя добиться ограниченности  $\psi(x)$  для  $x \rightarrow +\infty$ , т. к., согласно (70),  $c_3 = \alpha_{11}c_2$ ,  $c_4 = \alpha_{22}c_2$  и коэф.  $c_4$  при экспоненциально растущем решении (73) будет, вообще говоря, отличен от нуля. Физический до-

пустимые решения получаются поэтому только для таких выделенных, дискретных, значений энергии  $\mathcal{E}_i$ , для к-рых  $\alpha_{22}(\mathcal{E}_i)=0$ . Эти значения  $\mathcal{E}_i$  являются, т. о., корнями ур-ния  $\alpha_{22}(\mathcal{E})=0$ . Получающиеся уровни энергии невырождены и отвечают (как и в классич. механике) финитному движению частицы в потенц. яме, т. е. *связанным состояниям*.

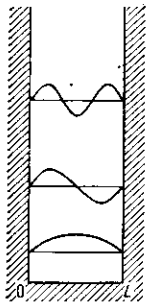


Рис. 7.

В отличие от классич. механики, где финитное движение в потенц. яме происходит между двумя точками остановки при любом значении энергии из области (III), квантовомеханич. движение возможно лишь при определ. дискретных значениях энергии. Возникновение дискретных уровней энергии («квантование энергии») — чисто волновое явление. Математически оно происходит благодаря тому, что условия ограниченности решения (73), (74) стационарного ур-ния Шрёдингера при  $x \rightarrow \pm \infty$  играют роль краевых условий, удовлетворить к-рым можно лишь при дискретных энергиях (аналогично, напр., тому, как определ. граничные условия колебаний струны приводят к дискретному спектру её частот). Буквальная аналогия существует для движения частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками и колебаниями струны с закрепленными концами (рис. 7). В обоих случаях граничные условия приводят к тому, что на длине  $L$  струны (или ширине потенц. ямы) должно укладываться целое число  $n$  полуволи:  $1/2 \lambda n = L$ . Отсюда получается спектр энергий:

$$\mathcal{E}_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2, \quad k_n = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Дискретный спектр может быть проиллюстрирован также на примере квантового *осциллятора* — частицы, движущейся в поле  $V(x) = 1/2 m \omega^2 x^2$ . Задача о квантовом осцилляторе является одной из важнейших и точно решаемых аналитически задач К. м. Важность её обусловлена тем, что для произвольного потенц. поля в положении равновесия  $x_0$  должен быть минимум потенц. энергии:  $(dV/dx)_{x=x_0} = 0$ , и  $V(x)$  вблизи от положения равновесия приложимо представляема в виде осцилляторной:  $V(x) = V(x_0) + 1/2 (d^2V/dx^2)_{x=x_0} x^2 + \dots$ , где  $x$  — отклонение от положения равновесия, а частота колебаний эквивалентного осциллятора  $\omega = \sqrt{(d^2V/dx^2)_{x=x_0}/m}$ .

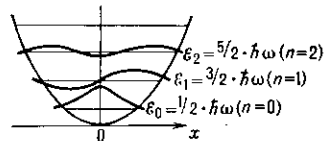


Рис. 8.

изображает потенц. энергию частицы. В этом случае частица с любой энергией (как и в случае ямы с бесконечными стенками) «заперта» внутри ямы, поэтому спектр её энергии дискретен. Горизонт. прямые изображают уровни энергии частицы. Энергия низшего уровня  $\mathcal{E}_0 = 1/2 \hbar \omega$  — наименьшее значение энергии, совместимое с соотношением неопределённостей [положение частицы на дне ямы ( $\mathcal{E}=0$ ) означало бы точное равновесие, при к-ром  $x=0$  и  $p=0$ , что невозможно, согласно принципу неопределённости]. Следующие, более высокие уровни энергии осциллятора расположены на равных расстояниях с интервалом  $\hbar \omega$ ; энергия  $n$ -го уровня:

$$\mathcal{E}_n = \hbar \omega (n + 1/2).$$

Над каждой горизонт. прямой приведена волновая ф-ция данного состояния. За пределами ямы (в неклассич. области) волновая ф-ция быстро затухает. В классич. области движения волновая ф-ция осциллирует. Характерно, что число узлов волновой ф-ции равно

квантовому числу  $n$  уровня энергии. Этот результат справедлив и для др. одномерных потенц. полей (т. н. *осцилляционная теорема*). В высоковозбуждённых состояниях с большими  $n$  длина де-бройлевской волны частицы становится малой по сравнению с характерными размерами области движения. Движение приобретает классич. характер: волновой пакет, построенный из состояний с близкими ( $n$  большими)  $n$  будет двигаться с большой точностью по классич. законам.

Дискретный характер уровней энергии, отвечающих связанным состояниям, позволяет понять, почему в определ. условиях заведомо сложные, составные системы (напр., атомы) ведут себя как элементарные частицы. Причиной этого в том, что осн. состояние связанной системы отделено от первого возбуждённого состояния энергетич. интервалом, наз. *энергетической щелью*. Такая ситуация характерна для атомов, молекул, ядер и др. квантовых систем. Благодаря энергетич. щели внутр. структура системы не проявляется до тех пор, пока обмен энергией при её взаимодействиях с др. системами не превысит значения, равного ширине щели. Поэтому при достаточно малом обмене энергией сложная система (напр., ядро или атом) ведёт себя как бесструктурная частица (матер. точка). Так, при энергиях теплового движения, меньших энергии возбуждения атома, атомные электроны не могут участвовать в обмене энергией и не дают вклада в теплоёмкость. Справедливо и обратное заключение: наличие в системе возбуждённых состояний (как это, напр., имеет место для адронов) является свидетельством в пользу её составной структуры.

### Движение в периодическом поле

Движение в периодич. поле  $V(x+a) = V(x)$  (где  $a$  — период) может служить моделью движения электрона в кристалле и иллюстрирует возникновение разрешённых и запрещённых зон (полос) энергии. Пусть  $\varphi_1(x)$  и  $\varphi_2(x)$  — два к.-л. линейно независимых решений ур-ния Шрёдингера, отвечающих определ. энергии  $\mathcal{E}$ . Поскольку оператор сдвига на период поля коммутирует с гамильтонианом, ф-ции  $\varphi_1(x+a)$  и  $\varphi_2(x+a)$  также будут решениями ур-ния Шрёдингера, принадлежащими тому же значению энергии. Поэтому они должны выражаться линейно через  $\varphi_1(x)$  и  $\varphi_2(x)$ :

$$\varphi_1(x+a) = \beta_{11}\varphi_1(x) + \beta_{21}\varphi_2(x),$$

$$\varphi_2(x+a) = \beta_{12}\varphi_1(x) + \beta_{22}\varphi_2(x).$$

Матричные элементы  $\beta_{ik}$  в этом преобразовании зависят от вида  $V(x)$  и выбранного значения энергии, а определитель матрицы  $\beta_{ik}$   $\Delta = \beta_{11}\beta_{22} - \beta_{12}\beta_{21}$  должен быть равен 1 (в силу условия постоянства определителя Вронского  $\varphi_1\varphi_2 - \varphi_1\varphi_2 = \text{const}$ , к-рому удовлетворяют два линейно независимых решения). Из решений  $\varphi_1(x)$  и  $\varphi_2(x)$  можно составить линейную комбинацию  $\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$ , к-рая, будучи решением ур-ния Шрёдингера с энергией  $\mathcal{E}$ , одновременно является собств. состоянием оператора сдвига  $\hat{T}\psi(x) = \psi(x+a) = \lambda\psi(x)$ . Собств. значение  $\lambda$  при этом определяется ур-нием

$$\begin{vmatrix} \beta_{11} - \lambda & \beta_{21} \\ \beta_{12} & \beta_{22} - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \lambda(\beta_{11} + \beta_{22}) + 1 = 0.$$

Для физически приемлемого решения должно выполняться условие  $|\lambda|=1$  (т. к. при  $|\lambda| \neq 1$  неогранич. сдвиг решения в одну или др. сторону должен был бы приводить к бесконечно большому его значению). Для этого необходимо выполнение неравенства:

$$-1 \leq 1/2 [\beta_{11}(\mathcal{E}) + \beta_{22}(\mathcal{E})] \leq 1,$$

к-рое и определяет допустимые при движении в периодич. поле не дискретные уровни, а полосы энергии. [Ф-ция  $\beta_{11}(\mathcal{E}) + \beta_{22}(\mathcal{E})$  не зависит от конкретного выбора решений  $\varphi_1(x)$  и  $\varphi_2(x)$ .] Полагая  $1/2[\beta_{11}(\mathcal{E}) +$

$+\beta_{22}(\varepsilon)] = \cos(qa)$ , получим  $\lambda = \exp(\pm iqa)$ , где величина  $q$  — квазимпульс системы. Энергия частицы (как следует из приведенного равенства, если его разрешить относительно  $\varepsilon$ ) должна быть четной ф-цией  $q$ . Тот факт, что собств. значение оператора сдвига равно  $\exp(iqa)$ , позволяет заключить, что волновая ф-ция частицы в периодич. поле имеет вид:  $\psi = \exp(iqx)\varphi(x)$ , где  $\varphi(x)$  — периодич. ф-ция,  $\varphi(x+a) = \varphi(x)$  (см. *Блоха теорема*). Эти результаты лежат в основе совр. теории твердого тела.

**Движение в центральном поле**

Задача о квантовомеханич. движении двух частиц с массами  $m_1$  и  $m_2$  [энергия взаимодействия между к-рыми  $V(|r_2 - r_1|)$  зависит только от относит. расстояния между ними] сводится к рассмотрению свободного движения центра масс этих частиц и относит. движения в центр. поле  $V(|r|)$  частицы с приведенной массой  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ . Т. к. центр. поле обладает симметрией вращения, при движении в нём сохраняется угл. момент частицы и в качестве полного набора измеряемых величин могут быть выбраны квадрат момента  $l^2$ , проекция  $m$  момента на выделенную ось (обычно ось  $z$ ) и энергия  $\varepsilon$  частицы. Соответственно волновая ф-ция частицы в сферич. системе координат  $(r, \vartheta, \varphi)$  может быть записана в виде произведения радиальной ф-ции (к-рую удобно представлять в виде  $u(r)/r$ ) и угл. ф-ции, в качестве к-рой выбирается *сферическая функция*  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ , являющаяся собств. ф-цией квадрата момента и его проекции на ось  $z$ ,

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{u_{\varepsilon, l}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (75)$$

При этом ф-ция  $u_{\varepsilon, l}(r)$  удовлетворяет «одномерному» ур-нию Шрёдингера по переменной  $r$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[ V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] u = \varepsilon u \quad (76)$$

с эфф. потенц. энергией  $V_{\text{эфф}} = V(r) + \hbar^2 l(l+1)/2\mu r^2$ . Состояния с  $l=0, 1, 2, 3, \dots$  наз. соответственно *s*-, *p*-, *d*-, *f*-, ... (и далее по алфавиту) состояниями. Второй член в  $V_{\text{эфф}}$  наз. центробежной энергией (аналогичная добавка к  $V(|r|)$  при рассмотрении радиального движения возникает в классич. механике из-за трансверсальной части кинетич. энергии частицы). Угл. зависимость (75) универсальна для любых центр. полей, что отражает универсальность выполнения закона сохранения момента в таких полях. В классич. механике этот закон приводит к тому, что движение в любом центр. поле происходит в фиксир. плоскости, перпендикулярной моменту и проходящей через центр. Поскольку при  $m=l Y_{ll} \sim (\sin \vartheta)^l$ , выражение (75) в случае очень больших  $l$  отлично от нуля лишь вблизи плоскости  $\vartheta = \pi/2$ , т. е. в пределе больших  $l Y_{ll}$  описывает классич. плоское движение. Напротив, квантовое движение при малых  $l$  совершенно непохоже на классическое.

В ст. *Атом* на рис. 2 приведены распределения электронной плотности вокруг ядра в атоме водорода для состояний с низкими значениями  $l$  и  $m$ . Видно, что задание момента (т. е.  $l$  и  $m$ ) полностью определяет угл. распределение, к-рое сильно отличается от плоского. Особенно отличается от классического движение в *S*-волпе, имеющее сферически симметричное распределение. В классич. физике устойчивое движение частицы с нулевым моментом в поле притяжения было бы вообще невозможно: частица падала бы на притягивающий центр. В К. м. для полей притяжения, растущих (по модулю) при  $r \rightarrow 0$  медленнее, чем  $\text{const}/r^2$ , падения на центр в *S*-волпе не происходит. Этот факт естественно следует из соотношения неопределённости. Центробежная энергия при  $l \neq 0$  представляет собой потенц. барьер, «закрывающий» область малых  $r$ . Существуют два решения ур-ния Шрёдингера: одно из них затухает под центробежным барьером при  $r \rightarrow 0$ , а другое —

растёт. Для  $V(r)$ , растущих при  $r \rightarrow 0$  медленнее, чем  $\text{const}/r^2$ , центробежная энергия обуславливает универс. зависимость радиальной ф-ции при  $r \rightarrow 0$ :

$$u_{\varepsilon, l}(r) \approx c_1 r^{l+1} + \frac{c_2}{r^l}. \quad (77)$$

Оба члена в (77) при  $r \rightarrow 0$  являются линейно независимыми решениями ур-ния Шрёдингера. Условие конечности нормы требует зануления сингулярного решения, т. е. выбора  $c_2 = 0$ . Т. о., при  $r \rightarrow 0$

$$\psi \sim r^l. \quad (78)$$

Если энергия системы больше, чем значение  $V(r)$  при  $r \rightarrow \infty$  ( $\varepsilon > V_\infty$ ), то решение ур-ния Шрёдингера на больших расстояниях должно иметь вид:

$$u_{\varepsilon, l} \sim c_3 e^{ikr} + c_4 e^{-ikr}, \quad k^2 = 2\mu(\varepsilon - V_\infty)/\hbar^2.$$

При этом (как и в одномерном случае отражения от потенц. стенки) поток в расходящейся от центра сферич. волне ( $e^{ikr}$ ) должен быть равен потоку в сходящейся волне ( $e^{-ikr}$ ), т. е.  $|c_3| = |c_4|$ . Исходя из этого, решение при  $r \rightarrow \infty$  записывают в виде:

$$u_{\varepsilon, l}(r) \sim \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right), \quad (79)$$

где  $\delta_l$  — т. н. ф а з а р а с с е я н и я, равная нулю для свободного движения (она используется для нахождения амплитуды рассеяния). Решение (79) не накладывает к-л. ограничений на энергию системы. Поэтому при  $\varepsilon \geq V_\infty$  энергетич. спектр непрерывный, а решения описывают несвязанные состояния инфинитного движения. Если в  $V_{\text{эфф}}$  существует потенц. яма, такая, что  $V_{\text{min}} < V_\infty$ , то для энергий  $\varepsilon$  в интервале  $V_{\text{min}} < \varepsilon < V_\infty$  решение ур-ния Шрёдингера при  $r \rightarrow \infty$  имеет вид:

$$u_{\varepsilon, l} \sim c_3 e^{-\kappa r} + c_4 e^{\kappa r}, \quad \kappa^2 = 2m(V_\infty - \varepsilon)/\hbar^2. \quad (80)$$

Кoeff.  $c_3, c_4$  при двух линейно независимых решениях в (80) должны линейно выражаться через  $c_1, c_2$  из (77) по ф-лам (70). Если для произвольной энергии из рассматриваемого интервала потребовать ограниченности решения в нуле, т. е. положить  $c_2 = 0$ , то коэф.  $c_4$  при растущем на бесконечности решении, равный  $c_4 = \alpha_{2l}(\varepsilon)c_1$ , будет, вообще говоря, отличен от нуля. Это означает, что при произвольной энергии  $\varepsilon < V_\infty$  может не существовать физически приемлемого решения. Возможные энергии физ. состояний определяются ур-нем  $\alpha_{2l}(\varepsilon) = 0$  и образуют дискретный спектр. Они отвечают связанным состояниям. Т. о., условия ограниченности решения на границах области изменения радиальной переменной ( $r=0$  и  $r=\infty$ ) играют роль крайевых условий, приводящих (как и в одномерном случае) к дискретному спектру энергий. Дискретные уровни в радиальном ур-нии Шрёдингера (76) нумеруются радиальным квантовым числом  $n_r$ , начиная с основного ( $n_r=0$ ). Поскольку  $V_{\text{эфф}}$  зависит от  $l$ , энергия уровня определяется двумя квантовыми числами  $n_r$  и  $l$ . Число  $m$  наз. магнитным квантовым числом и при данном  $l$  может принимать  $(2l+1)$  значений:  $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ ;  $m$  не входит в ур-ние (76), и энергия от него не зависит (т. к.  $m$  зависит от выбора оси  $z$ , а поле сферически симметрично). Поэтому уровень с квантовым числом  $l$  имеет  $(2l+1)$ -кратное вырождение. Энергия уровня начинает зависеть от  $m$  лишь тогда, когда сферич. симметрия нарушается, напр. при помещении системы в магн. поле (*Зеемана эффект*). Для нек-рых видов  $V(r)$  [напр., кулоновской:  $V = -Ze^2/r$ , или изотропного трёхмерного осциллятора:  $V = (\mu\omega^2/2)(x^2 + y^2 + z^2)$ ] существует дополнит. (т. н. с л у ч а й н о е) вырождение уровней энергии, обусловленное скрытой симметрией этих  $V(r)$ . Так, энергия водородоподобных атомов зависит от величин



ны  $n = n_r + l + 1$ , называемой главным квантовым числом:

$$\varepsilon_n = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

Т. о., заданному числу  $n \geq 2$  могут соответствовать состояния с разл.  $n_r$  и  $l$ . Такое совпадение представлялось случайным, поскольку для разных  $l$  уровни энергии определяются в разных потенц. ямах (различающихся центробежной энергией). Как было показано В. А. Фоком (1935), оно объясняется особой симметрией кулоновского потенциала точечного заряда, проявляющейся в явном виде при решении задачи в импульсном представлении. Для многоэлектронных атомов, в к-рых каждый электрон движется не только в поле ядра, но и в поле остальных электронов, уровни энергии зависят также и от  $l$ . Для изотропного осциллятора  $\varepsilon = \hbar\omega(2n_r + l + 3/2)$  и совпадающими оказываются уровни с одинаковым значением  $(2n_r + l)$ , напр.  $s$ -состояние ( $n_r = 1, l = 0$ ) и  $d$ -состояние ( $n_r = 0, l = 2$ ). Общее число связанных состояний для центр. поля притяжения, убывающего (по модулю) при  $r \rightarrow \infty$  быстрее, чем  $\text{const}/r^{2+\varepsilon}$  ( $\varepsilon > 0$ ), конечно, а для убывающего медленнее, чем  $\text{const}/r^{2-\varepsilon}$ , — бесконечно (причём в последнем случае энергетич. спектр спускается к точке  $\varepsilon = 0$ ).

Т. к. оператор пространств. инверсии коммутирует с моментом и гамильтонианом, состояния (75) в центр. поле обладают определ. пространств. чётностью. Из св-ва сферич. ф-ций  $Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + 2\pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  вытекает, что в состоянии (75) пространств. чётность  $P = (-1)^l$ .

### Квазистационарные состояния

Частица, движущаяся в потенциальной яме, изображённой на рис. 9, а, имеет непрерывный спектр энергии ( $0 \leq \varepsilon < \infty$ ). Однако в области энергий  $V_{\min} < \varepsilon < V_6$  могут существовать в непрерывном спектре определ. выдел. значения энергии, отвечающие состояниям, в к-рых частица довольно длит. время оказывается связанной внутри потенц. ямы с  $V_{\min} > 0$ . Такие состояния наз. квазистационарными. В классич. мех. точка  $V_{\min}$  отвечает метастабильному состоянию равновесия и классич. частица с энергией  $V_{\min} < \varepsilon < V_6$  может быть «заперта» в потенц. яме между точками остановки  $a(\varepsilon)$  и  $b(\varepsilon)$ . В квантовом случае такое «запирание» невозможно, т. к. частица путём туннельного перехода с определ. вероятностью «просачивается» через барьер и уходит на бесконечность. Соответственно этому отсутствуют дискретные уровни энергии. Однако при энергии, отвечающей квазистационарному состоянию, волновая ф-ция, осциллирующая в классич. области между точками остановки ( $a, b$ ), экспоненциально затухает в обе стороны от них внутри барьеров (рис. 9, б). Т. о., энергия квазистационарных состояний весьма близка к энергии стационарных состояний, существующих в поле, совпадающем с  $V(r)$  слева от вершины барьера и равном  $V_6$  справа от вершины. Энергия квазистационарных состояний может

быть приближённо определена по правилу квантования

Бора — Зоммерфельда:  $\int_a^b p dq = \pi \hbar (n + 1/2)$ . Для квази-

стационарного состояния амплитуда волновой ф-ции вне ямы (на рис. правее точки  $c$ ) значительно меньше, чем внутри ямы [отношение их квадратов пропорционально коэф. туннельного перехода  $D$  между точками ( $b, c$ )]. Для состояний, энергия к-рых отличается от квазистационарных, соотношение между амплитудами волновой ф-ции внутри и вне ямы обратное (рис. 9, в). На рис. 9, б качественно изображена волновая ф-ция, отвечающая квазистационарному состоянию с  $n = n_0$  ( $\varepsilon = \varepsilon_2$ ), а на рис. 9, в — с энергией  $\varepsilon'$ ,  $< \varepsilon_1 < \varepsilon' < \varepsilon_2$ . В квазистационарном состоянии вероятность вылета частицы из ямы в единицу времени приближённо равна  $w = vD$ , где  $v$  — частота классич. колебаний частицы между точками ( $a, b$ ), отвечающая наглядно числу «ударов» о барьер в единицу времени. Для высоковозбуждённых квазистационарных состояний  $v \approx \Delta\varepsilon/2\pi\hbar$ , где  $\Delta\varepsilon$  — расстояние между квазистационарными уровнями. Ввиду малости  $D$  для широких и высоких барьеров время жизни частицы внутри ямы ( $\tau = 1/w$ ) оказывается значительно больше периода колебаний внутри ямы. Из СН следует, что энергия квазистационарного состояния может быть определена лишь с неопределённостью  $\Gamma \sim \hbar/\tau$ . Эту величину наз. шириной квазистационарного уровня.

Формально энергия и ширина квазистационарного уровня могут быть получены путём решения ур-ния Шрёдингера с граничным условием, требующим, чтобы на больших расстояниях волновая ф-ция представляла собой расходящуюся сферич. волну:  $\psi \sim e^{ikr}/r$ . Это условие отвечает частице, вылетающей из ямы, и приводит к комплексным собств. значениям энергии, к-рые записываются в виде:  $\varepsilon = \varepsilon_0 - i\Gamma/2$  ( $\varepsilon_0$  и  $\Gamma$  — вещественные). Такая запись отвечает экспоненц. убыванию квадрата модуля волновой ф-ции внутри ямы со временем ( $\sim e^{-\Gamma t}$ ).

Квазистационарные состояния соответствуют полюсам амплитуды рассеяния, аналитически продолженной по энергии в комплексную плоскость, и при энергии налетающей частицы вблизи квазистационарного уровня — резонансам в рассеянии (см. Брейта — Вигнера Формула, Рассеяние микрочастиц). В плоскости комплексного  $l$  квазистационарным уровням (так же, как и стационарным) соответствуют определ. Редже траектории (см. Редже полюсов метод).

### Спин. Полный момент

Если осн. состояние составной системы (напр., атома или ядра) отделено энергетич. щелью от возбуждённых, то в процессах, где обмен энергией значительно меньше величины щели, систему можно считать элементарной, а её движение в полях, мало меняющихся на расстояниях порядка размеров системы, представлять как движение материальной точки с координатами центра масс системы. Если при этом в рассматриваемом состоянии система имеет момент, то его следует рассматривать как дополнит., внутр. переменную, характеризующую состояние частицы и влияющую на её поведение, напр., в магн. поле. Нет оснований считать, что подобная внутр. переменная отсутствует у частиц, к-рые при существующем уровне знаний принимаются за элементарные. Аппарат К. м. позволяет естеств. образом описать движение частицы с учётом её внутр. степени свободы, к-рая имеет смысл собств. момента и наз. спиновым моментом или просто спином. Для этого надо обобщить выражение (54) и считать, что в операторе бесконечно малого поворота системы  $\hat{O}_{\delta\varphi} \approx 1 + (i/\hbar)\hat{J}\delta\varphi$  оператор  $\hat{J}$  содержит две части: одна из них действует на координаты волновой ф-ции частицы  $\psi(x, y, z, \sigma, t)$  и представляет

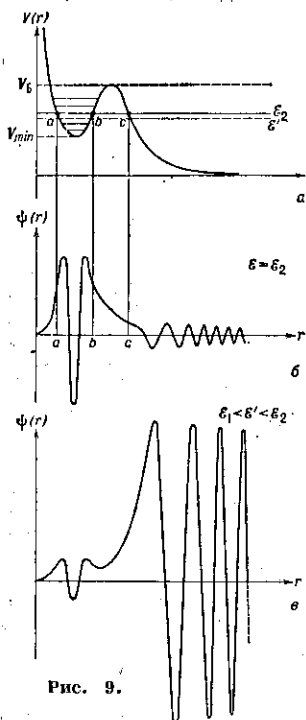


Рис. 9.

экспоненциально затухает в обе стороны от них внутри барьеров (рис. 9, б). Т. о., энергия квазистационарных состояний весьма близка к энергии стационарных состояний, существующих в поле, совпадающем с  $V(r)$  слева от вершины барьера и равном  $V_6$  справа от вершины. Энергия квазистационарных состояний может

собой оператор орбит. момента ( $\hat{L} = [\hat{r}\hat{p}]$ , а другая ( $\hat{S}$ ) действует на внутр. переменную  $\sigma$ , отвечающую спину. Оператор  $\hat{J}$  соответствует полному моменту и равен:  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ . Т. к.  $\hat{L}$  и  $\hat{S}$  действуют на разные переменные волновой ф-ции, их компоненты коммутируют между собой. Пусть  $\hat{A}$  — векторная величина, к-рой соответствует оператор  $\hat{A}$ . По определению вектора, при повороте он должен меняться след. образом:  $\hat{A} \rightarrow \hat{A} + [\delta\varphi \hat{A}]$ . Действуя оператором поворота на ф-цию  $\hat{A}_k \psi(x, y, z, \sigma, t)$  и учитывая, что  $[\delta\varphi \hat{A}]_k = e_{klm} \delta\varphi_l \hat{A}_m$  (где  $e_{klm}$  — единичный полностью антисимметричный тензор), можно получить перестановочные соотношения

$$[\hat{J}_i, \hat{A}_k] = i\hbar e_{ikl} \hat{A}_l, \quad (81)$$

к-рые должны быть справедливыми для любого вектора. Используя в качестве  $\hat{A}$  в (81) операторы  $\hat{J}$ ,  $\hat{L}$ ,  $\hat{S}$  и учитывая коммутативность  $\hat{L}_i$  и  $\hat{S}_k$ , можно прийти к заключению, что операторы компонент полного, орбитального и спинового моментов подчиняются одинаковым коммутац. соотношениям:  $[\hat{J}_i, \hat{J}_k] = i\hbar e_{ikl} \hat{J}_l$ ,  $[\hat{L}_i, \hat{L}_k] = i\hbar e_{ikl} \hat{L}_l$ ,  $[\hat{S}_i, \hat{S}_k] = i\hbar e_{ikl} \hat{S}_l$ . Из одних только этих перестановочных соотношений следует, во-первых, что любая компонента  $S_i$  измеряема одновременно с квадратом спина  $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ , т. е.  $[\hat{S}_i, S^2] = 0$  (в качестве такой компоненты обычно выбирают проекцию на ось  $z$ ), и, во-вторых, что собств. значения  $\sigma$  оператора проекции спина на выделенную ось, отличаясь друг от друга на 1 (в единицах  $\hbar$ ), заключены между соседними максимальным ( $S$ ) и минимальным ( $-S$ ) значениями, т. е. принимают  $(2S+1)$  значений:  $S, S-1, \dots, -S$ . Отсюда следует, что  $S$  может быть целым или полуцелым, в то время как квантовое число орбит. момента принимает только целые значения. О величине  $S$  говорят как о значении спина частицы. Из перестановочных соотношений следует также, что квадрат спина (в единицах  $\hbar^2$ ) равен  $S(S+1)$ , и может быть получен явный вид матриц операторов проекции спина  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  в представлении, где в качестве измеримой величины берётся проекция спина на ось  $z$ . Матричными элементами, отличными от нуля, являются

$$\langle \sigma+1 | \hat{S}_x | \sigma \rangle = \langle \sigma | \hat{S}_x | \sigma+1 \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(S-\sigma)(S+\sigma+1)},$$

$$\langle \sigma+1 | \hat{S}_y | \sigma \rangle = -\langle \sigma | \hat{S}_y | \sigma+1 \rangle =$$

$$= -\frac{i}{2} \sqrt{(S-\sigma)(S+\sigma+1)},$$

$$\langle \sigma | \hat{S}_z | \sigma \rangle = \sigma.$$

Задание этих матриц полностью определяет действие операторов проекции спина на волновую ф-цию системы, к-рую с учётом возможных значений внутр. переменной удобно представлять в виде столбца с  $(2S+1)$  компонентами:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_S(x, y, z, t) \\ \Psi_{S-1}(x, y, z, t) \\ \dots \\ \Psi_{-S}(x, y, z, t) \end{pmatrix},$$

где  $\Psi_\sigma(x, y, z, t)$  отвечает волновой ф-ции частицы в состоянии с  $S_z = \sigma$ .

Опыт показал, что спин электрона, протона и нейтрона равен  $1/2$  (т. е. внутр. переменная, отвечающая спину, принимает для них 2 значения). В случае спина  $1/2$

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(x, y, z, t) \\ \Psi_{-1/2}(x, y, z, t) \end{pmatrix},$$

а оператор спина имеет в этом представлении вид

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \sigma, \quad (82)$$

где  $\sigma(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  — Паули матрицы,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Со спином частицы может быть связан её магн. момент  $\mu$ , к-рый принято выражать в виде

$$\mu = \frac{e}{2mc} gS;$$

здесь величина  $e/2mc$  — гиромагнитное отношение для орбит. движения, а величина  $g$  безразмерна. Для электрона и мюона  $g=2$  (с точностью до радиационных поправок). Теоретич. объяснение равенства  $g=2$  было одно из достижений релятивистского ур-ния Дирака. Нерелятивистское квантовомеханич. движение частиц со спином  $1/2$  описывается Паули уравнением.

Взаимодействие магн. момента атомного электрона с магн. полем, создаваемым ядром в системе покоя электрона, вместе с учётом релятивистских эффектов (т. н. томаговской прецессии) приводит к спин-орбитальной  $LS$ -связи, к-рая определяет тонкую структуру атомных спектров (см. Спин-орбитальное взаимодействие). При наличии  $LS$ -связи сохраняющимися являются величина полного момента  $J$  и его проекция  $J_z$ ; сохраняются также величины  $L$  и  $S$ , но не их проекции на ось  $z$ . Наглядно можно представить, что векторы  $L$  и  $S$ , складываясь, прецессируют вокруг направления  $J$ , а сам вектор  $J$  с равной вероятностью лежит на поверхности конуса с осью вдоль оси  $z$ , так что сохраняется проекция  $J_z$  на эту ось (рис. 10). Из этой картины сле-

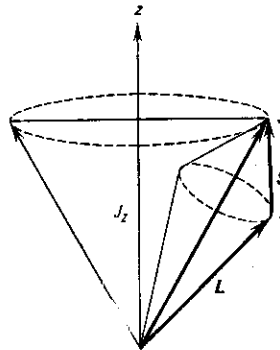


Рис. 10.

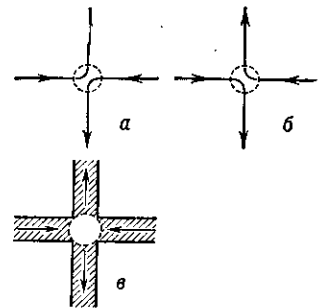


Рис. 11.

дует, что сохраняются проекции на  $J$  величин  $L$  и  $S$  [т. е.  $(LJ)$  и  $(SJ)$ ], а также величина  $(LS)$ . Разл. уровни тонкой структуры соответствуют разным значениям  $J$ . Взаимодействие магн. момента ядра с магн. полем, создаваемым электронной оболочкой (за счёт орбит. и спиновых моментов), приводит к дополнит. расщеплению и сверхтонкой структуре атомных уровней.

### Системы многих частиц. Тожественные частицы

Квантовомеханич. ур-ние движения для системы, состоящей из  $N$  частиц, описывается ур-нием Шрёдингера, содержащим потенц. энергию, зависящую от координат всех частиц и включающую как воздействие на них внеш. поля, так и взаимодействие частиц между собой. Волновая ф-ция также является ф-цией координат всех частиц. Её можно рассматривать как волну в  $3N$ -мерном пространстве.

Если квантовомеханич. системы состоят из одинаковых частиц, то в них наблюдается специфич. явление, не имеющее аналогии в классич. механике (хотя и в классич. механике случай одинаковых частиц тоже имеет нек-рую особенность). Пусть, напр., столкнулись две одинаковые «классич.» частицы (первая двигалась слева, а вторая — справа) и после столкновения разлетелись в разные стороны (напр., первая — вверх, вторая — вниз). Для результата столкновения не имеет

значения, какая из частиц полетела, напр., вверх, поскольку частицы одинаковы, — практически надо учесть обе возможности (рис. 11, а и 11, б). Однако в принципе в классич. механике можно различить эти два процесса, т. к. можно проследить за траекториями частиц во время столкновения. В К. м. траекторий, в строгом смысле этого слова, нет, и область столкновения обе частицы проходят с нек-рой неопределённостью, с «размытыми траекториями» (рис. 11, в). В процессе столкновения области размытия перекрываются, и невозможно даже в принципе различить эти два случая рассеяния. Следовательно, в К. м. одинаковые частицы полностью неразличимы — тождественны. Не имеет смысла говорить о двух разных случаях рассеяния, есть только один случай — одна из одинаковых частиц полетела вверх, другая — вниз, индивидуальности у частиц нет. Все состояния, получающиеся перестановкой одинаковых частиц, в К. м. (в отличие от классической) неразличимы и при подсчёте числа состояний должны приниматься за одно состояние (это разрешает парадокс Гиббса в статистич. физике).

Квантовомеханич. принцип неразличимости одинаковых частиц можно сформулировать математически на языке волновых ф-ций. Вероятность нахождения частиц в данном месте пространства определяется квадратом модуля волновой ф-ции, зависящей от координат обеих частиц,  $|\psi(1, 2)|^2$ , где 1 и 2 означают совокупность пространств и спиновых переменных соответственно первой и второй частицы. Тождественность частиц требует, чтобы при перемене их местами вероятности были одинаковыми:

$$|\psi(1, 2)|^2 = |\psi(2, 1)|^2.$$

Отсюда вытекают две возможности:

$$\psi(1, 2) = \psi(2, 1),$$

$$\psi(1, 2) = -\psi(2, 1).$$

Если при перемене частиц местами волновая ф-ция не меняет знака, то она наз. с и м м е т р и ч н о й, если меняет — а н т и с и м м е т р и ч н о й. Поскольку только суперпозиция ф-ций одинаковой симметрии обладает определ. симметрией, то в соответствии с принципом суперпозиции все состояния к.-л. пары одинаковых частиц должны описываться либо симметричными, либо антисимметричными волновыми ф-циями. Т. к. все взаимодействия одинаковых частиц симметричны относительно переменных 1, 2 (т. е. гамма-квант коммутирует с оператором перестановки), то свойства симметрии или антисимметрии волновой ф-ции сохраняются во времени. Это означает, что требование одной определ. симметрии относительно перестановки одинаковых частиц не противоречит принятым ранее постулатам К. м.

В системе из большего числа одинаковых частиц могли бы в принципе осуществляться более сложные представления группы перестановок частиц (см. *Парастатистика*). Однако, как показывает опыт, в системе из произвольного числа тождеств. частиц имеет место симметрия или антисимметрия относительно перестановки любой пары частиц. Свойство симметрии или антисимметрии оказывается характерным признаком данного сорта частиц. Соответственно все частицы делятся на два класса. Частицы, описываемые симметричными волновыми ф-циями, наз. *бозонами*, антисимметричными — *фермионами*. Эмпирически было установлено правило, связывающее симметрию волновых ф-ций тождеств. частиц со значением их спина (т. н. связь спина и статистики). В нерелятивистской К. м. оно было принято в качестве постулата:

V. Частицы с целым спином являются бозонами, с полуцелым — фермионами.

В дальнейшем связь спина и статистики была в определ. предположениях обоснована теоретически Паули (*Паули теорема*, являющаяся одной из осн. теорем релятивистской К. м.). В частности, фермионами явля-

ются все *лептоны*, *барионы*, *кварки*, а бозонами — фотоны, *промежуточные векторные бозоны*, *глюоны*,  $\pi$ - и  $K$ -мезоны и др. Сложные частицы (напр., атомные ядра), состоящие из нечётного числа фермионов, являются фермионами, а из чётного — бозонами.

Свойства симметрии волновой ф-ции определяют статистич. свойства системы. Пусть, напр., взаимодействующие тождеств. частицы находятся в одинаковых внеш. условиях (напр., во внеш. поле). Состояние такой системы можно определить, задав *числа заполнения* — числа частиц, находящихся в каждом данном (индивидуальном) состоянии, т. е. имеющих одинаковые наборы квантовых чисел. Если тождеств. частицы имеют одинаковые квантовые числа, то их волновая ф-ция симметрична относительно перестановки частиц. Отсюда следует, что два одинаковых фермиона не могут находиться в одинаковых состояниях, т. к. для фермионов волновая ф-ция должна быть антисимметричной. Это свойство наз. принципом запрета Паули (принципом Паули). Т. о., числа заполнения для фермионов могут принимать лишь значения 0 или 1. Принцип Паули существенно влияет на поведение электронов в атомах, молекулах и т. д. Для бозонов же числа заполнения могут принимать произвольные целые значения. Поэтому с учётом квантовомеханич. свойств тождеств. частиц существуют два типа статистик: *Ферми — Дирака статистика* для фермионов и *Бозе — Эйнштейна статистика* для бозонов. Пример ферми-системы — электронный газ в металле, пример бозе-системы — газ фотонов (т. е. равновесное эл.-магн. излучение), жидкий  $^4\text{He}$ .

Принцип Паули является определяющим для объяснения периодич. системы элементов Менделеева, ядерных оболочек (см. *Ядро атомное*); он объясняет характерные свойства электронов в металлах, напр. их теплоёмкость и электропроводность.

#### Обменное взаимодействие. Химическая связь

Молекула представляет собой связанную систему ядер и электронов, между к-рыми действуют электрич. (кулоновские) силы (притяжения и отталкивания). Т. к. ядра значительно тяжелее электронов, электроны движутся гораздо быстрее и образуют нек-рое распределение отрицат. заряда, в поле к-рого находятся ядра. В классич. механике и электростатике доказывается, что система такого типа неустойчива (*Ирришоу теорема*). Поэтому, даже если принять устойчивость атомов (к-рую нельзя объяснить на основе законов классич. физики), невозможно без специфически квантовомеханич. закономерностей объяснить устойчивость молекул. Особенно непонятно с точки зрения классич. представлений существование молекул из одинаковых атомов, т. е. с *ковалентной связью* (напр., простейшей молекулы  $\text{H}_2$ ). Оказалось, что свойство антисимметрии электронной волновой ф-ции так изменяет характер взаимодействия электронов, находящихся у разных ядер, что возникновение такой связи становится возможным.

Рассмотрим для примера молекулу водорода  $\text{H}_2$ , состоящую из двух протонов и двух электронов. Волновая ф-ция такой системы представляет собой произведение двух ф-ций, одна из к-рых зависит только от координат, а другая — только от спиновых переменных обоих электронов. Если суммарный спин электронов равен нулю (спины антипараллельны), спиновая ф-ция антисимметрична относительно перестановки спиновых переменных электронов, и для того чтобы полная волновая ф-ция (в соответствии с принципом Паули) была антисимметричной, координатная часть волновой ф-ции  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  должна быть симметричной относительно перестановки координат электронов. Приближённо она может быть представлена в виде

$$\psi \sim \psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_b(1)\psi_a(2), \quad (83)$$

где  $\psi_a(\mathbf{r}_i)$ ,  $\psi_b(\mathbf{r}_i)$  — координатная часть волновой ф-ции  $i$ -го электрона ( $i=1, 2$ ) соответственно у ядер  $a$  и  $b$ .

Кулоновское взаимодействие пропорционально плотности электрич. заряда  $\rho = e|\psi|^2 = e\psi\psi^*$ . При учёте свойств симметрии  $\psi(r_1, r_2)$ , помимо плотностей обычного вида:

$$e|\psi_a(1)|^2|\psi_b(2)|^2, \quad e|\psi_b(1)|^2|\psi_a(2)|^2,$$

соответствующих движению отд. электронов около разных ядер, появляются добавки к плотности вида:

$$e\psi_a^*(1)\psi_b(1)\psi_b^*(2)\psi_a(2),$$

$$e\psi_b^*(1)\psi_a(1)\psi_a^*(2)\psi_b(2).$$

Они наз. обменной плотностью, потому что возникают как бы за счёт обмена электронами между двумя атомами. Именно эта обменная плотность, приводящая к увеличению плотности отрицат. заряда между двумя положительными зарядами, и обеспечивает устойчивость молекулы в случае ковалентной хим. связи. При суммарном спине электронов, равном 1,  $\psi(r_1, r_2)$  антисимметрична, т. е. в (83) перед вторым слагаемым стоит знак минус и обменная плотность имеет отрицат. знаки, следовательно, уменьшает плотность отрицат. электрич. заряда между ядрами, что приводит как бы к дополнит. отталкиванию ядер. Т. о., симметрия волновой ф-ции приводит к «дополнит.», обменному взаимодействию. Характерна зависимость этого взаимодействия от спинов электронов. Непосредственно динамически спины не участвуют во взаимодействии — источником взаимодействия являются электрич. силы, зависящие только от расстояния между зарядами, но в зависимости от суммарного спина электронов волновая ф-ция, антисимметричная относительно перестановки двух электронов (вместе с их спинами), может быть симметричной или антисимметричной относительно перестановки только положения электронов (их координат). От типа же симметрии  $\psi(r_1, r_2)$  зависит знак обменной плотности и соответственно эфф. притяжение или отталкивание частиц в результате обменного взаимодействия. Т. о., суммарный спин электронов фактически определяет хим. связь. В двухатомных молекулах с одинаковыми ядрами от суммарного спина ядер зависит, в каких вращат. состояниях может находиться молекула. Так, молекула  $H_2$  при суммарном спине протонов  $S=1$  (ортоводород) может находиться только во вращат. состояниях с нечётным моментом, а при  $S=0$  (параводород) — только с чётным. Расчёты строения и свойств молекул на основе К. м. являются предметом квантовой химии.

Обменное взаимодействие играет существ. роль во мн. явлениях, напр. объясняет ферромагнетизм. В этом случае обменная энергия имеет др. знак, чем в молекуле. Благодаря отталкиванию электронов более низким по энергии оказывается состояние с антисимметричной координатной ф-цией и, следовательно, симметричной спиновой ф-цией (отвечающей параллельной ориентации спинов). Такое же различие имеет место для уровней орто- и парагелия.

Множество явлений в конденсир. телах тесно связано со статистикой образующих их частиц и с обменным взаимодействием. Условие антисимметрии волновой ф-ции для фермионов приводит к тому, что они при большой плотности как бы эффективно отталкиваются друг от друга, даже если между ними не действуют никакие силы. Эти силы отталкивания между электронами (обусловленные принципом Паули) дают осн. вклад в давление сжатого вещества (при давлениях выше неск. сотен млн. атм, когда ядра сближаются настолько, что начинают разрушаться атомные оболочки) и объясняют феномен белых карликов. В то же время между бозонами, к-рые описываются симметричными волновыми ф-циями, возникают как бы силы притяжения: чем больше бозонов находится в к.-л. состоянии, тем больше вероятность перехода др. бозонов системы в это состояние (подобного рода эффекты лежат в основе сверхтекучести и сверхпроводимости, принципа работы лазеров).

## Приближённые методы К. м.

Ур-ние Шрёдингера имеет точное аналитич. решение только для огранич. класса систем (важнейшими из к-рых являются осциллятор и водородоподобный атом). В связи с этим особое значение имеют всевозможные приближённые методы К. м.

Довольно общий приближённый метод К. м. — возмущений теория, применимая в случаях, когда дополнит. взаимодействие, рассматриваемое как возмущение, может считаться малым. При этом постановка задачи различна для возмущений, зависящих и не зависящих от времени. В последнем случае с помощью аппарата т. н. стационарной теории возмущений обычно ищут сдвиги дискретных уровней энергии или их расщепления (когда имеется вырождение) и соответствующие волновые ф-ции. Для возмущений, зависящих от времени, обычно ставится задача определения вероятностей переходов между разл. состояниями системы под влиянием возмущения. Между состояниями, принадлежащими сплошному спектру энергии, подобного рода переходы могут возникать и под действием возмущений, не зависящих от времени. В обоих случаях используется т. н. нестационарная теория возмущений. Одним из распространённых применений этой теории к задачам рассеяния является борновское приближение.

Для плавно меняющихся потенциалов успешно применяется квазиклассич. приближение, в особенности для вычисления коэф. туннельных переходов и уровней энергии (с помощью правил квантования Бора). Наиб. последоват. способ вычисления коэф. надбарьерного отражения и матричных элементов по быстро осциллирующим квазиклассич. ф-циям даёт аналитич. продолжение квазиклассич. решений в область комплексного переменного. Сходным с квазиклассическим является метод рассмотрения адиабатических возмущений. В ряде случаев области применимости квазиклассич. и борновского приближений дополняют друг друга. Так, для кулоновского рассеяния заряд. частицы на ядре условием применимости борновского приближения является  $Ze^2/\hbar v \ll 1$ , а квазиклассического  $Ze^2/\hbar v \gg 1$  (где  $v$  — скорость частицы).

Особые трудности вызывает рассмотрение систем с большим числом взаимодействующих частиц (напр., многоатомных молекул или ядер). В этом случае для определения уровней и волновых ф-ций успешно используются вариационные методы расчёта (эффективность к-рых существенно возрастает по мере увеличения мощности используемых ЭВМ). Если в многочастичной системе выделяются «быстрые» и «медленные» движения отд. составляющих, то возможно использование адиабатического приближения. Одним из наиб. распространённых способов рассмотрения квантовомеханич. движения в многочастичных системах является метод самосогласованного поля (см. также Хартри — Фока метод), к-рый особенно эффективен в сочетании с вариач. методами.

## Парадоксы К. м.

Если квантовомеханич. переход из одного состояния в другое может осуществляться через разл. промежуточные состояния, то амплитуда перехода представляет собой суперпозицию амплитуд альтернативных движений, или путей перехода. При этом вероятность перехода может быть не равна сумме вероятностей переходов по отд. путям (как в случае классич. движения), т. е. в К. м., как отмечалось выше, складываются амплитуды переходов (с их фазами), а не вероятности. В сложении альтернативных движений (или состояний) проявляется отсутствие наглядности квантовомеханич. принципа суперпозиции. И в этом по существу корень всех обсуждавшихся парадоксов К. м. Остановимся на нек-рых из них.

1) Проходит ли фотон сразу через две щели (см. рис. 1)?

Пусть  $|S\rangle$  — состояние фотона, выходящего из источника  $S$ , а размеры щелей  $a$  и  $b$  (для простоты) значительно меньше длины волны. Тогда  $\langle a|S\rangle$  и  $\langle b|S\rangle$  — амплитуды вероятности обнаружить фотон в состояниях  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$ , отвечающих попаданию его соответственно в щель  $a$  и  $b$ . Обозначая амплитуды вероятности попадания фотона из состояния  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$  в произвольную точку экрана  $x$  символами  $\langle x|a\rangle$  и  $\langle x|b\rangle$ , можно представить амплитуду перехода фотона из источника  $S$  в точку  $x$  в виде суммы:

$$\langle x|S\rangle = \langle x|a\rangle\langle a|S\rangle + \langle x|b\rangle\langle b|S\rangle = \varphi_1 + \varphi_2, \quad (84)$$

где  $\varphi_1, \varphi_2$  обозначены первый и второй члены в сумме. Вероятность  $w_{xS}$  попадания фотона в точку  $x$  может быть представлена в виде:

$$w_{xS} \stackrel{!}{=} |\varphi_1 + \varphi_2|^2 = |\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2 + (\varphi_1^* \varphi_2 + \varphi_1 \varphi_2^*). \quad (85)$$

Первые два члена в (85) неотрицательны и совпадают с вероятностями попадания в точку  $x$  классич. частицы, движущейся соответственно по траекториям  $Sax$  и  $Sbx$ . Третий член — интерференционный, возникающий из-за того, что в (84) складываются амплитуды двух альтернативных переходов. Интерференц. член может обратиться в нуль вероятность  $w_{xS}$  даже в том случае, когда  $|\varphi_1|^2 \neq 0$  и  $|\varphi_2|^2 \neq 0$ . При  $\lambda \rightarrow 0$  интерференц. член быстро осциллирует с изменением координаты точки  $x$ , так что его ср. значение, взятое по малой окрестности  $\delta x$ , обращается в нуль и вероятность  $w_{xS}$  совпадает с тем, что даёт классич. представление о движении частиц по определ. траекториям. В условиях же, когда наблюдается интерференц. картина, в амплитуде (84) обязательно присутствуют альтернативные пути перехода: понятие определ. траектории теряет смысл. Поскольку амплитуда вероятности описывает движение отд. частицы, выражение (84) подразумевает, что в терминах амплитуды вероятности частица одновременно проходит через две щели —  $a$  и  $b$ . Это противоречит корпускулярным представлениям. Избежать формально логич. противоречия (возможность для частицы пройти одновременно двумя путями) позволяет вероятностная интерпретация.

Подчеркнём, что К. м., основываясь на понятии наблюдаемой физ. величины, в состоянии отвечать лишь на такие вопросы, к-рые могут быть сформулированы в терминах определённой (хотя бы мысленной) измерит. процедуры. Поэтому вопрос о том, проходит ли частица сразу через две щели, формулируется так: возможно ли зарегистрировать одновременно прохождение частицы через эти щели? Такая постановка вопроса предполагает наличие детекторов, регистрирующих прохождение частицы. В соответствии с корпускулярными представлениями для каждой частицы, испущенной источником, будет срабатывать лишь один детектор (с вероятностями  $|\langle a|S\rangle|^2$  и  $|\langle b|S\rangle|^2$ , т. е. зарегистрировать прохождение частицы одновременно через две щели не удастся. Но фиксация щели, через к-рую прошла частица, т. е. фиксация её траектории, оставляет в амплитуде (84) лишь один член. Поэтому статистич. распределение частиц на экране после прохождения большого их числа будет отвечать классич. распределению  $|\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2$ . Т. о., попытка определить траекторию частицы является таким вмешательством в процесс, к-рое ликвидирует интерференцию.

Для интерференции существенно наличие неск. возможных путей перехода из нач. состояния в конечное. Это относится не только к дифракции на двух щелях. Так, взаимная компенсация амплитуд перехода  $K^0 \rightleftharpoons \bar{K}^0$  (см. *К-мезоны*) через промежуточные состояния кварк-антикварков  $u\bar{d}$ ,  $\bar{u}d$ ,  $s\bar{s}$  объяснила в механизме Глэшоу — Илюполуса и Майани наблюдаемую разность масс короткоживущих и долгоживущих каонов и поэтому явилась в своё время одним из наиб. веских теоретич. аргументов в пользу гипотезы существования  $s$ -кварков (см. *Электрослабое взаимодействие*).

2) Волновая  $\psi$ -ция частицы в конфигурац. представлении является решением ур-ния Шрёдингера вместе с граничными условиями, накладываемыми физ. соображениями. При этом движение частицы не определяется локальным действием на неё силовых полей. В К. м. существует (исчезающее в классич. пределе) нелокальное воздействие на частицу. Этот эффект также трудно понять, исходя из классич. представлений. Пусть, напр., в источн. яме радиуса  $a$  существует уровень с небольшой энергией связи  $\varepsilon$ . Тогда вне ямы волновая  $\psi$ -ция должна убывать по закону  $\psi \sim \exp\{-\sqrt{2\mu\varepsilon/\hbar}r\}$ , и характерный радиус области, в к-рой движется частица,  $r_0 \sim \hbar/\sqrt{2\mu\varepsilon}$ , может при достаточно малом  $\varepsilon$  значительно превышать радиус действия сил  $a$ :  $r_0 \gg a$  (подобная ситуация осуществляется в дейтроне). Такая возможность частице уходить на расстояния, где на неё уже не действуют никакие силы, и вместе с тем обладать финитным движением — характерный квантовомеханич. эффект, необъяснимый с точки зрения классич. механики. Аналогичным образом в К. м. возникает явление резонансного рассеяния. Эфф. сечение в этом случае имеет порядок  $\pi\lambda^2$ , где  $\lambda$  — де-бройлевская длина волны рассеиваемой частицы; при малых энергиях оно может значительно превышать «геом.» сечение  $\pi a^2$  ( $a$  — радиус действия сил). Одно из проявлений нелокального характера силового воздействия в К. м. — *Ааронова — Бома эффект*.

3) Принципиальное значение для понимания интерпретации К. м. имело рассмотрение *Эйнштейна — Подольского — Розена парадокса*, заключающегося в том, что, согласно К. м., возможны корреляции между разл. измерениями, проводимыми в разных точках, разделённых пространственноподобными *интервалами* (что, согласно *относительности теории*, казалось бы, исключает возможность к.-л. корреляции). Подобного рода корреляции возникают потому, что результат измерений в к.-л. одной точке меняет информацию о системе и позволяет предсказывать результаты измерения в др. точке (без участия к.-л. материального носителя, к-рый должен был бы двигаться со сверхсветовой скоростью, чтобы обеспечить влияние одного измерения на другое).

Возможность проверить количественно при измерении указанных корреляций отличие предсказаний К. м. от предсказаний любой теории со скрытыми параметрами (в рамках спец. теории относительности) была указана Дж. Беллом (J. Bell) в 1964 (см. *Белла неравенства*). Эксперим. проверка неравенства Белла свидетельствует в пользу принятой интерпретации К. м. Общая теорема о невозможности нестатистич. интерпретации К. м. (при условии сохранения одного из её положений — соответствия между физ. величинами и операторами) была доказана в 1927 Дж. фон Нейманом (J. von Neumann).

*Лит.:* Классические труды — Гейзенберг В., *Физические принципы квантовой теории*, пер. с нем., Л.—М., 1932; Паули В., *Общие принципы волновой механики*, пер. с нем., М.—Л., 1947; Дирак П., *Принципы квантовой механики*, пер. с англ., 2 изд., М., 1979; Нейман И., *Математические основы квантовой механики*, пер. с нем., М., 1964; *Учебники* — Блохинцев Д. И., *Основы квантовой механики*, 6 изд., М., 1983; Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, 3 изд., М., 1974; Шифф Л., *Квантовая механика*, пер. с англ., 2 изд., М., 1959; Давыдов А. С., *Квантовая механика*, 2 изд., М., 1973; Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М., *Квантовая механика*, пер. с англ., М., 1978; Мессиа А., *Квантовая механика*, пер. с франц., т. 1—2, М., 1978—79; Джеммер М., *Эволюция понятий квантовой механики*, пер. с англ., М., 1985. С. С. Герштейн, В. Б. Берестецкий.

**КВАНТОВАЯ ОПТИКА** — раздел оптики, изучающий статистич. свойства световых полей и квантовое проявление этих свойств в процессах взаимодействия света с веществом. Представление о квантовой структуре излучения введено М. Планком (M. Planck) в 1900. Световое поле, как и любое физ. поле, в силу своей квантовой природы является объектом статистическим, т. е. его состояние определяется в вероятностном смысле. С 60-х гг. началось интенсивное изучение статистич.