Глава 9

ВЪЛНОВО УРАВНЕНИЕ НА ШРЬОДИНГЕР И ИЗМЕНЕНИЕ НА ФИЗИЧНИТЕ ВЕЛИЧИНИ С ВРЕМЕТО

ДОПЪЛНИТЕЛНА ЛИТЕРАТУРА

1. Райчев П., Физика на атомните системи, Наука и изкуство, 1980, София, гл. 1, 2.
2. Блохинцев, Д. И., Основы квантовой механики, Москва, Высшая школа, 1963, § 28, 30, 31, 33.
3. Мессиа А., Квантовая механика, том 1, Москва, Наука, 1978, гл. 5 – разд.. I, IV, V, гл. 7.
4. Шпольский, Э. Ф., Атомная физика, т. II, Москва, Наука, 1974, § 21 ÷ 26.

§ 9.1. ВЪЛНОВО УРАВНЕНИЕ НА ШРЬОДИНГЕР

Познаването на вълновата функция на една квантовомеханична система ни позволява да опишем нейното състояние. Операторът $\hat{f}$ на физичната величина ни дава възможност да определим какви стойности може да приема тази величина и какво е тяхното вероятностно разпределение. За анализа на една квантова система нейното състояние в даден момент не е достатъчно. Необходимо е да знаем поведението, изменението на състоянието с времето. Тогава бихме могли да определим и как се изменят физичните величини с времето. И така въпросът, който поставяме, е как се изменя с времето вълновата функция ψ. С други думи, ако в момент от времето $t=0$ тя е $\psi(\mathbf{r},0)$, каква ще бъде $\psi(\mathbf{r},t)$?

В класическата механика известни уравнения позволяват, ако знаем състоянието в даден момент от време, да го определим във всеки следващ момент. В механиката на Нютон основното уравнение на движение (вторият закон на Нютон) позволява, ако знаем координатите и скоростите (или импулсите) на частиците в даден момент от време, да ги определим в произволен следващ момент. При метода на Хамилтон, ако знаем канонично спрегнатите обобщени координати и импулси в момент t, можем от уравненията на Хамилтон да ги определим в произволен момент от време. Аналогично в квантовата механика, за да знаем изменението на състоянието, е необходимо уравнение, което да се удовлетворява от вълновата функция ψ. При това ще обърнем внимание на една характерна особеност на причинността в квантовата механика. В класическата механика, ако знаем стойността на една величина в момент $t=0$, еднозначно можем да определим нейната стойност в момент t. *В квантовата механика, ако знаем вероятностното разпределение на една величина при $t=0$, можем да определим вероятностното ѝ разпределение при произволно* t. С други думи, в квантовата механика причинността има статистически, вероятностен характер за разлика от детерминистичния ѝ характер в класическата механика.

Вълновата функция удовлетворява уравнението на Шрьодингер. Това е основно положение в квантовата механика. Уравнението на Шрьодингер не се извежда – то се постулира (както се постулира вторият закон на Нютон). Някои свойства на уравнението на

Шрьодингер могат да се установят от особеностите на квантовомеханичните системи.

Съгласно принципа на суперпозицията, ако една система може да се намира в състояния с вълнови функции $\psi_1, \psi_2, \psi_3, ..., \psi_n$, тя може да се намира и в състояние с вълнова функция $\psi = \sum_i C_i \psi_i$. Всички тези функции $\psi_1, \psi_2, \psi_3, ..., \psi_n$ и ψ удовлетворяват уравнението на Шрьодингер. Това е възможно, ако то е линейно.

Състоянието в даден момент от време $t = 0$, т.е. вълновата функция $\psi(\mathbf{r}, 0)$ в този момент (една константа по отношение на времето), обуславя причинно състоянието в момент t, т.е. вълновата функция $\psi(\mathbf{r}, t)$. Това е възможно само ако уравнението на Шрьодингер е от първи ред, т.е. съдържа производна $\partial\psi / \partial t$. Ако е например от втори ред, при интегрирането биха се получили две константи. Тогава, за да знаем състоянието в момент t, вълновата функция при $t = 0$, т.е. $\psi(\mathbf{r}, 0)$, би била недостатъчна – ще е необходима още една величина.

Видът на уравнението на Шрьодингер получаваме, като изходим от познатата ни вълнова функция на свободна частица с импулс $\mathbf{p}$:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}.\mathbf{r}) \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x - p_y y - p_x z) \right]. \end{aligned} \tag{9.1}$$

Ще подчертаем, че това не е извеждане, а илюстрация на уравнението на Шрьодингер. Определяме последователно:

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} E\psi \right) = E\psi, \\ & -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi = \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{p_x^2}{\hbar^2} - \frac{p_y^2}{\hbar^2} - \frac{p_z^2}{\hbar^2} \right) \psi = \frac{p^2}{2m} \psi = E\psi. \end{aligned} \tag{9.2}$$

Приравняваме левите части и получаваме, че вълновата функция (9.1) удовлетворява уравнението

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi. \tag{9.3}$$

Тъй като операторът $\hat{H}$ за свободна частица има вида $\hat{H} = -\left(\hbar^2/2m\right)\Delta$, уравнение (9.3) може да се запише по следния начин:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi\left(\mathbf{r},t\right). \tag{9.4а}$$

Това е уравнението на Шрьодингер. То се удовлетворява не само от вълновата функция (9.1) на свободна частица (на плоска вълна на Дьо Бройл), но и от всяка вълнова функция $\psi\left(\mathbf{r},t\right)$ на произволна квантова система.

Ако системата има потенциална енергия $E_p\left(r\right)$ и следователно – хамилтониан $\hat{H} = -\left(\hbar^2 / 2m\right)\Delta + E_p\left(r\right)$, уравнението на Шрьодингер придобива следния вид:

$$i\hbar\frac{\partial\psi\left(\mathbf{r},t\right)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_p\left(r\right)\right]\psi\left(\mathbf{r},t\right). \tag{9.4б}$$

Ако ψ -функцията зависи хармонично от времето, т.е.

$$\psi\left(\mathbf{r},t\right) = \psi\left(\mathbf{r}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right), \tag{9.5}$$

уравнение (9.4б) се редуцира в (9.6а)

$$\Delta\psi\left(\mathbf{r}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - E_p\left(r\right)\right]\psi\left(\mathbf{r}\right) = 0, \tag{9.6а}$$

или записано чрез хамилтониана $\hat{H}$, имаме

$$\hat{H}\psi\left(\mathbf{r}\right) = E\psi\left(\mathbf{r}\right). \tag{9.6б}$$

Уравнението (9.6) *се нарича стационарно уравнение на Шрьодингер за разлика от уравнение* (9.4)*, което се нарича общо уравнение на Шрьодингер. Понякога те се наричат съответно независещо от времето уравнение на Шрьодингер и зависещо от времето уравнение на Шрьодингер.*

§ 9.2. СТАЦИОНАРНИ СЪСТОЯНИЯ

По определение *стационарно състояние е това, в което хамилтонианът $\hat{H}$ не зависи от времето*.

Разглеждайки за простота едномерно движение, записваме уравнението на Шрьодингер (9.4а) с оператор $\hat{H}$, независещ от времето, така:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x,t). \tag{9.7}$$

Това уравнение може да се реши по метода на разделяне на променливите. Решението търсим като произведение от две функции: $\psi(x)$, зависеща само от x, и $\varphi(t)$, зависеща само от t:

$$\psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t). \tag{9.8}$$

Заместваме в (9.7):

$$i\hbar \psi(x) \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = \varphi(t)\hat{H}\psi(x). \tag{9.9}$$

Разделяме двете страни на уравнението на $\psi(x)\varphi(t)$ и получаваме

$$i\hbar \frac{\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t}}{\varphi(t)} = \frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)}. \tag{9.10}$$

В лявата страна на уравнението имаме функция от времето, а в дясната – функция от координатата. Равенството е възможно само ако двете функции са равни на постоянна величина, т.е.

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = \mathrm{const}\,\varphi(t), \tag{9.11а}$$

$$\hat{H}\psi(x) = \mathrm{const}\,\psi(x). \tag{9.11б}$$

Уравнението (9.11б) е уравнение за собствените функции на оператора $\hat{H}$. Нека те са $\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), ..., \psi_n(x)$. За всяка една от тях числото const определя собствената стойност на оператора $\hat{H}$, т.е. на енергията: $\mathrm{const} = E_1, E_2, E_3, ..., E_n$; съответно функциите $\psi_k(x)$ са частни решения на уравнение (9.11б). На всяко такова решение $\psi_k(x)$ за уравнението (9.11а)

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_k(t)}{\partial t} = E_k \varphi_k(t) \tag{9.12}$$

се получава съответно частно решение (9.13)

$$\varphi(t)=A_k\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k t\right). \qquad (9.13)$$

Частното решение на изходното уравнение (9.7) съгласно (9.8) има вида

$$\psi_k(x,t)=\psi_k(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k t\right). \qquad (9.14)$$

Тъй като уравнение (9.7) е линейно, неговото общо решение е суперпозиция от частните решения:

$$\psi(x,t)=\sum_k C_k\psi_k(x,t)=\sum_k C_k\psi_k(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k t\right). \qquad (9.15)$$

Коефициентите C_k не зависят от времето t и координатата x и съгласно (5.3) се определят по следния начин:

$$C_k=\int\psi_k^*(x,t)\psi(x,t)dx. \qquad (9.16)$$

От решението на уравнението на стационарното състояние можем да направим следните изводи за общите свойства на такова състояние, независимо от конкретната квантова система:

1. Енергията на системата в стационарно състояние еднозначно определя зависимостта от времето. При собствено състояние, т.е. състояние с определена енергия (например E_k), тази зависимост е хармонична:

$$\varphi(t)=A_k\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k t\right)=A_k\exp(-i\omega_k t), \qquad \omega_k\equiv\frac{E_k}{\hbar}. \qquad (9.17)$$

Тук ω_k е ъглова честота.

2. Плътността на вероятността не зависи от времето:

$$\rho_k=\frac{dW_k}{dx}=\psi_k^*(x)\psi_k(x)=\rho_k(x). \qquad (9.18)$$

3. Средната стойност на една физична величина, която не зависи явно от времето ($f\neq f(t)$; $\hat{f}\neq\hat{f}(t)$), не се променя с времето:

$$\begin{aligned}\overline{f} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\hat{f}\psi(x,t)\,dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_k C_k^* \psi_k^*(x) \exp\left(\frac{i}{\hbar}E_k t\right) \sum_l C_l f_l \psi_l(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_l t\right) dx = \\ &= \sum_k C_k^* \exp\left(\frac{i}{\hbar}E_k t\right) \sum_l C_l f_l \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_l t\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(x)\psi_l(x)\,dx = \\ &= \sum_k C_k^* \exp\left(\frac{i}{\hbar}E_k t\right) \sum_l C_l f_l \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_l t\right) \delta_{kl} = \sum_k |C_k|^2 f_k \neq \overline{f}(t).\end{aligned} \tag{9.19}$$

4. В стационарно състояние с вълнова функция $\psi(x,t)$ (9.15) вероятността W_{f_i} да измерим стойността f_i на величината f не зависи от времето. Действително съгласно (4.52) тази вероятност е постоянна:

$$W_{f_i} = |C_i|^2. \tag{9.20}$$

5. Спектърът на енергията в стационарно състояние в централносиметрично поле зависи от знака на енергията (за доказателство вж. [1], § 49).

Когато пълната енергия на системата е отрицателна, тя има дискретен спектър. При това собствените функции $\psi_k(x)$ на оператора $\hat{H}$ се оказват различни от нула само в ограничена област (при $x \to \infty$ имаме $\psi(x) \to 0$). Такова състояние се нарича свързано.

Когато $E > 0$, $\psi(x) \propto \exp\left(\frac{i}{\hbar}p_x x\right)$, т.е. $\psi(x)$ има вида на функцията на плоска вълна. Плътността на вероятността не зависи от x: тогава $\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \mathrm{const}$ и енергията има непрекъснат спектър. Състоянието се нарича свободно.

§ 9.3. ИЗМЕНЕНИЕ НА ФИЗИЧНИТЕ ВЕЛИЧИНИ С ВРЕМЕТО

Прякото прилагане на понятието производна към точната стойност на една квантова величина е невъзможно, тъй като в даден момент от времето тя може да е неопределена. Но то може да се приложи към средната стойност на величината (вж. [3], § 26 или [Л23], с. 173). Средната стойност $\overline{f}$ на величината f може да бъде изразена чрез функцията $\psi(x,t)$ и оператора $\hat{f}$ (5.7) и е дефинирана във всеки момент от времето; нещо повече, тъй като ψ^*, ψ и $\hat{f}$ са непрекъснати функции на времето, то и тя е непрекъсната. С времето тази средна стойност се изменя. Можем да поставим въпроса колко бързо се изменя тя, т.е. каква е скоростта на изменението й. Това означава да намерим производната по времето от средната стойност $\overline{f}$:

$$\frac{d\overline{f}}{dt} = \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\,\hat{f}\psi(x,t)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t}\hat{f}\psi(x,t)\,dx + \\ + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\psi(x,t)\,dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\hat{f}\,\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}\,dx. \tag{9.21}$$

Функцията $\psi(x,t)$ удовлетворява уравнението на Шрьодингер, а $\psi^*(x,t)$ – комплексно спрегнатото му:

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t}, \qquad \hat{H}^*\psi^* = -i\hbar\frac{\partial \psi^*}{\partial t}. \tag{9.22}$$

Оттук определяме $\partial\psi/\partial t$ и $\partial\psi^*/\partial t$ и замествайки ги в (9.21), получаваме

$$\frac{d\overline{f}}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \hat{H}^*\psi^*\,\hat{f}\psi\,dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi * \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\psi\,dx + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi * \,\hat{f}\hat{H}\psi\,dx. \tag{9.23}$$

В първия интеграл сменяме местата на функциите $\hat{H}^*\psi^*(x,t)$ и $\hat{f}\psi(x,t)$ и прилагаме правилото (5.20) за ермитовост на оператора

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \hat{H}^*\psi * (x,t)\,\hat{f}\psi(x,t)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}\psi(x,t)\hat{H}^*\psi * (x,t)\,dx = \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi * (x,t)\hat{H}\hat{f}\psi(x,t)\,dx. \tag{9.24}$$

Заместваме в (9.23) и получаваме

$$\frac{d\overline{f}}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\psi(x,t)\,dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\frac{\hat{f}\hat{H} - \hat{H}\hat{f}}{i\hbar}\psi(x,t)\,dx = \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{\hat{f}\hat{H} - \hat{H}\hat{f}}{i\hbar}\psi(x,t)\,dx\right). \tag{9.25}$$

Въвеждаме означението

$$\frac{\hat{f}\hat{H}-\hat{H}\hat{f}}{i\hbar}=\frac{[\hat{f},\hat{H}]}{i\hbar}=\left\{\hat{f},\hat{H}\right\}. \tag{9.26}$$

Както ще видим по-долу, в квантовата механика операторът $\left\{\hat{f},\hat{H}\right\}$ *изпълнява същата роля, каквато изпълняват скобките на Поасон в класическата механика – вж.* (3.30). *Затова* $\left\{\hat{f},\hat{H}\right\}$ *се нарича квантовомеханични скобки на Поасон* и (9.26) се разглежда като определение. Окончателно за производната от средната стойност $\overline{f}$ получаваме

$$\frac{d\overline{f}}{dt}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi*(x,t)\left(\frac{\partial\hat{f}}{\partial t}+\left\{\hat{f},\hat{H}\right\}\right)\psi(x,t)\,dx. \tag{9.27}$$

В скобките е написан операторът $\partial\hat{f}/\partial t+\left\{\hat{f},\hat{H}\right\}$ на една физична величина. В класическата механика пълната производна по времето от f (вж. 1.33) е

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+\left\{f,H\right\}. \tag{9.28}$$

Операторът на тази величина е $d\hat{f}/dt$, който е равен на оператора $\partial\hat{f}/\partial t+\left\{\hat{f},\hat{H}\right\}$. По такъв начин, изхождайки от аналогията с класическата механика, ние въвеждаме производна на оператор по времето:

$$\frac{d\hat{f}}{dt}=\frac{\partial\hat{f}}{\partial t}+\left\{f,\hat{H}\right\}. \tag{9.29}$$

Отчитайки това, можем да запишем (9.27) като

$$\frac{d\overline{f}}{dt}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi*(x,t)\frac{d\hat{f}}{dt}\psi(x,t)\,dx=\overline{\frac{df}{dt}}. \tag{9.30}$$

Последното равенство записахме по силата на определението за средна стойност на величината df/dt (7.14).

И така, търсейки отговора на въпроса, на какво е равна производната на $\overline{f}$, стигнахме неочаквано до интересен резултат: *производната по времето от средната стойност на една величина е* *равна на средната стойност на производната по времето на тази величина.*

И накрая ще отбележим, че когато операторът $\hat{f}$ не зависи явно от времето, неговата пълна производна по времето е

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \left\{ \hat{f}, \hat{H} \right\}, \tag{9.31}$$

т.е. тя е равна на квантовомеханичните скобки на Поасон на $\hat{f}$ и на оператора на Хамилтон $\hat{H}$.

§ 9.4. ИНТЕГРАЛИ НА ДВИЖЕНИЕТО

В класическата механика величината f е интеграл на движението, ако пълната производна по времето от f е равна на нула: $df / dt = 0$ (вж. (3.34)). Аналогично в квантовата механика f е интеграл на движението, ако $d\hat{f} / dt = 0$:

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{\partial\hat{f}}{dt} + \left\{ \hat{f}, \hat{H} \right\} = 0. \tag{9.32}$$

Когато $\hat{f}$ не зависи явно от времето, условието (9.32) се редуцира в

$$\left\{ \hat{f}, \hat{H} \right\} = 0, \tag{9.33}$$

т.е. f *е интеграл на движението, ако скобките на Поасон на оператора* $\hat{f}$ *и на оператора на Хамилтон са равни на ну*ла.

Когато f е интеграл на движението, т.е. когато е изпълнено (9.32), за производната от средната стойност $\overline{f}$ съгласно (9.30) получаваме

$$\frac{d\overline{f}}{dt} = 0, \qquad \overline{f} = \text{const} . \tag{9.34}$$

Средната стойност на една величина, която е интеграл на движението, не се променя с времето. Ще подчертаем различието между интегралите на движение в класическата механика и в квантовата механика: в първия случай самата величина остава постоянна с времето, а във втория – нейната средна стойност.

Ще отбележим още една особеност на интеграла на движението f в случая, когато f не зависи явно от времето. Тъй като в този случай

$\{\hat{f},\hat{H}\}=0$, то съгласно (9.26) и комутаторът $[\hat{f},\hat{H}]=0$. Последното означава, че операторите $\hat{f}$ и $\hat{H}$ имат общи собствени функции $\psi_k(x)$:

$$\begin{aligned} &\hat{f}\psi_k(x)=f_k\psi_k(x), \\ &\hat{H}\psi_k(x)=E_k\psi_k(x). \end{aligned} \tag{9.35}$$

Нека в този случай (f не зависи явно от времето) разгледаме състояние с вълнова функция $\psi(x,t)$. Да разложим тази функция по собствените функции $\psi_k(x)$:

$$\psi(x,t)=\sum_k C_k(t)\psi_k(x). \tag{9.36}$$

Всяка една от функциите $C_k(t)\psi_k(x)$ удовлетворява уравнението на Шрьодингер. Замествайки в това уравнение (например в (9.7)) и отчитайки (9.35), за $C_k(t)$ получаваме уравнение, напълно аналогично на (9.12), а неговите решения – на (9.13):

$$C_k(t)=C_k\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_kt\right). \tag{9.37}$$

По същество имаме стационарно състояние, за което съгласно (9.36) и (9.37) можем да запишем

$$\psi(x,t)=\sum_k C_k(t)\psi_k(x)=\sum_k C_k\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_kt\right)\psi_k(x). \tag{9.38}$$

Съгласно (9.37) постоянният коефициент C_k е равен на $C_k(t)$ при $t=0$:

$$C_k=C_k(0). \tag{9.39}$$

Вероятността да измерим стойността f_k на величината f е

$$W_{f_k}=\left|C_k(t)\right|^2=\left|C_k\right|^2=\left|C_k(0)\right|^2. \tag{9.40}$$

Извод: ако величината f е интеграл на движението и не зависи явно от времето, то в несобствено състояние $\psi(x,t)$ вероятността W_{f_k} за измерване на собствената стойност f_k не зависи от времето.

Ще разгледаме някои конкретни интеграли на движението на величини, независещи явно от времето.

Пример 1. Пълна енергия на една система, когато тя не зависи от времето. Тогава за хамилтониана $\hat{H}$, независещ явно от времето, можем да запишем

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \left\{ \hat{H}, \hat{H} \right\} = \frac{[\hat{H}, \hat{H}]}{i\hbar} = 0, \tag{9.41}$$

т.е. *енергията е интеграл на движението*. Равенството $d\hat{H}/dt = 0$ изразява закона за запазване на енергията.

Пример 2. Импулс на частица в постоянно потенциално поле $E_p\left(x, y, z\right) = \text{const}$. Тъй като потенциалната енергия е определена с точност до константа, можем да положим $E_p\left(x, y, z\right) = 0$ и тогава

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + E_p\left(x, y, z\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m_0}. \tag{9.42}$$

Операторите $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ и $\hat{p}^2$ комутират с оператора $\hat{H}$. Следователно за техните скобки на Поасон с оператора $\hat{H}$ (9.33) имаме

$$\left\{ \hat{p}_x, \hat{H} \right\} = 0, \quad \left\{ \hat{p}_y, \hat{H} \right\} = 0, \quad \left\{ \hat{p}_z, \hat{H} \right\} = 0, \quad \left\{ \hat{p}^2, \hat{H} \right\} = 0. \tag{9.43}$$

Импулсът **p** *и компонентите му* p_x, p_y, p_z *са интеграли на движението*.

Пример 3. Компонентата L_z *на момента на импулса и неговата стойност* L (*или* L^2) *в централносиметрично поле с потенциал* $E_p\left(r\right)$. В това поле операторът на Хамилтон може да се представи в следния вид (вж. (8.58)):

$$\hat{H} = \hat{E}_k\left(r, \theta, \varphi\right) + E_p\left(r\right) = \hat{E}_{k_r}\left(r\right) + \frac{\hat{L}^2\left(\theta, \varphi\right)}{2m_0 r^2} + E_p\left(r\right). \tag{9.44}$$

Операторите $\hat{L}_z$ и $\hat{L}^2$ не зависят от r. Освен това $\hat{L}_z$ комутира с $\hat{L}^2$, следователно

$$\begin{gathered} \left[\hat{L}_z, \hat{H} \right] = i\hbar \left\{ \hat{L}_z, \hat{H} \right\} = 0, \\ \left[\hat{L}^2, \hat{H} \right] = i\hbar \left\{ \hat{L}^2, \hat{H} \right\} = 0. \end{gathered} \tag{9.45}$$

В централносиметрично поле L_z и L^2 са интеграли на движението.

§ 9.5. ОСНОВНИ ПРИНЦИПИ НА КВАНТОВАТА МЕХАНИКА

Основен предмет на квантовата механика е предсказването на резултатите от експериментите над микросистемите – молекули, атоми и съставящите ги частици. Тя позволява да се предвидят възможните стойности, които се получават при измерването на физичните величини (за тях в курса често с е употребява понятието динамични променливи) и вероятността за получаване на тези стойности. Обобщаването на огромен брой изследвания с голям брой опити и наблюдения е довело до определени правила, с които се правят предсказванията. Съвкупността от тези правила съставят *основните принципи на теорията на квантовата механика.*

Дотук, в глави $6 \div 9$, дадохме представа за математичните основи на квантовата физика (за рамките на този учебник). По същество настоящият параграф е обобщение на този материал.

Строгото изложение на квантовата механика започва с постулатите, до които фактически стигнахме, следвайки нашия път на изложение. Нека тук сумираме основните принципи на квантовата механика.

1. Състоянието на квантовомеханичен обект се описва с вълнова функция (I постулат).
2. Физичните величини се описват с оператори (II постулат).
3. Операторите на физичните величини са ермитови (III постулат).
4. Собствените функции на един ермитов оператор $\hat{f}$, които са решения на уравнението $\hat{f}\psi_i = f\psi_i$, образуват пълна (в общия случай безкрайна) система от линейни независими функции (IV постулат). Произволна функция ψ може да се представи като линейна комбинация от тези функции $\psi = \sum_i C_i \psi_i$.

   Собствените функции са ортонормирани: за дискретна величина $\int \psi_i^* \psi_k d\mathbf{r} = \delta_{ik}$ и за непрекъснатата – $\int \psi_{p'}^* \psi_p d\mathbf{r} = \delta(p - p')$.
5. В състояния, в които измерването на физичната величина е възпроизводимо, за нея получаваме една от стойностите $f_1, f_2, f_3, ..., f_n$, които са собствени стойности на оператора $\hat{f}$; тези състояния се описват с вълновите функции $\psi_1, \psi_2, \psi_3, ..., \psi_n$, които са собствени функции на оператора $\hat{f}$: $\hat{f}\psi_i = f\psi_i$.
6. В състояние, в което измерването на физичната величина f е невъзпроизводимо, получаваме различни стойности, но винаги една от собствените стойности f_i на оператора $\hat{f}$; такова състояние е

суперпозиция от собствените състояния $\psi = \sum_i C_i \psi_i$, а вероятността да измерим стойността f_i е $W_{f_i} = |C_i|^2$.

7. В състояние, което се описва с вълнова функция ψ , средната стойност на величината f е $\overline{f} = \int \psi^* \hat{f} \psi dV$ (V постулат).
8. Ако две величини са съизмерими (съвместими), операторите им комутират и имат обща система от собствени функции; ако не са съизмерими – операторите им не комутират, а дисперсията им е свързана с релацията на Хайзенберг.
9. Вълновата функция удовлетворява уравнението на Шрьодингер (VI постулат).

Състоянието на квантовомеханичната система може да се опише с *вълнова функция* $\psi(\mathbf{r},t)$, която представлява един вектор в хилбертовото пространство. Съвкупността от стойности на физичните величини съответства на едно *състояние на системата*. Във всеки момент от времето това състояние може да се опише от този вектор в хилбертовото пространство. В гл. 6 видяхме, че поведението на една микрочастица се описва с вълнова функция $\psi(\mathbf{r},t)$. В предишните глави се убедихме, че $\psi(\mathbf{r},t)$ носи в себе си не само информация за движението на микрочастицата, но и за физичните величини (динамичните променливи), които определят това движение. В този смисъл вълновата функция определя състоянието на системата. Хилбертовият вектор $\psi(\mathbf{r},t)$ и векторът $A\psi(\mathbf{r},t)$ (A е произволно число) определят едно и също състояние. Поради това е удобно да приемем, че векторът на състоянието е нормиран към единица $(\psi,\psi) = \int \psi^*,\psi dV = \int |\psi|^2 dV = 1$ – това е още едно основание (освен вероятността) за нормировката на $\psi(\mathbf{r},t)$.

Динамичните променливи, които описват движението на микрообектите, вече не са скалари, вектори и тензори, а *оператори*.

В квантовата механика само *ермитови оператори* описват динамичните променливи.

Вълновата функция удовлетворява *уравнението на Шрьо*дингер, което определя нейната пространствена и времева зависимост. Уравнението на Шрьодингер е от първи ред по времето и в него е заключен *принципът за причинност* в квантовата механика – състоянието във всеки следващ момент $t > t_0$ еднозначно се определя от състоянието в началния момент t_0.

РЕЗЮМЕ

В квантовата механика се постулира, че вълновата функция удовлетворява уравнението на Шрьодингер

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi(\mathbf{r},t),$$

където $\hat{H}$ е хамилтонианът на системата. Видът му е $\hat{H}=-\left(\hbar^2/2m\right)\Delta+E_p(r)$, когато тя има потенциална енергия $E_p(r)$. То е линейно диференциално уравнение, което по отношение на времето е от първи ред.

Състояния, в които хамилтонианът $\hat{H}$ не зависи явно от времето, се наричат стационарни. Такива състояния се описват с ψ-функция, зависеща хармонично от времето:

$$\psi(\mathbf{r},t)=\psi(\mathbf{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right).$$

Уравнението, което удовлетворява пространствената част $\psi(\mathbf{r})$ на вълновата функция, се нарича стационарно уравнение на Шрьодингер:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r}) \quad \text{или} \quad \Delta\psi(\mathbf{r})+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-E_p(r)\right]\psi(\mathbf{r})=0.$$

В стационарно състояние:

- енергията на системата еднозначно определя зависимостта от времето;
- плътността на вероятността не зависи от времето;
- средната стойност $\overline{f}$ на една физична величина, която не зависи явно от времето $\left(f\neq f(t)\right)$, е константа;
- вероятността W_{f_i} да измерим стойността f_i на величината f не зависи от времето;
- спектърът на енергията е дискретен, когато пълната енергия на системата е отрицателна (свързано състояние), и непрекъснат, когато пълната енергия е положителна (свободно състояние).

Производната по времето от средната стойност на една величина е равна на средната стойност на производната по времето на тази величина:

$$\frac{d\overline{f}}{dt}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi*(x,t)\frac{d\hat{f}}{dt}\psi(x,t)dx=\overline{\frac{df}{dt}}.$$

Пълната производна по времето на един оператор е

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \left\{ \hat{f}, \hat{H} \right\},$$

където

$$\left\{ \hat{f}, \hat{H} \right\} = \frac{\hat{f}\hat{H} - \hat{H}\hat{f}}{i\hbar} = \frac{[\hat{f}, \hat{H}]}{i\hbar}$$

са квантовомеханичните скобки на Поасон за операторите $\hat{f}$ и $\hat{H}$. В квантовата механика те изпълняват роля, аналогична на тази на скобките на Поасон в класическата механика.

Физичната величина f е интеграл на движението, ако пълната производна на оператора ѝ $\hat{f}$ по времето е равна на нула: $d\hat{f}/dt = 0$. Когато операторът ѝ $\hat{f}$ не зависи явно от времето, т.е. $\partial\hat{f}/\partial t = 0$, и скобките на Поасон на оператора $\hat{f}$ и на оператора на Хамилтон са равни на нула, тя е интеграл на движението.

Средната стойност на една величина, която е интеграл на движението, не се променя с времето.

Съвкупността от използваните в квантовата механика правила образуват нейните основните принципи.

Квантовата механика се базира на следните постулати:

1. Състоянието на квантовомеханичен обект се описва с вълнова функция (I постулат).
2. Физичните величини се описват с оператори (II постулат).
3. Операторите на физичните величини са ермитови (III постулат).
4. Собствените функции на един ермитов оператор $\hat{f}$, които са решения на уравнението $\hat{f}\psi_i = f\psi_i$, образуват пълна (в общия случай безкрайна) система от линейни независими функции (IV постулат).
5. В състояние, което се описва с вълнова функция ψ, средната стойност на величината f е $\overline{f} = \int \psi^* \hat{f} \psi dV$ (V постулат).
6. Вълновата функция удовлетворява уравнението на Шрьодингер (VI постулат).

ВЪПРОСИ

1. Защо е необходимо уравнението на Шрьодингер?
2. Защо уравнението на Шрьодингер е от първи ред спрямо времето?
3. Защо уравнението на Шрьодингер е линейно?
4. Какъв е видът на: а) уравнението на Шрьодингер; б) стационарното уравнение на Шрьодингер?

5. Каква е зависимостта от времето на вълновата функция, удовлетворяваща стационарното уравнение на Шрьодингер?
6. Какви са свойствата на стационарните състояния?
7. От какво се определя характерът на спектъра на енергията в стационарно състояние?
8. На какво е равна производната по времето от средната стойност на една квантовомеханична величина?
9. Какво представляват скобките на Поасон в квантовата механика?
10. Какво е условието за интеграл на движението в квантовата механика?
11. Какъв е физичният смисъл на интеграла на движението?
12. Обяснете кои физични величини са интеграли на движението и защо в следните случаи: а) система с хамилтониан, независещ от времето; б) частица в постоянно поле; в) частица в централносиметрично поле.
13. Какво представляват основните принципи на квантовата механика?
14. Какъв е първият постулат на квантовата механика?
15. Как се постулира описването на динамичните променливи в квантовата механика?
16. С какви операторите се описват физичните величини и защо?
17. Какво е характерно за собствените функции и собствените стойности на ермитовите оператори?
18. Какви стойности получаваме за физичната величина, ако измерването е възпроизводимо?
19. Какви стойности получаваме за физичната величина, ако измерването е невъзпроизводимо?
20. Как се определя средната стойност на динамичната променлива?
21. Какъв е комутаторът на две съизмерими физични величини?
22. Какъв е комутаторът на две несъизмерими физични величини?
23. Кое уравнение определя пространствената и времевата зависимост на вълновата функция?

ЗАДАЧИ

1. Покажете чрез пряко заместване, че уравнението на Шрьодингер се удовлетворява от вълновата функция $\psi(x,t)=\psi(x)\exp(-iEt/\hbar)$, ако $\psi(x)$ удовлетворява стационарното уравнение на Шрьодингер с потенциал $E_p(x)$.

2. Докажете, че състоянието, образувано от суперпозицията на две стационарни състояния $\psi(x,t)=\psi_1(x)\exp(-iE_1t/\hbar)+\psi_2(x)\exp(-iE_2t/\hbar)$, не е стационарно. Зависи ли плътността на вероятността $\psi^*(x,t)\psi(x,t)$ от времето?

3. На какво са равни скобките на Поасон за операторите $\hat{p}_x$ и x?

4. Покажете, че ако функциите $\psi_1(x,t)$, $\psi_2(x,t)$ и $\psi_3(x,t)$ са решение на уравнението на Шрьодингер с потенциал $E_p(x)$, то всяка линейна комбинация $\psi(x,t) = C_1\psi_1(x,t) + C_2\psi_2(x,t) + C_3\psi_3(x,t)$ е също решение на това уравнение.

5. Квантовомеханична система се състои от две независими части, чиито стационарни състояния се описват от $\psi_1(x,t)$ и $\psi_2(x,t)$. Хамилтонианът на системата може да се представи като $\hat{H}(x_1, x_2) = \hat{H}_1(x_1) + \hat{H}_2(x_2)$, където $\hat{H}_1(x_1)$ и $\hat{H}_2(x_2)$ са хамилтонианите на независимите подсистеми (1) и (2). Докажете, че стационарното състояние на системата се описва с вълнова функция $\psi(x,t) = \psi_1(x,t)\psi_2(x,t)$.