

Московский Государственный Университет  
Физический Факультет

**ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРЕТИЧЕСКУЮ  
И КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ**

**К. А. Казаков**

©K. A. Kazakov (2008)

Предисловие	7
<b>1. Формализм Лагранжа</b>	<b>8</b>
§1.1. Основная задача механики	8
§1.2. Уравнения Лагранжа для одной материальной точки	8
§1.3. Уравнения Лагранжа для системы материальных точек при наличии связей	10
<i>Пример 1: функция Лагранжа в цилиндрических координатах</i>	13
§1.4. Включение диссипативных и электромагнитных сил	14
<i>Пример 2: движение в поле тяжести при наличии связей с трением</i>	16
<i>Пример 3: движение в однородном магнитном поле</i>	16
<b>2. Законы сохранения. Принцип наименьшего действия</b>	<b>18</b>
§2.1. Законы сохранения импульса и момента импульса	18
<i>Пример 4: циклические координаты</i>	22
§2.2. Закон сохранения энергии	22
<i>Пример 5: обобщенная энергия в электромагнитном поле</i>	23
§2.3. Принцип наименьшего действия	24
<b>3. Интегрирование уравнений движения</b>	<b>26</b>
§3.1. Движение с одной степенью свободы	26
<i>Пример 7: финитное и инфинитное движение</i>	29
<i>Пример 8: математический маятник</i>	29
§3.2. Задача двух тел	30
§3.3. Движение в кулоновом поле	33
А. Кулоново поле притяжения. Законы Кеплера	35
§3.4. Задача рассеяния. Формула Резерфорда	38
<b>4. Интегрирование уравнений движения (продолжение)</b>	<b>41</b>
§4.1. Колебания систем со многими степенями свободы	41
А. невырожденный случай	44
В. вырожденный случай	44
§4.2. Колебания молекул	46
<i>Пример 9: колебания трехатомной линейной молекулы</i>	48
§4.3. Движение твердого тела	53
<i>Пример 10: тензор моментов инерции жесткого ротатора</i>	56
<i>Пример 11: тензор моментов инерции однородного шара</i>	57
<i>Пример 12: свободное движение симметрического волчка</i>	57
<i>Пример 13: движение тяжелого симметрического волчка</i>	58
<i>Пример 14: влияние приливных сил на движение системы Земля-Луна</i>	61
<b>5. Канонический формализм</b>	<b>63</b>
§5.1. Уравнения Гамильтона	63
А. Интегрирование уравнений Гамильтона	64
<i>Пример 15: функция Гамильтона гармонического осциллятора</i>	65
<i>Пример 16: функция Гамильтона частицы в электромагнитном поле</i>	65

<i>Пример 17: гармонический осциллятор с частотой, зависящей от амплитуды</i>	65
В. Скобки Пуассона	66
С. Вычисление скобок Пуассона	68
<i>Пример 18: скобки Пуассона компонент момента импульса</i>	69
<i>Пример 19: скобки Пуассона скорости частицы в магнитном поле</i>	69
§5.2. Принцип наименьшего действия	70
§5.3. Канонические преобразования	71
<i>Пример 20: точечные преобразования</i>	74
<i>Пример 21: гармонический осциллятор</i>	74
§5.4. Бесконечно-малые канонические преобразования	75
А. Теорема об инвариантности скобок Пуассона	75
В. Теорема об инвариантности фазового объема	76
§5.5. Действие как функция координат и времени	77
А. Зависимость действия от координат	77
В. Зависимость действия от времени	78
С. Теорема Лиувилля	80
D. Уравнение Гамильтона-Якоби	81
E. Разделение переменных в уравнении Гамильтона-Якоби	83
<i>Пример 22: движение в поле электрического диполя</i>	84
<b>6. Переход от классической к квантовой механике</b>	<b>87</b>
§6.1. Уравнение Гамильтона-Якоби как классический предел уравнения Шредингера	87
§6.2. Основные предположения квантовой теории	88
§6.3. Механика квазиклассической частицы	92
А. Свободное движение. Волны де Бройля	92
В. Классические траектории с точки зрения квантовой механики	94
С. Фinitное движение с определенной энергией. Правило квантования Бора-Зоммерфельда	95
<i>Пример 23: квантование энергии гармонического осциллятора</i>	98
<i>Пример 24: модель Бора атома водорода</i>	99
<b>7. Основные положения квантовой механики</b>	<b>101</b>
§7.1. Конфигурационное пространство, функции и операторы	101
<i>Пример 25: функции из пространства <math>\mathcal{M}</math></i>	103
<i>Пример 26: линейные операторы</i>	103
<i>Пример 27: обратные операторы, произведения и коммутаторы</i>	104
§7.2. Эрмитовы операторы	106
А. Скалярное произведение и пространство состояний	106
В. Эрмитово сопряжение	107
<i>Пример 28: отыскание эрмитово-сопряженных операторов</i>	109
§7.3. Постулаты квантовой механики	110
<i>Пример 29: функции из пространства <math>\mathcal{S}</math></i>	113
<i>Пример 30: эрмитовость операторов координат и импульсов</i>	113
<i>Пример 31: коммутаторы операторов координат и импульсов</i>	114
<i>Пример 32: гамильтониан гармонического осциллятора</i>	114

<i>Пример 33: оператор производной по времени физической величины</i>	115
§7.4. Вычисление распределений вероятностей физических величин	115
А. Собственные функции и собственные значения операторов. Теорема о разложении	115
<i>Пример 34: собственные функции оператора инверсии</i>	118
<i>Пример 35: собственные функции оператора импульса</i>	118
В. Распределения вероятностей для величин с дискретным спектром	120
С. Распределение вероятностей обобщенного импульса	123
§7.5. Совместная измеримость физических величин	127
А. Коммутативность и совместимость	127
В. Принцип неопределенности	130
<b>8. Одномерное движение</b>	132
§8.1. Стационарное уравнение Шредингера	132
§8.2. Качественное исследование уравнения Шредингера. Типы энергетических спектров	133
<i>Пример 36: сравнение классических и квантовых типов движения</i>	141
§8.3. Свойства гладкости волновой функции. Условия сшивания	142
А. Прямоугольный потенциальный барьер. Коэффициенты отражения и прохождения	143
В. Симметричная прямоугольная потенциальная яма	150
<i>Пример 37: бесконечно глубокая яма</i>	152
<i>Пример 38: мелкая яма</i>	156
<i>Пример 39: сила, действующая на стенку ямы</i>	157
§8.4. Четность состояния	158
§8.5. Гармонический осциллятор	160
<i>Пример 40: дисперсия координаты и импульса осциллятора</i>	164
§8.6. Движение в периодическом поле	165
А. Функции Блоха	165
В. Задача Кронига-Пенни	167
<b>9. Трехмерное движение</b>	169
§9.1. Разделение переменных	169
§9.2. Прямоугольный потенциальный ящик	171
§9.3. Постоянное однородное магнитное поле	173
§9.4. Свойства оператора момента импульса	175
А. Коммутационные соотношения	175
<i>Пример 41: средние значения компонент момента</i>	176
В. Собственные функции и собственные значения	177
<i>Пример 42: флуктуации компонент момента</i>	181
<i>Пример 43: собственные функции момента с <math>l = 0, 1, 2</math></i>	181
§9.5. Центральное-симметричное поле	182
<i>Пример 44: нормированные собственные функции момента с <math>l = 0, 1</math></i>	184
§9.6. Двухатомная молекула	185
§9.7. Кулоново поле	191
<i>Пример 45: атом водорода</i>	194

<b>10. Матрицы операторов</b>	197
§10.1. Определение и основные свойства	197
А. Переход в $\phi$ -представление	198
§10.2. Матрицы координаты и импульса гармонического осциллятора	200
<b>11. Спин</b>	202
§11.1. Оператор спина	202
§11.2. Спин 1/2	205
<i>Пример 46: среднее значение и флуктуация проекции спина</i>	205
§11.3. Бозоны и фермионы	207
§11.4. Сложение спинов	208
<i>Пример 47: полные спин и момент электронов атома серебра</i>	213
§11.5. Опыт Штерна-Герлаха. Уравнение Паули	214
<i>Пример 48: прецессия спина в магнитном поле</i>	218
<b>12. Теория возмущений</b>	219
§12.1. Стационарная теория возмущений	219
А. невырожденные собственные значения	221
В. вырожденные собственные значения	222
<i>Пример 49: уровни энергии ангармонического осциллятора</i>	223
<i>Пример 50: поляризуемость двухатомной молекулы</i>	224
<i>Пример 51: взаимодействующие осцилляторы</i>	226
§12.2. Возмущения, зависящие от времени	228
<i>Пример 52: возбуждение молекулы переменным полем</i>	229
Рекомендуемая литература	231

## Предисловие

Настоящее Введение представляет собой запись лекций по механике, читаемых автором в течение ряда лет студентам второго курса Химического факультета МГУ. Первая его часть (главы 1–5) посвящена теоретической механике и имеет две основные задачи: во-первых, дать представление об основных методах теоретической механики, и, во-вторых, изложить материал, необходимый для изучения квантовой механики. В первых двух главах излагается метод Лагранжа, применение которого затем иллюстрируется в третьей и четвертой главах решением задачи двух тел, задачи о малых колебаниях систем со многими степенями свободы и задачи о движении твердого тела. Пятая глава посвящена изложению канонического аппарата – методов Гамильтона и Гамильтона-Якоби. Последний не только является самым мощным методом решения задач теоретической механики, но и наиболее удобен для перехода к изложению квантовой механики. Для того чтобы сделать этот переход по возможности более наглядным и естественным, в главе 6 кратко обсуждаются те концептуальные изменения, которые требуется произвести в механике при переходе к описанию явлений микромира, и формулируются основные предположения квантовой теории. Затем из них выводятся некоторые простые следствия, касающиеся поведения квазиклассических систем – систем, проявляющих квантовые свойства, но в определенном смысле еще близких к классическим. Рассмотрение таких систем позволяет просто ввести и объяснить значение фундаментальных понятий квантовой теории – волн де Бройля, принципа суперпозиции, квантования энергии и др. В главе 7 основные предположения формализуются и принимаются в качестве постулатов квантовой механики, после чего она излагается уже замкнуто, без ссылок на классическую механику. Развитый в главе 7 аппарат применяется в последующих главах к исследованию простейших квантовых систем – движению частиц в прямоугольных потенциалах, осциллятору, атому водорода, двухатомной молекуле и т.д. Эти задачи разбираются максимально подробно с целью сделать понятными все шаги в их решении, включая и те, которые кажутся “очевидными.” Поэтому выкладки приводятся полностью и со всеми деталями, *ad nauseam*.

Как показывает опыт, в преподавании квантовой механики нельзя опускаться ниже определенного уровня в смысле математической аккуратности, иначе простая и логически совершенная система квантовомеханических постулатов и их следствий распадается в бессвязный набор правил и различных *ad hoc* предписаний. Данное Введение написано именно на этом минимальном уровне. Требуемый им объем знаний вполне охватывается курсами линейной алгебры и математического анализа, читаемых студентам первого и второго курсов Химического факультета. От читателя требуется четкое представление о непрерывности, дифференцируемости и интегрируемости функций, простейших методах интегрирования дифференциальных уравнений, а также об основных операциях с векторами и матрицами.

## Глава 1. ФОРМАЛИЗМ ЛАГРАНЖА

### §1.1. Основная задача механики

Предметом механики является изучение движения материальных тел под действием приложенных к ним сил. Любое тело можно представить как совокупность тел меньшего размера, поэтому фундаментальным для всей механики является понятие *материальной точки*. Если в условиях данной задачи размерами тела и изменением его ориентации в пространстве можно пренебречь, то такое тело называют материальной точкой. Например, при изучении орбитального движения планет вокруг Солнца их размерами можно с хорошей степенью точности пренебречь и рассматривать их как материальные точки. С другой стороны, характер прецессии оси вращения планеты под влиянием других планет и Солнца существенно зависит от ее строения.

Из определения материальной точки следует, что ее пространственное положение задается тремя параметрами, в качестве которых можно использовать, например, декартовы компоненты ее радиус-вектора  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ . С течением времени положение тела в пространстве меняется, так что  $\mathbf{r}$  является функцией времени. Зависимость  $\mathbf{r}(t)$  называется *законом движения* материальной точки. Определение этой зависимости (для каждой материальной точки системы) составляет *основную задачу* теоретической механики.

Дифференциальные уравнения, определяющие зависимость координат материальной точки от времени, называются *уравнениями движения*. В классической механике уравнения движения являются уравнения Ньютона

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}, \quad (1.1)$$

где  $m$  есть масса материальной точки, а  $\mathbf{F}$  – действующая на нее сила. Последняя зависит от положения тела, а также от его скорости  $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt \equiv \dot{\mathbf{r}}$ . Следовательно, уравнения (1.1) представляют собой систему трех дифференциальных уравнений для трех компонент вектора  $\mathbf{r}$ . Таким образом, основная задача теоретической механики сводится к интегрированию уравнений движения. Для того чтобы найти закон движения как решение уравнений Ньютона, необходимо еще задать совокупность *дополнительных условий*. Поскольку уравнения Ньютона являются дифференциальными уравнениями второго порядка относительно неизвестных функций  $x(t), y(t), z(t)$ , то для однозначного их определения требуется  $2 \times 3 = 6$  дополнительных условий, которыми обычно являются значения координат и скоростей материальной точки в некоторый момент времени. Совокупность данных о системе, задание которых в некоторый момент времени является необходимым и достаточным для однозначного определения ее последующей эволюции, называют *состоянием системы*. Таким образом, состояние материальной точки в любой момент времени определяется заданием ее радиус-вектора и вектора ее скорости.

### §1.2. Уравнения Лагранжа для одной материальной точки

Непосредственное интегрирование уравнений Ньютона является далеко не самым удобным способом решения основной задачи механики. Это связано с тем, что использование декартовых компонент радиус-вектора для задания пространственного положения материальной точки часто оказывается неудобным. Например, если поле силы  $\mathbf{F}$  имеет ту или

иную симметрию, то целесообразным является такой выбор координат, при котором  $\mathbf{F}$  зависит не от всех, а только от части параметров, определяющих положение материальной точки. Для того чтобы эффективно производить переход от одного набора параметров к другому, удобно предварительно преобразовать уравнения Ньютона к так называемому лагранжеву виду.

Рассмотрим простейший случай движения одной материальной точки в потенциальном поле  $U(\mathbf{r}, t)$ . Сила, действующая на тело в таком поле, имеет вид

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}.$$

Здесь и в дальнейшем под производной по некоторому вектору понимается вектор, компоненты которого равны производным по соответствующим компонентам данного вектора, т.е.,  $\partial U/\partial \mathbf{r} = (\partial U/\partial x, \partial U/\partial y, \partial U/\partial z)$ . Преобразование к лагранжеву виду состоит во введении некоторой скалярной функции координат и скоростей материальной точки, такой, что обе части векторного уравнения Ньютона (1.1) принимают вид производных от этой функции, аналогично тому как вектор силы выражается через производные скалярного потенциала. Используя введенные обозначения, левую часть уравнений Ньютона можно переписать следующим образом

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{\mathbf{r}}},$$

где  $T$  есть кинетическая энергия материальной точки,

$$T(\dot{\mathbf{r}}) = \frac{m \dot{\mathbf{r}}^2}{2},$$

а три компоненты вектора скорости рассматриваются как независимые переменные. Действительно, это тождество нетрудно проверить, записывая его покомпонентно. Мы имеем, например, для  $x$ -компоненты

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{x}} = \frac{m}{2} \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{x}} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = \frac{m}{2} \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{x}} \dot{x}^2 = m \frac{d\dot{x}}{dt} = m \frac{d^2 x}{dt^2}.$$

Введем теперь функцию  $L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = T(\dot{\mathbf{r}}) - U(\mathbf{r}, t)$ . По определению,  $L$  является функцией трех координат  $(x, y, z)$ , трех компонент скорости  $(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$ , а также времени  $t$ , рассматриваемых как независимые переменные (т.е., любая из этих семи переменных считается независимой от остальных шести). Функция  $L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t)$  называется *функцией Лагранжа*. С ее помощью уравнения Ньютона можно переписать в виде

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = 0, \tag{1.2}$$

поскольку  $\partial T/\partial \mathbf{r} = 0$ ,  $\partial U/\partial \dot{\mathbf{r}} = 0$  в силу независимости координат и скоростей. Записанные в таком виде, уравнения движения называются *уравнениями Лагранжа*.

Оказывается, что уравнения Лагранжа имеют один и тот же вид независимо от того, какие параметры используются для задания пространственного положения материальной точки. А именно, если вместо декартовых координат  $(x, y, z)$  выбрать другую тройку координат  $(q_1, q_2, q_3)$ , то уравнения движения в новых координатах будут иметь вид

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, 2, 3, \tag{1.3}$$

причем  $L$  предполагается выраженной через новые координаты  $q_\alpha$  и соответствующие им “скорости”  $\dot{q}_\alpha$ , снова рассматриваемые как независимые переменные. Это замечательное свойство уравнений Лагранжа, называемое *ковариантностью* относительно замены координат, будет доказано в следующем пункте.

### §1.3. Уравнения Лагранжа для системы материальных точек при наличии связей

Мы докажем ковариантность уравнений Лагранжа сразу для системы, состоящей из  $N$  материальных точек, имеющих массы  $m_i$  и радиус-векторы  $\mathbf{r}_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , допуская при этом, что на эту систему еще могут быть наложены так называемые идеальные голономные связи. Вообще, под связями понимают любые ограничения на возможные движения системы. Например, они могут состоять в том, что взаимные расстояния между некоторыми материальными точками должны оставаться неизменными при движении системы, или же движение частиц может быть ограничено непроницаемыми стенками. Далее, могут иметься условия на скорости точек, и т.п. В том важном и часто встречающемся на практике случае, когда связь может быть выражена в виде уравнения для координат точек системы, она называется *голономной*. Примером может служить жесткий невесомый стержень, соединяющий две частицы. В дальнейшем мы будем рассматривать лишь голономные связи.

В случае наличия связей помимо потенциальных сил на точки системы будут действовать также силы реакции связей. Обозначая эти силы через  $\mathbf{R}$ , запишем уравнения Ньютона для каждой материальной точки, составляющей систему

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i} + \mathbf{R}_i, \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.4)$$

Пусть имеется  $n$  независимых уравнений связи между  $\mathbf{r}_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ :

$$f_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = 0, \quad k = 1, \dots, n. \quad (1.5)$$

Мы считаем для простоты, что эти соотношения не содержат времени явно. Уравнения (1.5) означают, что  $n$  компонент из полного набора  $3N$  декартовых компонент векторов  $\mathbf{r}_i$  могут быть выражены через остальные  $(3N - n) \equiv s$ . В свою очередь, может оказаться удобным выразить эти  $s$  компонент как функции некоторого другого набора  $s$  независимых параметров  $q_\alpha$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$ . Для краткости, этот набор параметров мы будем обозначать просто  $q$ . Таким образом, все  $N$  радиус-векторов  $\mathbf{r}_i$  окажутся функциями  $q$ :

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(q), \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.6)$$

Набор независимых переменных, однозначно определяющих положение системы в пространстве, называется *обобщенными координатами* системы, а число этих переменных – *числом степеней свободы* системы. В рассматриваемом случае  $q_\alpha$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$  являются обобщенными координатами системы материальных точек при наличии связей.

Покажем теперь, что в случае, когда связи являются идеальными, т.е. трение в системе отсутствует, уравнения движения по-прежнему имеют вид (1.3) по каждой из обобщенных координат  $q_\alpha$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$ .

Обозначим символом  $\delta \mathbf{r}_i$ ,  $i = 1, \dots, N$  произвольное малое изменение (*вариацию*) координат частиц системы, согласованное с уравнениями связи. Согласованность с уравнениями связи означает, что выполняются следующие уравнения

$$f_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = 0, \quad f_k(\mathbf{r}_1 + \delta \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N + \delta \mathbf{r}_N) = 0, \quad k = 1, \dots, n.$$

Перемещения, удовлетворяющие этим условиям, называют *виртуальными* (т.е. возможными, допустимыми). Поскольку трение отсутствует, сила реакции связей, действующая на частицу, ортогональна виртуальному перемещению:

$$(\mathbf{R}_i, \delta \mathbf{r}_i) = 0, \quad i = 1, \dots, N,$$

где символом  $(\mathbf{a}, \mathbf{b})$  обозначено скалярное произведение векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ . Складывая эти уравнения и используя (1.4), получим

$$\sum_{i=1}^N m_i \left( \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2}, \delta \mathbf{r}_i \right) = - \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}, \delta \mathbf{r}_i \right). \quad (1.7)$$

Это уравнение может быть преобразовано к виду, в котором суммирование ведется не по частицам системы, а по индексу  $\alpha$ , нумерующему независимые обобщенные координаты системы. Для этого проварируем уравнения (1.6)

$$\delta \mathbf{r}_i = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha. \quad (1.8)$$

Отметим, что в отличие от  $\delta \mathbf{r}_i$ , вариации обобщенных координат  $\delta q_\alpha$  являются независимыми друг от друга. Согласно правилу дифференцирования сложной функции можно написать

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}, \delta \mathbf{r}_i \right) &= \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}, \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha \right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^s \delta q_\alpha \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}, \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) = \sum_{\alpha=1}^s \delta q_\alpha \frac{\partial U(\mathbf{r}(q), t)}{\partial q_\alpha}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Далее, левую часть уравнения (1.7) можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N m_i \left( \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2}, \delta \mathbf{r}_i \right) &= \sum_{i=1}^N m_i \left( \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2}, \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha \right) \\ &= \sum_{i=1}^N m_i \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \left( \dot{\mathbf{r}}_i, \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) - \left( \dot{\mathbf{r}}_i, \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) \right\} \delta q_\alpha. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Для того чтобы выразить правую часть уравнения (1.10) в виде производных от функции Лагранжа, как и в рассмотренном выше случае одной частицы, мы расширим набор независимых переменных, включив в него величины  $\dot{q}_\alpha$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$ , называемые *обобщенными скоростями*. Таким образом, по определению, любая из набора переменных  $q, \dot{q}$  является независимой от остальных. Заметим попутно, что поскольку уравнения Ньютона представляют собой систему дифференциальных уравнений второго порядка для неизвестных функций  $\mathbf{r}_i(t)$ , то после перехода к обобщенным координатам мы получим систему  $s$  независимых уравнений для  $s$  неизвестных функций  $q_\alpha(t)$ , которые также будут дифференциальными уравнениями второго порядка. Поэтому для решения этой системы требуется задание  $2s$  дополнительных условий – значений  $s$  обобщенных координат и  $s$

обобщенных скоростей в некоторый момент времени. Другими словами, состояние системы при наличии связей определяется заданием независимых величин  $q, \dot{q}$  в некоторый момент времени.

Выразим декартовы скорости частиц через обобщенные скорости. Для этого возьмем полную производную по времени соотношений (1.6)

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha, \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.11)$$

Имея в виду данное выше определение, продифференцируем уравнения (1.11) по  $\dot{q}_\beta$ :

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \dot{q}_\beta} = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \frac{\partial \dot{q}_\alpha}{\partial \dot{q}_\beta}, \quad \beta = 1, \dots, s. \quad (1.12)$$

В силу независимости скоростей  $\dot{q}_\alpha$  производная  $\partial \dot{q}_\alpha / \partial \dot{q}_\beta$  равна единице при  $\alpha = \beta$ , и нулю в противном случае, т.е.,

$$\frac{\partial \dot{q}_\alpha}{\partial \dot{q}_\beta} = \delta_{\alpha\beta},$$

где  $\delta_{\alpha\beta}$  обозначает единичную матрицу

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta, \\ 0, & \alpha \neq \beta. \end{cases}$$

Поэтому сумма в правой части уравнения (1.12) сводится к одному члену:

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \dot{q}_\beta} = \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta}. \quad (1.13)$$

Далее, преобразуем полную производную по времени от  $\partial \mathbf{r}_i / \partial q_\beta$ :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta} = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta} \right) \dot{q}_\alpha = \frac{\partial}{\partial q_\beta} \left\{ \sum_{\alpha=1}^s \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) \dot{q}_\alpha \right\}.$$

Выражение в фигурных скобках есть не что иное, как  $\dot{\mathbf{r}}_i$ , так что

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta} = \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial q_\beta}. \quad (1.14)$$

С помощью соотношений (1.13) и (1.14) правая часть уравнения (1.10) теперь может быть преобразована следующим образом

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N m_i \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \left( \dot{\mathbf{r}}_i, \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) - \left( \dot{\mathbf{r}}_i, \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) \right\} \delta q_\alpha &= \sum_{i=1}^N m_i \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \left( \dot{\mathbf{r}}_i, \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) - \left( \dot{\mathbf{r}}_i, \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) \right\} \delta q_\alpha \\ &= \sum_{i=1}^N m_i \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i^2}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{1}{2} \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i^2}{\partial q_\alpha} \right\} \delta q_\alpha = \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} - \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} \right\} \delta q_\alpha \\ &= \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} \right\} \delta q_\alpha, \end{aligned}$$

где

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2}$$

есть полная кинетическая энергия системы. Используя этот результат, а также уравнение (1.9), переписываем уравнение (1.7) в виде

$$\sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial(T-U)}{\partial q_\alpha} \right\} \delta q_\alpha = 0.$$

Учитывая, что потенциальная энергия не зависит от обобщенных скоростей, последнее уравнение можно также представить в виде

$$\sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \right\} \delta q_\alpha = 0, \quad (1.15)$$

где функция Лагранжа  $L = T - U$  предполагается выраженной через обобщенные координаты и обобщенные скорости системы (а также время), а именно,

$$L(q, \dot{q}, t) = T(\dot{\mathbf{r}}(q, \dot{q})) - U(\mathbf{r}(q), t).$$

В силу независимости вариаций обобщенных координат левая часть уравнения (1.15) будет равна нулю, только если коэффициент при каждой из  $\delta q_\alpha$  обращается в нуль независимо от остальных:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (1.16)$$

Итак, мы показали, что в случае, когда на систему наложены идеальные голономные связи, уравнения движения могут быть записаны в форме Лагранжа (1.16). Вид этих уравнений не зависит от конкретного выбора обобщенных координат системы, что, в частности, и доказывает их ковариантность. Можно также показать, что этот результат остается справедливым и в случае связей, явно зависящих от времени.

**Пример 1. Функция Лагранжа в цилиндрических координатах.** Рассмотрим движение материальной точки в аксиально-симметричном поле, т.е. поле, которое не меняется при поворотах на произвольный угол вокруг некоторой оси. Таково, например, поле прямого заряженного провода. В этом случае в качестве  $q$  целесообразно выбрать цилиндрические координаты  $(\rho, \phi, z)$ , направив ось  $z$  по оси симметрии поля. Тогда поле не будет зависеть от угловой координаты  $\phi$ . Переход от декартовых координат к цилиндрическим задается формулами

$$x = \rho \cos \phi, \quad y = \rho \sin \phi, \quad z = z. \quad (1.17)$$

Дифференцируя эти соотношения по времени, получаем

$$\dot{x} = \dot{\rho} \cos \phi - \rho \sin \phi \dot{\phi}, \quad \dot{y} = \dot{\rho} \sin \phi + \rho \cos \phi \dot{\phi},$$

а возводя их в квадрат и складывая, находим выражение для квадрата скорости материальной точки в цилиндрических координатах

$$\dot{\mathbf{r}}^2 = \dot{\rho}^2 + \rho^2 \dot{\phi}^2 + \dot{z}^2, \quad (1.18)$$

и затем ее функцию Лагранжа в аксиально-симметричном поле

$$L = \frac{m}{2}(\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\phi}^2 + \dot{z}^2) - U(\rho, z). \quad (1.19)$$

Запишем теперь уравнения Лагранжа в этих координатах. Мы имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \rho} = m\rho\dot{\phi}^2 - \frac{\partial U(\rho, z)}{\partial \rho}, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\rho}} = m\dot{\rho}.$$

Поэтому уравнение Лагранжа по переменной  $\rho$  имеет вид

$$m\ddot{\rho} - m\rho\dot{\phi}^2 + \frac{\partial U(\rho, z)}{\partial \rho} = 0.$$

По переменной  $z$  уравнение Лагранжа остается тем же, что и в декартовых координатах:

$$m\ddot{z} + \frac{\partial U(\rho, z)}{\partial z} = 0.$$

Наконец,

$$\frac{\partial L}{\partial \phi} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = m\rho^2\dot{\phi},$$

так что соответствующее уравнение Лагранжа есть просто

$$\frac{d}{dt}(\rho^2\dot{\phi}) = 0. \quad (1.20)$$

#### §1.4. Включение диссипативных и электромагнитных сил

После того, как мы представили уравнения движения в лагранжевой форме для систем с потенциальными силами и идеальными связями, естественно расширить класс допустимых взаимодействий, рассмотрев функции Лагранжа более общего вида, чем простейший  $L = T - U$ .

Рассмотрим функцию Лагранжа следующего вида

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = e^{\lambda t} \left( \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(\mathbf{r}, t) \right), \quad (1.21)$$

где  $\lambda$  есть некоторый постоянный параметр. Составим уравнения Лагранжа. Мы имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = e^{\lambda t} m\dot{\mathbf{r}}, \quad \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = -e^{\lambda t} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}.$$

Подстановка в уравнение (1.16) дает

$$\frac{d}{dt} (e^{\lambda t} m\dot{\mathbf{r}}) = -e^{\lambda t} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}.$$

Выполняя дифференцирование и сокращая на  $e^{\lambda t}$ , получаем

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -k\dot{\mathbf{r}} - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}, \quad k \equiv m\lambda.$$

Таким образом, функция Лагранжа (1.21) описывает движение частицы массы  $m$  под действием потенциальной силы  $\mathbf{F}_p = -\partial U/\partial \mathbf{r}$  и силы трения, пропорциональной скорости частицы,  $\mathbf{F}_d = -k\dot{\mathbf{r}}$ .

Рассмотрим, далее, функцию Лагранжа вида

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} + \frac{q}{c}(\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \dot{\mathbf{r}}) - q\varphi(\mathbf{r}, t), \quad (1.22)$$

где  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ ,  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  – заданные векторная и скалярная функции координат и времени, а  $q$  и  $c$  постоянные параметры. Член, линейный по скорости частицы в функции Лагранжа, называют *обобщенным потенциалом*.

Составим уравнения Лагранжа. Мы имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + \frac{q}{c}A_x, \quad \frac{\partial L}{\partial x} = \frac{q}{c} \left( \frac{\partial A_x}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial A_y}{\partial x}\dot{y} + \frac{\partial A_z}{\partial x}\dot{z} \right) - q\frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

и аналогичные выражения по переменным  $y, z$ . Подстановка в уравнение (1.16) дает

$$m\ddot{x} + \frac{q}{c} \left( \frac{\partial A_x}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial A_x}{\partial y}\dot{y} + \frac{\partial A_x}{\partial z}\dot{z} + \frac{\partial A_x}{\partial t} \right) = \frac{q}{c} \left( \frac{\partial A_x}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial A_y}{\partial x}\dot{y} + \frac{\partial A_z}{\partial x}\dot{z} \right) - q\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad (1.23)$$

или, перенося все силы в правую часть,

$$m\ddot{x} = -\frac{q}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t} - q\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{q}{c} \left\{ \left[ \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right] \dot{y} + \left[ \frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z} \right] \dot{z} \right\}. \quad (1.24)$$

Введем следующие обозначения

$$E_x = -\frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t} - \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad E_y = -\frac{1}{c}\frac{\partial A_y}{\partial t} - \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \quad E_z = -\frac{1}{c}\frac{\partial A_z}{\partial t} - \frac{\partial \varphi}{\partial z},$$

$$H_x = \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}, \quad H_y = \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}, \quad H_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}. \quad (1.25)$$

Определение вектора  $\mathbf{H} = (H_x, H_y, H_z)$  нетрудно запомнить, если представлять его в виде формального векторного произведения “вектора”  $\partial/\partial \mathbf{r}$  с  $\mathbf{A}$ :

$$\mathbf{H} = [\partial/\partial \mathbf{r}, \mathbf{A}].$$

Вектор  $\mathbf{H}$  называется *ротором* вектора  $\mathbf{A}$ . Операция взятия ротора данного вектора обозначается обычно символом  $\text{rot}$ , так что  $\mathbf{H} = \text{rot} \mathbf{A}$ . С помощью “вектора”  $\partial/\partial \mathbf{r}$  определение вектора  $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$  также может быть переписано компактно как

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}}.$$

Во введенных обозначениях уравнение (1.24) принимает вид

$$m\ddot{x} = qE_x + \frac{q}{c}[\dot{\mathbf{r}}, \mathbf{H}]_x, \quad (1.26)$$

где  $[\dot{\mathbf{r}}, \mathbf{H}]_x = \dot{y}H_z - \dot{z}H_y$ . Вместе с аналогичными уравнениями для координат  $y, z$  последнее уравнение можно переписать в форме одного векторного уравнения

$$m\ddot{\mathbf{r}} = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}[\dot{\mathbf{r}}, \mathbf{H}]. \quad (1.27)$$

Выражение в правой части представляет собой силу Лоренца, причем  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  являются напряженностями электрического и магнитного полей, соответственно, а  $c$  есть скорость света. Мы видим, таким образом, что функция Лагранжа (1.22) описывает движение частицы с массой  $m$  и зарядом  $q$  в электромагнитном поле. Величины  $\mathbf{A}$  и  $\varphi$  называют соответственно векторным и скалярным потенциалами электромагнитного поля.

**Пример 2.** Движение в поле тяжести при наличии связей с трением. Рассмотрим движение материальной точки массы  $m$  по параболе, расположенной вертикально в поле тяжести, предполагая, что действующая на точку сила трения пропорциональна ее скорости (коэффициент трения  $k$ ). Направим ось  $z$  вертикально вверх, и пусть уравнением параболы будет

$$z = \frac{ax^2}{2}, \quad y = 0, \quad a = \text{const}.$$

Примем  $x$  за обобщенную координату точки. Мы имеем

$$\dot{z} = ax\dot{x},$$

и поэтому

$$\dot{\mathbf{r}}^2 = \dot{x}^2 + a^2x^2\dot{x}^2.$$

Потенциальная энергия точки  $U = mgax^2/2$ , где  $g$  – ускорение силы тяжести. Подставляя эти выражения в уравнение (1.21), получаем функцию Лагранжа в виде

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{m}{2}e^{kt/m} \{(1 + a^2x^2)\dot{x}^2 - gax^2\}. \quad (1.28)$$

Составим уравнение Лагранжа. Имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = me^{kt/m}(1 + a^2x^2)\dot{x}, \quad \frac{\partial L}{\partial x} = me^{kt/m} \{a^2x\dot{x}^2 - gax\}.$$

Подставляя эти выражения в уравнение (1.16), получаем после сокращения на  $e^{kt/m}$

$$(1 + a^2x^2)(m\ddot{x} + k\dot{x}) + max(g + a\dot{x}^2) = 0.$$

**Пример 3.** Движение в однородном магнитном поле. Рассмотрим движение заряженной частицы в постоянном однородном поле напряженности  $\mathbf{H}$ . Выберем ось  $z$  в направлении вектора  $\mathbf{H}$ . Тогда согласно (1.27) уравнения движения частицы примут вид

$$m\ddot{x} = \frac{qH}{c}\dot{y}, \quad m\ddot{y} = -\frac{qH}{c}\dot{x}, \quad m\ddot{z} = 0,$$

где  $H \equiv |\mathbf{H}|$ . Из последнего уравнения следует немедленно, что  $z(t) = z_0 + \dot{z}_0t$ , где  $z_0, \dot{z}_0$  – значения  $z$ -компонент радиус-вектора и скорости частицы в момент времени  $t = 0$ . Первые же два уравнения удобно интегрируются с помощью введения комплексной комбинации  $u = x + iy$ . Умножая второе уравнение на  $i$  и складывая с первым, получим

$$\ddot{u} = -i\omega\dot{u}, \quad \omega \equiv \frac{qH}{mc}.$$

Первый интеграл этого уравнения есть  $\dot{u} = -i\omega u + c$ , где  $c$  – некоторая комплексная постоянная. Написав ее в виде  $c = i\omega(a + ib)$  с вещественными  $a$  и  $b$ , полученное уравнение можно переписать так:

$$\dot{v} = -i\omega v, \quad v \equiv u - (a + ib).$$

Решение этого уравнения есть

$$v = Ae^{-i\omega t},$$

где  $A$  – новая комплексная постоянная. Записав ее в виде  $A = |A|e^{-i\alpha}$  и выделяя вещественную и мнимую части решения, получаем  $\operatorname{Re}(v) = x - a = |A| \cos(\omega t + \alpha)$ ,  $\operatorname{Im}(v) = y - b = -|A| \sin(\omega t + \alpha)$ , откуда

$$x(t) = a + |A| \cos(\omega t + \alpha), \quad y(t) = b - |A| \sin(\omega t + \alpha).$$

Из этих уравнений следует, в частности, уравнение проекции траектории частицы на плоскость  $(x, y)$ :

$$(x - a)^2 + (y - b)^2 = |A|^2.$$

Это есть окружность радиуса  $|A|$  с центром в точке  $(a, b)$ . Таким образом, в постоянном однородном магнитном поле частица движется по *винтовой линии*, ось которой расположена параллельно вектору напряженности поля, причем абсолютная величина скорости частицы и ее проекция на направление поля постоянны, а период одного витка не зависит от скорости и равен  $2\pi/|\omega|$ .

## Глава 2. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ. ПРИНЦИП НАИМЕНЬШЕГО ДЕЙСТВИЯ

В примере 1 (глава 1) рассматривалась задача о движении точки в аксиально-симметричном поле. Мы нашли, что в этом случае функция Лагранжа не зависит явно от координаты  $\phi$ , задающей угол поворота вокруг оси симметрии поля, а из уравнения Лагранжа по этой координате [см. уравнение (1.20)] следует, что величина  $p_\phi = \rho^2 \dot{\phi}$  остается постоянной при движении системы. Вообще, любая комбинация обобщенных координат и обобщенных скоростей, сохранение которой следует из уравнений движения системы, называется *интегралом движения*. Как видно,  $p_\phi$  является первым интегралом уравнений движения частицы. Поскольку для решения основной задачи механики требуется интегрировать уравнения движения, методы нахождения интегралов движения занимают в ней центральное место.

Важнейшей категорией интегралов движения являются *законы сохранения*, под которыми понимают величины, постоянство которых следует из свойств *симметрии пространства и времени*. Как показывает опыт, механические свойства *замкнутой системы*, т.е. системы, на которую не действуют внешние силы, не меняются при произвольных перемещениях системы как целого в пространстве (т.е. перемещениях, сохраняющих взаимные расстояния между точками системы). Любое такое перемещение можно представить в виде параллельного переноса (*трансляции*) системы в некотором направлении и ее поворота вокруг некоторой оси. Неизменность свойств движения системы при таких частного вида перемещениях называют соответственно *однородностью* и *изотропией пространства* относительно данной системы. Аналогично, механические свойства замкнутых систем оказываются одними и теми же независимо от того, на каком интервале времени рассматривается их эволюция. Это свойство называют *однородностью времени*.

Поскольку механические свойства системы полностью определяются заданием ее функции Лагранжа, то эти свойства будут оставаться неизменными при любом из указанных перемещений в пространстве или во времени, если данное перемещение не меняет функции Лагранжа системы.

### §2.1. Законы сохранения импульса и момента импульса

Рассмотрим следствия, вытекающие из свойств симметрии пространства. Получим сперва общее выражение для вариации функции Лагранжа при перемещении системы в пространстве. Пусть силы, действующие на систему, а также наложенные на нее связи таковы, что функция Лагранжа не меняется при вариации обобщенных координат вида  $\delta q_\alpha = Q_\alpha(q)\epsilon$ , где  $Q_\alpha(q)$  есть некоторые заданные функции обобщенных координат, а  $\epsilon$  – малый постоянный параметр (независящий от  $q, t$ ). Найдём соответствующее изменение обобщенных скоростей. По определению производной имеем

$$\begin{aligned} \delta \frac{dq_\alpha}{dt} &= \delta \left( \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{q_\alpha(t + \Delta t) - q_\alpha(t)}{\Delta t} \right) \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{(q_\alpha + \delta q_\alpha)(t + \Delta t) - (q_\alpha + \delta q_\alpha)(t)}{\Delta t} - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{q_\alpha(t + \Delta t) - q_\alpha(t)}{\Delta t} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\delta q_\alpha(t + \Delta t) - \delta q_\alpha(t)}{\Delta t}, \end{aligned}$$

т.е.

$$\delta \frac{dq_\alpha}{dt} = \frac{d}{dt} \delta q_\alpha, \quad (2.1)$$

и следовательно,  $\delta \dot{q}_\alpha = \dot{Q}_\alpha \epsilon$ . Используя этот результат, а также уравнения Лагранжа (1.16), вариацию функции Лагранжа можно представить в виде

$$\delta L = \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \delta \dot{q}_\alpha \right\} = \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} Q_\alpha \epsilon + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{Q}_\alpha \epsilon \right\},$$

или

$$\delta L = \epsilon \frac{d}{dt} \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} Q_\alpha. \quad (2.2)$$

Таким образом, из условия неизменности функции Лагранжа,  $\delta L = 0$ , вытекает следующий закон сохранения

$$\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} Q_\alpha = \text{const}. \quad (2.3)$$

Если вспомнить, что функция Лагранжа в обобщенных координатах получается из функции Лагранжа в декартовых координатах согласно  $L = L(\mathbf{r}(q), \dot{\mathbf{r}}(q, \dot{q}), t)$ , то, применяя правило дифференцирования сложной функции, а также соотношение (1.13), левую часть уравнения (2.3) можно переписать так

$$\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} Q_\alpha = \sum_{\alpha=1}^s \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}, \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) Q_\alpha = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}, \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \frac{\delta q_\alpha}{\epsilon} \right),$$

или, учитывая формулу (1.8),

$$\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} Q_\alpha = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}, \frac{\delta \mathbf{r}_i}{\epsilon} \right). \quad (2.4)$$

Рассмотрим теперь отдельно трансляции и повороты системы. Пусть внешние поля и связи, наложенные на систему, не нарушают однородности пространства в направлении, определяемом единичным вектором  $\mathbf{n}$ . При трансляции системы в направлении вектора  $\mathbf{n}$  на расстояние  $\delta r = \epsilon$  радиус-векторы всех частиц системы получают одно и то же приращение  $\delta \mathbf{r}_i = \mathbf{n} \epsilon$ . По формулам (2.3), (2.4) находим закон сохранения

$$\left( \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}, \mathbf{n} \right) = \text{const}. \quad (2.5)$$

Таким образом, следствием однородности пространства в некотором направлении является сохранение проекции на это направление вектора

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i, \quad \mathbf{p}_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}.$$

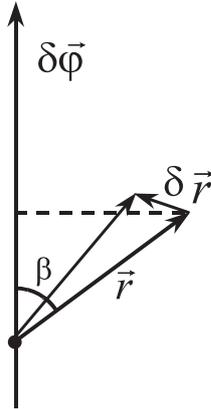


Рис. 1: К выводу формулы (2.6).

Относительно замкнутой системы пространство однородно по всем направлениям, и поэтому все три компоненты вектора  $\mathbf{P}$  такой системы сохраняются. Мы будем называть  $\mathbf{P}$  *обобщенным декартовым импульсом* системы (а вектор  $\mathbf{p}_i$  – обобщенным декартовым импульсом  $i$ -ой частицы).

**Замечание 1:** вектор  $\mathbf{p}_i = \partial L / \partial \dot{\mathbf{r}}_i$  не совпадает, вообще говоря, с обычным импульсом  $m_i \dot{\mathbf{r}}_i$ . Характерным примером является движение при наличии магнитного поля (см. §1.4). В этом случае формула (1.22) дает  $\mathbf{p} = \partial L / \partial \dot{\mathbf{r}} = m \dot{\mathbf{r}} + \frac{q}{c} \mathbf{A}$ .

Рассмотрим теперь поворот системы как целого на угол  $\delta\varphi = \epsilon$  относительно некоторой оси, направление которой задается единичным вектором  $\mathbf{n}$  по правилу правого винта. Выберем начало системы координат где-нибудь на оси поворота и определим, как при этом меняется радиус-вектор  $\mathbf{r}$ . Обозначим угол между векторами  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{r}$  через  $\beta$  (см. Рис. 1). Вектор  $\delta\mathbf{r}$  ортогонален плоскости, проходящей через векторы  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{r}$ , а его величина

$$|\delta\mathbf{r}| = (|\mathbf{r}| \sin \beta) \delta\varphi.$$

Если ввести вектор  $\delta\boldsymbol{\varphi} = \mathbf{n} \delta\varphi$ , то это выражение можно представить как модуль векторного произведения векторов  $\delta\boldsymbol{\varphi}$  и  $\mathbf{r}$ :  $|\delta\mathbf{r}| = |[\delta\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}]|$ . С другой стороны, направление вектора  $[\delta\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}]$  совпадает с направлением  $\delta\mathbf{r}$ , поэтому справедливо векторное равенство

$$\delta\mathbf{r} = [\delta\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}]. \quad (2.6)$$

Таким образом, при повороте системы на угол  $\delta\varphi$  радиус-векторы частиц системы получают приращение  $\delta\mathbf{r}_i = [\delta\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}_i]$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Используя формулу (2.4) и циклически переставляя сомножители скалярно-векторного произведения, найдем

$$\sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}, \frac{\delta\mathbf{r}_i}{\epsilon} \right) = \sum_{i=1}^N (\mathbf{p}_i, [\mathbf{n}, \mathbf{r}_i]) = \sum_{i=1}^N (\mathbf{n}, [\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i]). \quad (2.7)$$

Закон сохранения (2.3) принимает вид

$$\left( \mathbf{n}, \sum_{i=1}^N [\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i] \right) = \text{const}. \quad (2.8)$$

Таким образом, из изотропии пространства относительно вращений вокруг направления  $\mathbf{n}$  следует сохранение проекции на это направление вектора

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i, \quad \mathbf{m}_i = [\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i],$$

называемого *моментом импульса* системы. Относительно замкнутой системы пространство изотропно по всем направлениям, и потому все три компоненты ее момента импульса сохраняются.

**Замечание 2:** Так же как  $\mathbf{p}_i$  не всегда совпадает с обычным импульсом,  $\mathbf{m}_i$  не равен, вообще говоря, величине  $[\mathbf{r}_i, m_i \dot{\mathbf{r}}_i]$ .

На величины, стоящие в левых частях уравнений (2.5) и (2.8), можно посмотреть также и с другой точки зрения. Вернемся к записи законов сохранения в форме (2.3). Обозначим через  $x$  декартову координату, определяющую положение системы как целого по оси, параллельной вектору  $\mathbf{n}$ . Если мы примем  $x$  за одну из обобщенных координат, скажем  $x \equiv q_1$ , то при трансляции в направлении  $\mathbf{n}$  вариации обобщенных координат будут иметь вид

$$\begin{cases} \delta q_1 = \epsilon, \\ \delta q_\alpha = 0, \end{cases} \quad \alpha = 2, \dots, s, \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} Q_1 = 1, \\ Q_\alpha = 0, \end{cases} \quad \alpha = 2, \dots, s,$$

Подстановка в уравнение (2.3) приводит к закону сохранения

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \text{const}. \quad (2.9)$$

Поскольку правая часть тождества (2.4) не зависит от выбора обобщенных координат, то величина  $\text{const}$  – та же, что и в уравнении (2.5), т.е.

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = (\mathbf{P}, \mathbf{n}). \quad (2.10)$$

Другими словами, производная функции Лагранжа по  $\dot{x}$  дает величину проекции обобщенного декартова импульса системы на направление  $\mathbf{n}$ . Аналогично, если мы выберем угол поворота  $\varphi$  системы как целого вокруг некоторой оси за одну из обобщенных координат, например,  $\varphi \equiv q_1$ , то вариации обобщенных координат при повороте вокруг данной оси будут иметь тот же вид, что и выше, а соответствующая сохраняющаяся величина

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \text{const} \quad (2.11)$$

в силу тождества (2.4) совпадает с величиной проекции момента импульса системы на эту ось:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = (\mathbf{M}, \mathbf{n}). \quad (2.12)$$

Как мы видим, в данной формулировке оба закона сохранения являются следствием того, что функция Лагранжа не меняется при сдвигах какой-либо обобщенной координаты  $q_\alpha$  на произвольную постоянную величину,  $q_\alpha \rightarrow q_\alpha + \epsilon$ , при фиксированных остальных  $q_\beta$

с  $\beta \neq \alpha$ . Такие обобщенные координаты называют *циклическими*. Если координата  $q_\alpha$  циклическая, то при описанном сдвиге

$$0 = \delta L = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \delta \dot{q}_\alpha = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \epsilon,$$

поскольку по определению параметра  $\epsilon$  имеем  $\delta \dot{q}_\alpha = \dot{\epsilon} = 0$ , так что критерием цикличности координаты  $q_\alpha$  является условие

$$\frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0.$$

Соответствующая этой координате величина  $p_{q_\alpha} = \partial L / \partial \dot{q}_\alpha$  сохраняется при движении системы:

$$p_{q_\alpha} = \text{const}.$$

То, что  $p_{q_\alpha}$  сохраняется, видно также непосредственно из уравнений Лагранжа (1.16). Величину  $p_{q_\alpha}$  называют *обобщенным импульсом, соответствующим обобщенной координате  $q_\alpha$* .

**Пример 4. Циклические координаты.** В примере 1 (глава 1) функция Лагранжа (1.19) материальной точки не зависит от угловой переменной  $\phi$  ( $\phi$  – циклическая координата). Поэтому сохраняется проекция ее момента импульса на ось  $z$ :

$$M_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = m\rho^2 \dot{\phi} = \text{const}.$$

## §2.2. Закон сохранения энергии

Перейдем к выяснению следствий однородности времени. В силу этой однородности функция Лагранжа не может зависеть от времени явно, т.е. должно быть

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0.$$

Вычислим полную производную функции Лагранжа по времени, учитывая это условие, а также уравнения Лагранжа (1.16)

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \ddot{q}_\alpha \right\} = \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \ddot{q}_\alpha \right\} = \sum_{\alpha=1}^s \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha \right\},$$

или

$$\frac{d}{dt} \left\{ \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha - L \right\} = 0.$$

Отсюда следует, что величина

$$E = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha - L, \quad (2.13)$$

называемая *обобщенной энергией*, сохраняется при движении системы. Это есть наиболее общее выражение для обобщенной энергии, применимое к функции Лагранжа произвольного вида. Применим его к случаю когда функция Лагранжа имеет вид  $L = T + V - U$ ,

где  $V$  обозначает члены, линейные по скоростям частиц (см. §1.4). Для этого сформулируем и докажем *теорему Эйлера об однородных функциях*. Пусть функция  $f(x_1, \dots, x_n)$  дифференцируема и такова, что

$$f(ax_1, \dots, ax_s) = a^d f(x_1, \dots, x_s), \quad (2.14)$$

где  $a$  произвольное, а  $d$  – некоторое фиксированное число. В этом случае говорят, что функция  $f(x_1, \dots, x_s)$  является *однородной функцией* своих аргументов, а число  $d$  называют *степенью однородности*. Продифференцировав определение (2.14) по  $a$  и положив затем  $a = 1$ , получим соотношение

$$\sum_{\alpha=1}^s x_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} f(x_1, \dots, x_s) = d f(x_1, \dots, x_s), \quad (2.15)$$

которое и составляет содержание теоремы Эйлера. При применении этой теоремы к выражению (2.13) переменными  $x_\alpha$  являются обобщенные скорости  $\dot{q}_\alpha$ . Поскольку согласно соотношению (1.13) декартовы скорости  $\dot{\mathbf{r}}$  являются однородными функциями обобщенных скоростей  $\dot{q}_\alpha$  первой степени, то при их подстановке в функцию Лагранжа мы получим, что кинетическая энергия  $T$  является однородной функцией обобщенных скоростей второй степени, обобщенный потенциал  $V$  – однородной функцией первой степени, а потенциальная энергия  $U$  – однородной функцией нулевой степени, поскольку  $U$  от скоростей вообще не зависит. Поэтому, применяя теорему Эйлера, мы получим

$$\sum_{\alpha=1}^s \dot{q}_\alpha \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} = 2T, \quad \sum_{\alpha=1}^s \dot{q}_\alpha \frac{\partial V}{\partial \dot{q}_\alpha} = V, \quad \sum_{\alpha=1}^s \dot{q}_\alpha \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_\alpha} = 0.$$

Подстановка в (2.13) дает

$$E = T + U. \quad (2.16)$$

Таким образом, для того чтобы получить обобщенную энергию, в функции Лагранжа следует опустить члены, линейные по обобщенным скоростям, и поменять знак перед членами, от них не зависящими.

**Пример 5.** Обобщенная энергия в электромагнитном поле Применяя сформулированное правило, получаем обобщенную энергию, соответствующую функции Лагранжа (1.22) для частицы в электромагнитном поле

$$E = \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} + q\varphi(\mathbf{r}, t). \quad (2.17)$$

Она сохраняется, если потенциалы  $\mathbf{A}, \varphi$  не зависят от времени явно.

**Пример 6.** Функция Лагранжа (1.28) материальной точки, движущейся под действием силы трения, явно зависит от времени, поэтому ее обобщенная энергия не сохраняется.

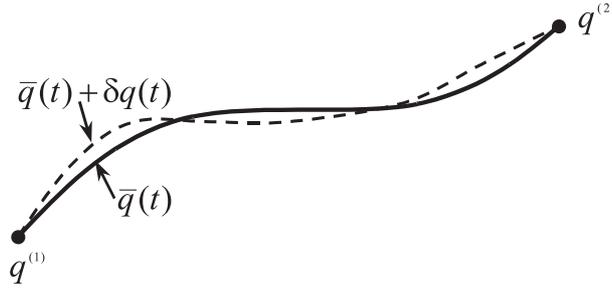


Рис. 2: Схематическое изображение действительной траектории (сплошная линия) и одной из близких к ней виртуальных траекторий (штриховая линия).

### §2.3. Принцип наименьшего действия

Пусть движение данной механической системы с  $s$  степенями свободы определяется функцией Лагранжа  $L(q, \dot{q}, t)$ ,  $t_1, t_2$  – некоторые моменты времени ( $t_1 < t_2$ ), и  $q_\alpha(t)$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$  – набор дважды дифференцируемых функций времени, удовлетворяющих условиям

$$q_\alpha(t_1) = q_\alpha^{(1)}, \quad q_\alpha(t_2) = q_\alpha^{(2)}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (2.18)$$

где  $q^{(1)}$  и  $q^{(2)}$  – заданные значения обобщенных координат системы в моменты времени  $t_1$  и  $t_2$ , соответственно. Любой такой набор назовем *виртуальной траекторией* системы. Среди множества виртуальных траекторий имеется одна траектория, удовлетворяющая уравнениям Лагранжа, которую мы назовем *действительной*.

Для данной виртуальной траектории  $q(t)$  построим интеграл

$$S[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt. \quad (2.19)$$

Таким образом, каждому набору функций  $q(t)$  сопоставляется определенное число  $S[q(t)]$  по правилу (2.19). Другими словами,  $S[q(t)]$  является функцией от функций  $q(t)$ . Такие объекты называют *функционалами*. Функционал  $S[q(t)]$  называется *действием* системы.

Оказывается, что уравнения Лагранжа (1.16) могут быть получены из следующего вариационного принципа, называемого *принципом наименьшего действия*: *На любом временном отрезке  $t \in [t_1, t_2]$  система движется таким образом, что ее действие принимает наименьшее возможное значение, причем сравниваются все виртуальные траектории, удовлетворяющие условиям (2.18).*

*Доказательство.* Обозначим через  $\bar{q}(t)$  виртуальную траекторию, на которой действие системы принимает наименьшее значение, и рассмотрим близкие к ней траектории  $q(t) = \bar{q}(t) + \delta q(t)$ , где  $\delta q(t)$  – малые функции времени (см. Рис. 2). При переходе от  $\bar{q}(t)$  к  $\bar{q}(t) + \delta q(t)$  действие возрастает. В первом порядке по малым  $\delta q(t)$  изменение действия

$$\begin{aligned}
 \delta S &\equiv S[\bar{q}(t) + q(t)] - S[\bar{q}(t)] \\
 &= \int_{t_1}^{t_2} L(\bar{q}(t) + \delta q(t), \dot{\bar{q}}(t) + \delta \dot{q}(t), t) dt - \int_{t_1}^{t_2} L(\bar{q}(t), \dot{\bar{q}}(t), t) dt \\
 &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \delta \dot{q}_\alpha(t) \right\} dt, \tag{2.20}
 \end{aligned}$$

где производные  $\partial L/\partial q$ ,  $\partial L/\partial \dot{q}$  вычисляются на траектории  $\bar{q}(t)$ . Учитывая равенство (2.1), которое для вариаций виртуальных траекторий выводится в точности так же, как в §2.1, проинтегрируем второй член в подынтегральном выражении по частям

$$\int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \delta \dot{q}_\alpha dt = \sum_{\alpha=1}^s \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \frac{d}{dt} \delta q_\alpha(t) dt = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \delta q_\alpha(t) \Big|_{t_1}^{t_2} - \sum_{\alpha=1}^s \int_{t_1}^{t_2} \delta q_\alpha(t) \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} dt.$$

Первый член в последнем выражении обращается в нуль, поскольку как функция  $\bar{q}(t)$ , так и функция  $\bar{q}(t) + \delta q(t)$  удовлетворяет условиям (2.18), и следовательно,  $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ . Поэтому вариация действия принимает вид

$$\delta S = \sum_{\alpha=1}^s \int_{t_1}^{t_2} \delta q_\alpha(t) \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \right\} dt. \tag{2.21}$$

В силу предположения о минимальности  $S[\bar{q}(t)]$  имеем  $\delta S \geq 0$ . Покажем теперь, что  $\delta S$  на самом деле должно быть равно нулю. Действительно, допустим, что существует такая виртуальная траектория  $\bar{q}(t) + \delta q(t)$ , для которой  $\delta S > 0$ . Тогда из уравнения (2.21) следовало бы, что для виртуальной траектории  $\bar{q}(t) - \delta q(t)$  вариация действия  $\delta S < 0$ , в противоречии с минимальностью величины  $S[\bar{q}(t)]$ . Таким образом,

$$\delta S = \sum_{\alpha=1}^s \int_{t_1}^{t_2} \delta q_\alpha(t) \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \right\} dt = 0. \tag{2.22}$$

В силу независимости обобщенных координат и произвольности их вариаций, последнее равенство будет удовлетворяться, только если коэффициенты при всех  $\delta q$  независимо друг от друга обращаются в нуль, т.е. функции  $\bar{q}(t)$  удовлетворяют уравнениям Лагранжа

$$\frac{\partial L}{\partial q_\alpha} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s,$$

а это и означает, что  $\bar{q}(t)$  – действительная траектория.

### Глава 3. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ

Переходя к интегрированию уравнений движения различных систем с помощью формализма Лагранжа, сформулируем сначала общий алгоритм его применения:

- А. Определите число степеней свободы системы,  $s$ . Для системы  $N$  материальных точек  $s = 3N - n$ , где  $n$  – число голономных связей, наложенных на систему.
- В. Выберите обобщенные координаты системы,  $q_\alpha, \alpha = 1, \dots, s$  и выразите через них декартовы координаты точек системы,  $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(q), i = 1, \dots, N$ . Обобщенные координаты должны решать уравнения связей, т.е. выражения  $\mathbf{r}_i(q)$  должны тождественно удовлетворять уравнениям (1.5). Кроме того, эти координаты следует выбирать так чтобы по возможности максимально полно учесть симметрии потенциалов взаимодействий частиц.
- С. Вычислите полные производные по времени от функций  $\mathbf{r}_i(q)$  и затем составьте функцию Лагранжа системы  $L(\mathbf{r}(q), \dot{\mathbf{r}}(q, \dot{q}), t)$ .
- Д. Исследуйте систему на наличие законов сохранения. Если внешние силы, действующие на систему, не меняются при трансляции в некотором направлении или повороте вокруг некоторой оси, причем связи, наложенные на систему, допускают такое перемещение, запишите законы сохранения соответствующих проекций обобщенного декартова импульса или момента импульса [см. уравнения (2.5), (2.8)]. Если обобщенные координаты выбраны таким образом, что изменение какой-либо из них при фиксированных остальных описывает указанное перемещение, то соответствующую сохраняющуюся величину можно получить по формулам (2.10), (2.12). Наконец, если функция Лагранжа не зависит от времени явно, составьте закон сохранения обобщенной энергии [см. формулу (2.13)].
- Е. Из получившихся уравнений выберите независимые. Если их число равно числу степеней свободы, то необходимости в построении уравнений Лагранжа нет, и следует переходить к интегрированию найденных  $s$  уравнений, связывающих  $q$  и  $\dot{q}$ . Если же число независимых законов сохранения меньше  $s$ , следует выписать недостающее число уравнений Лагранжа, так чтобы в результате получить систему  $s$  независимых уравнений, связывающих величины  $q, \dot{q}, \ddot{q}$  и затем ее интегрировать.

**Замечание:** если силы, действующие на частицы, линейны по их координатам и скоростям, то закон движения обычно удобнее искать непосредственно интегрируя уравнения Лагранжа, не выписывая законов сохранения (см. пример 3 и §4.1).

#### §3.1. Движение с одной степенью свободы

Рассмотрим движение системы с одной степенью свободы. В этом случае уравнения (1.11) имеют вид

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q} \dot{q}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.1)$$

подставляя которые в функцию Лагранжа  $L = T - U$ , получим

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q}, \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q} \right) \dot{q}^2 - U(\mathbf{r}(q), t) \equiv \frac{m(q)\dot{q}^2}{2} - U(q, t). \quad (3.2)$$

Для краткости, сложная функция  $U(\mathbf{r}(q), t)$  обозначается просто  $U(q, t)$ . Заметим, что функция  $m(q) > 0$ . Закон движения системы, описываемой функцией Лагранжа (3.2), может быть найден в общем виде в случае, когда потенциальная энергия не зависит явно от времени. Поскольку  $m(q)$  также не зависит от времени, то  $\partial L / \partial t = 0$ , и поэтому сохраняется обобщенная энергия системы [см. уравнение (2.16)]

$$E = \frac{m(q)\dot{q}^2}{2} + U(q). \quad (3.3)$$

Это уравнение может быть решено относительно  $q(t)$  путем разделения дифференциалов. Мы имеем

$$\frac{dq}{dt} = \pm \sqrt{\frac{2}{m(q)}[E - U(q)]}, \quad (3.4)$$

откуда

$$dt = \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{\pm \sqrt{E - U(q)}}.$$

Интегрирование последнего равенства дает

$$t - t_0 = \int_{q_0}^q \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{\pm \sqrt{E - U(q)}}, \quad (3.5)$$

где  $q_0, q$  – значения обобщенной координаты в моменты времени  $t_0, t$  соответственно. Знак  $+$  ( $-$ ) перед корнем берется на тех участках траектории, где  $\dot{q} > 0$  ( $\dot{q} < 0$ ).

Таким образом, задача определения функции  $q(t)$  сведена к вычислению интеграла от известной функции, или, как говорят, *закон движения найден в квадратурах*. После взятия интеграла функция  $q(t)$  получается обращением функции  $t(q)$ , определяемой уравнением (3.5).

Исследуем качественно общие свойства движения с одной степенью свободы. Для этого достаточно рассмотреть график потенциальной энергии, изображенный на Рис. 3. Поскольку  $m(q) > 0$ , то из уравнения (3.4) следует, что при заданном значении энергии  $E$  система может двигаться лишь в областях, в которых

$$U(q) \leq E.$$

В точках, удовлетворяющих уравнению  $U(q) = E$ , обобщенная скорость обращается в нуль. Такие точки называются *точками остановки*. На Рис. 3 точки  $q_1, q_2, q_3$  являются точками остановки при движении с энергией  $E = E_2$ . При этом допустимыми для движения областями являются  $q \in [q_1, q_2]$  и  $q \geq q_3$ . Поскольку функция  $q(t)$  непрерывна, система при своем движении не может “перескочить” из одной допустимой области в другую.

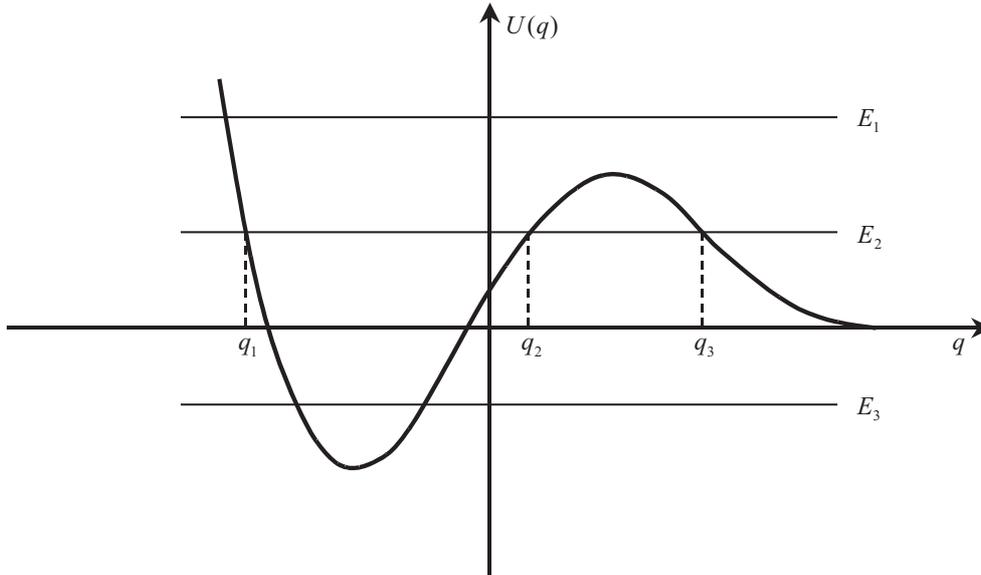


Рис. 3: Схематический вид потенциальной энергии одномерного движения. Функция  $U(q)$  неограниченно возрастает при  $q \rightarrow -\infty$  и стремится к нулю при  $q \rightarrow +\infty$ .

Пусть  $q'$  — точка остановки. Рассмотрим движение системы в малой окрестности этой точки. Если

$$\frac{dU}{dq}(q') > 0,$$

то область справа от точки  $q'$  недостижима для системы с данным значением  $E$ . Поэтому в точке остановки обобщенная скорость переходит от положительных к отрицательным значениям. Наоборот, если

$$\frac{dU}{dq}(q') < 0,$$

то недостижимой для системы является область слева от  $q'$ , и в этой точке обобщенная скорость переходит от отрицательных значений к положительным.

Если движение системы таково, что все составляющие ее материальные точки все время остаются в ограниченной области пространства, то такое движение называется *финитным*. В противном случае движение называется *инфинитным*. Это определение применимо к движению с любым  $s$ . При  $s = 1$  финитное движение ограничено двумя точками остановки:  $q \in [q_1, q_2]$ . Пусть в начальный момент времени  $t_0$  система начинает движение из точки  $q(t_0) = q_0 \in (q_1, q_2)$  с  $\dot{q}(t_0) > 0$ . По достижении точки  $q_2$  обобщенная скорость изменит знак, и система будет двигаться от  $q_2$  к  $q_1$ , пройдя при этом точку  $q_0$  с отрицательной скоростью. В точке  $q_1$  скорость снова изменит знак на положительный, и в некоторый момент времени  $t = t'$  система окажется в точке  $q_0$ , имея положительную скорость в этой точке. Согласно формуле (3.4) абсолютная величина обобщенной скорости однозначно определяется значением  $q$ , поэтому  $|\dot{q}(t_0)| = |\dot{q}(t')|$ , а как мы только что видели, знаки  $\dot{q}$  в моменты времени  $t_0$  и  $t'$  также одинаковы, и потому  $\dot{q}(t_0) = \dot{q}(t')$ . Другими словами, в моменты времени  $t_0$  и  $t'$  система находится в одном и том же состоянии

(понятие состояния см. в §1.1). Из формулы (3.5) следует, что

$$t' - t_0 \equiv T = \int_{q_0}^{q_2} \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{\sqrt{E - U(q)}} + \int_{q_2}^{q_1} \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{-\sqrt{E - U(q)}} + \int_{q_1}^{q_0} \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{\sqrt{E - U(q)}},$$

или

$$T = \int_{q_1}^{q_2} \frac{\sqrt{2m(q)} dq}{\sqrt{E - U(q)}}. \quad (3.6)$$

Как мы видим, величина  $T$  не зависит от выбора точки  $q_0$ . Поэтому для любой точки  $q \in [q_1, q_2]$ , которую система проходит в момент времени  $t$ , мы будем иметь

$$q(t) = q(t + T), \quad \dot{q}(t) = \dot{q}(t + T).$$

Поскольку соотношениями (1.6), (1.11) декартовы координаты и декартовы скорости точек системы однозначно выражаются через  $q, \dot{q}$ , то отсюда следует также, что

$$\mathbf{r}_i(t) = \mathbf{r}_i(t + T), \quad \dot{\mathbf{r}}_i(t) = \dot{\mathbf{r}}_i(t + T), \quad i = 1, \dots, N. \quad (3.7)$$

Движение системы, удовлетворяющее условиям (3.7), называется *периодическим*, а  $T$  – *периодом* движения. Это определение применимо к системам с любым числом степеней свободы.

Таким образом, финитное движение с одной степенью свободы периодически.

**Пример 7. Финитное и инфинитное движение.** Вернемся к Рис. 3. Пусть  $q$  является декартовой координатой, задающей положение материальной точки на прямой, а  $m(q) = m$  – ее масса. Тогда, по определению, движение с  $E = E_2$  является финитным в области  $q \in [q_1, q_2]$ . Если же  $q_0 > q_3$ , то даже если  $\dot{q}(t_0) < 0$ , скорость поменяет знак через конечный промежуток времени

$$\Delta t = \int_{q_3}^{q_0} \frac{\sqrt{\frac{m(q)}{2}} dq}{\sqrt{E - U(q)}},$$

после чего будет оставаться все время положительной и конечной по величине. Поэтому  $q \rightarrow \infty$  при  $t \rightarrow \infty$ . Таким образом, в области  $q \geq q_3$  движение инфинитно. Аналогичные рассуждения показывают, что при  $E = E_1$  возможно лишь инфинитное движение, а при  $E = E_3$  – лишь финитное.

**Пример 8. Математический маятник.** Пусть материальная точка массы  $m$ , соединенная жестким невесомым стержнем длины  $l$  с неподвижной точкой подвеса, движется в вертикальной плоскости под действием силы тяжести. Такая система называется *математическим маятником*. За обобщенную координату маятника примем угол  $\phi$  между вертикалью и стержнем. Тогда декартовы координаты точки выражаются через  $\phi$  согласно

$$x = l \sin \phi, \quad y = -l \cos \phi.$$

Отсюда

$$\dot{x} = l\dot{\phi} \cos \phi, \quad \dot{y} = l\dot{\phi} \sin \phi, \quad \dot{x}^2 + \dot{y}^2 = l^2 \dot{\phi}^2.$$

Функция Лагранжа математического маятника имеет вид

$$L = \frac{ml^2 \dot{\phi}^2}{2} + mgl \cos \phi,$$

где  $g$  – ускорение силы тяжести. Подставляя  $m(\phi) = ml^2$ ,  $U = -mgl \cos \phi$  в уравнение (3.5), получаем

$$t - t_0 = \sqrt{\frac{ml^2}{2}} \int_{\phi_0}^{\phi} \frac{d\phi}{\pm \sqrt{E + mgl \cos \phi}}. \quad (3.8)$$

Рассмотрим движение маятника с энергией  $E > mgl$ . В этом случае уравнение  $U(q) = E$  не имеет решений вовсе, и поэтому обобщенная скорость  $\dot{\phi}$  имеет постоянный знак, т.е. движение маятника представляет собой *вращение*. Это движение является периодическим:  $x(t + T) = x(t)$ ,  $y(t + T) = y(t)$ , где

$$T = \sqrt{\frac{ml^2}{2}} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{\sqrt{E + mgl \cos \phi}}.$$

Обратим внимание на то, что условие  $\phi(t + T) = \phi(t)$  при этом не выполняется: с каждым оборотом угол  $\phi$  увеличивается (или уменьшается) на  $2\pi$ .

### §3.2. Задача двух тел

Рассмотрим систему, состоящую из двух материальных точек, потенциальная энергия взаимодействия которых зависит лишь от расстояния между ними:  $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ , а связи отсутствуют. Число степеней свободы такой системы  $s = 3 \times 2 = 6$ . В качестве обобщенных координат выберем три компоненты радиус-вектора центра инерции системы

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}$$

и три компоненты вектора  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ . Выразим радиус-векторы точек через обобщенные координаты. Мы имеем

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2 \mathbf{r}}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1 \mathbf{r}}{m_1 + m_2}. \quad (3.9)$$

Дифференцируя эти соотношения по времени, получаем выражения для скоростей частиц

$$\dot{\mathbf{r}}_1 = \dot{\mathbf{R}} + \frac{m_2 \dot{\mathbf{r}}}{m_1 + m_2}, \quad \dot{\mathbf{r}}_2 = \dot{\mathbf{R}} - \frac{m_1 \dot{\mathbf{r}}}{m_1 + m_2}, \quad (3.10)$$

подстановка которых в функцию Лагранжа дает

$$L = \frac{m_1 \dot{\mathbf{r}}_1^2}{2} + \frac{m_2 \dot{\mathbf{r}}_2^2}{2} - U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{m \dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(r), \quad (3.11)$$

где  $\mu = m_1 + m_2$ , а величина  $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  называется *приведенной массой* двух частиц. Мы видим, что в координатах  $\mathbf{R}, \mathbf{r}$  функция Лагранжа распадается на два слагаемых, зависящих от различных наборов переменных. А именно, первый член в (3.11) описывает свободное движение материальной точки с массой  $\mu$  и радиус-вектором  $\mathbf{R}$ , а остальные – движение материальной точки с массой  $m$  и радиус-вектором  $\mathbf{r}$  в заданном потенциальном поле  $U(r)$ . Тот факт, что функция Лагранжа является суммой функций Лагранжа этих систем означает, что уравнения Лагранжа для первой системы не содержат координат второй, и наоборот, и потому их движения независимы. Таким образом, исходная задача двух тел сведена к одночастичной.

Компоненты  $\mathbf{R}$  являются циклическими координатами. В соответствии с формулой (2.10)  $\partial L / \partial \dot{\mathbf{R}}$  есть сохраняющийся декартов импульс системы:

$$\mathbf{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{R}}} = \mu \dot{\mathbf{R}},$$

откуда следует, что

$$\mathbf{R}(t) = \frac{\mathbf{P}t}{\mu} + \mathbf{R}(0).$$

Рассмотрим теперь движение точки с массой  $m$ . Оно описывается функцией Лагранжа

$$L = \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(r). \quad (3.12)$$

Поскольку потенциальная энергия зависит лишь от  $r$ , функция Лагранжа не меняется при поворотах относительно любой оси, проходящей через точку  $\mathbf{r} = 0$ . Поэтому сохраняется ее момент импульса

$$\mathbf{M} = [\mathbf{r}, \mathbf{p}], \quad \mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}}. \quad (3.13)$$

Отсюда следует, что

$$(\mathbf{r}, \mathbf{M}) = 0. \quad (3.14)$$

Другими словами, материальная точка движется все время в плоскости, перпендикулярной сохраняющемуся вектору  $\mathbf{M}$ . Выберем полярные координаты  $r, \phi$  в этой плоскости (с полярной осью, направленной по вектору  $\mathbf{M}$ )

$$x = r \cos \phi, \quad y = r \sin \phi.$$

Полагая в формуле (1.19)  $\rho = r, z = 0$ , получаем функцию Лагранжа в координатах  $r, \phi$

$$L = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - U(r). \quad (3.15)$$

В соответствии с формулой (2.12) дифференцирование этой функции по  $\dot{\phi}$  дает величину момента импульса, поскольку угол  $\phi$  задает угол поворота частицы вокруг оси, направленной по вектору  $\mathbf{M}$ . Итак,

$$M = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mr^2\dot{\phi}. \quad (3.16)$$

Из этой формулы следует, что  $\dot{\phi} > 0$  в течение всего движения точки. Далее, функция Лагранжа (3.15) не зависит от времени явно,  $\partial L/\partial t = 0$ , и поэтому сохраняется энергия (2.16)

$$E = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) + U(r). \quad (3.17)$$

Итак, имеется два дифференциальных уравнения первого порядка (3.16), (3.17) для двух неизвестных функций  $r(t), \phi(t)$ . Для того чтобы решить эту систему, выразим  $\dot{\phi}$  из уравнения (3.16) и подставим результат в (3.17):

$$E = \frac{m\dot{r}^2}{2} + \frac{M^2}{2mr^2} + U(r). \quad (3.18)$$

Это уравнение имеет тот же вид, что и уравнение (3.3) при движении с одной степенью свободы  $q = r$  в *эффективном* поле с потенциальной энергией

$$U_{\text{эфф}}(r) = U(r) + \frac{M^2}{2mr^2}. \quad (3.19)$$

Второе слагаемое в этом выражении называется *центробежной энергией*. Поэтому мы можем применить формулу (3.5), заменяя в ней  $U(r)$  на  $U_{\text{эфф}}(r)$

$$t - t_0 = \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{r_0}^r \frac{dr}{\pm \sqrt{E - U_{\text{эфф}}(r)}}. \quad (3.20)$$

Найдем теперь *уравнение траектории* точки, т.е. связь координат  $r, \phi$ . Для этого разделим дифференциалы в уравнении (3.16)

$$d\phi = \frac{M}{mr^2} dt, \quad (3.21)$$

подставляем

$$dt = \frac{\sqrt{\frac{m}{2}} dr}{\pm \sqrt{E - U_{\text{эфф}}(r)}}, \quad (3.22)$$

и получаем после интегрирования:

$$\phi - \phi_0 = \int_{r_0}^r \frac{M}{\sqrt{2m} r^2} \frac{dr}{\pm \sqrt{E - U_{\text{эфф}}(r)}}, \quad \phi_0 = \phi(t_0). \quad (3.23)$$

Напомним, что в этой формуле корень берется со знаком плюс, если на данном участке траектории  $\dot{r} > 0$ , и со знаком минус, если  $\dot{r} < 0$ . Уравнение (3.20) определяет в неявном виде зависимость  $r(t)$ , а уравнение (3.23) – функцию  $\phi(r)$ , подставляя в которую  $r(t)$  найдем зависимость  $\phi$  от времени. Таким образом, мы получили полное решение задачи двух тел в квадратурах.

Из формулы (3.23) имеет интересное следствие. Пусть момент времени  $t = t_0$  соответствует какой-либо *точке поворота*, т.е. точке, в которой  $\dot{r} = 0$ . Договоримся отсчитывать угол  $\phi$  от направления радиус-вектора материальной точки в этот момент, т.е. положим  $\phi_0 = 0$ , и рассмотрим движение в окрестности  $\phi = 0$ . Если на данном участке траектории  $\dot{r} > 0$ , то из формулы (3.23) найдем

$$\phi = \int_{r_0}^r \frac{M}{\sqrt{2m r^2} + \sqrt{E - U_{\text{eff}}(r)}} dr, \quad (3.24)$$

Если же на данном участке траектории  $\dot{r} < 0$ , то будет

$$\phi = \int_{r_0}^r \frac{M}{\sqrt{2m r^2} - \sqrt{E - U_{\text{eff}}(r)}} dr. \quad (3.25)$$

Сравнивая выражения (3.24), (3.25), заключаем, что  $r(\phi) = r(-\phi)$ . Таким образом, обе рассматриваемые ветви траектории переходят друг в друга при отражении относительно прямой  $\phi = 0$ . Поскольку это справедливо для любой точки поворота, то мы приходим к выводу, что при движении в центрально-симметричном поле вся траектория является симметричной при отражении относительно любой прямой, соединяющей центр поля с какой-либо точкой поворота.

### §3.3. Движение в кулоновом поле

Применим полученные результаты к важнейшему случаю кулонова поля

$$U(r) = \frac{\alpha}{r}.$$

Случай  $\alpha > 0$  ( $\alpha < 0$ ) соответствует полю отталкивания (притяжения). Определим сперва возможные типы движения в таком поле. Для этого следует обратиться к уравнению (3.18), определяющему функцию  $r(t)$ , поскольку движение точки происходит в ограниченной области пространства тогда и только тогда, когда эта функция ограничена при всех  $t$ . Эффективная потенциальная энергия имеет экстремумы в точках, удовлетворяющих уравнению

$$\frac{dU_{\text{eff}}}{dr} = -\frac{\alpha}{r^2} - \frac{M^2}{mr^3} = 0. \quad (3.26)$$

В случае поля отталкивания это уравнение не имеет решений вовсе, тогда как в случае поля притяжения единственный его корень есть

$$\bar{r} = \frac{M^2}{m|\alpha|}. \quad (3.27)$$

Поскольку  $U_{\text{eff}} \rightarrow +\infty$  при  $r \rightarrow 0$  и  $U_{\text{eff}} \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ , в точке (3.27) эффективная потенциальная энергия имеет абсолютный минимум

$$U_{\text{eff}}(\bar{r}) = -\frac{m\alpha^2}{2M^2}.$$

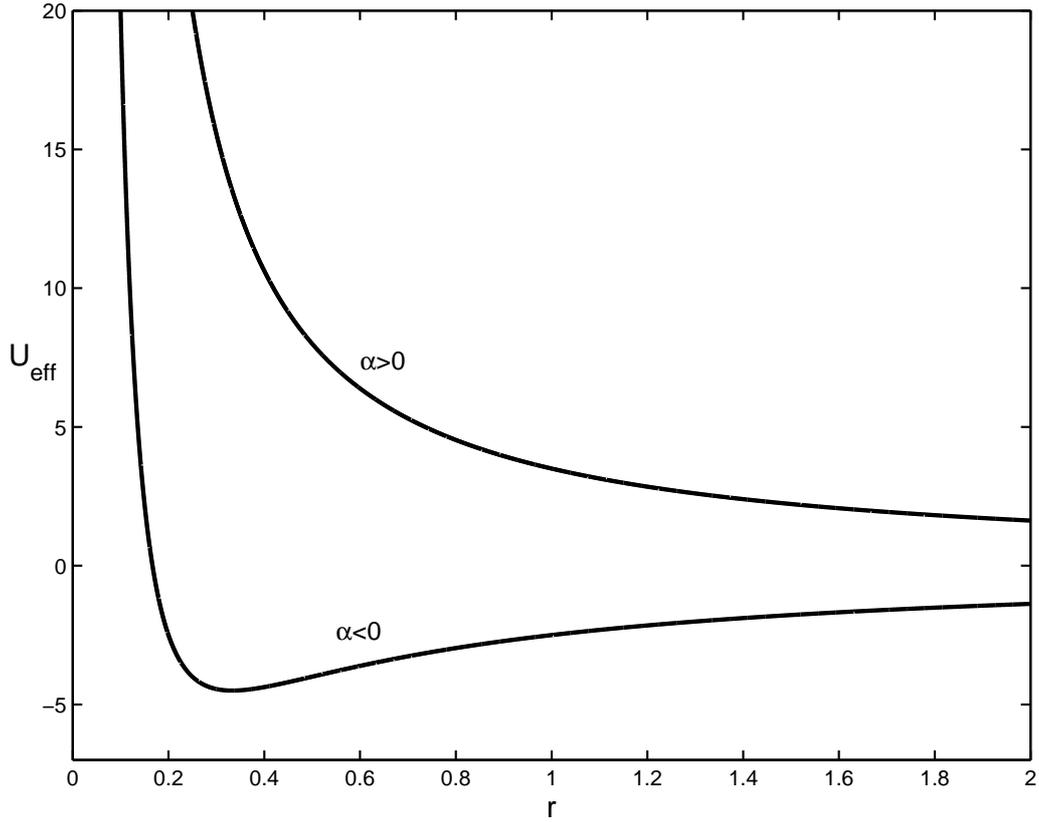


Рис. 4: Характерный вид эффективной потенциальной энергии в кулоновых полях отталкивания и притяжения (условные единицы).

Графики эффективной потенциальной энергии в случаях  $\alpha > 0$  и  $\alpha < 0$  приведены на Рис. 4.

Найдем уравнение траектории. Пусть момент времени  $t = t_0$  соответствует точке поворота траектории, в которой  $r$  имеет минимальное значение  $r_{\min}$ . Договоримся отсчитывать угол  $\phi$  от направления радиус-вектора материальной точки в этот момент, т.е. положим  $\phi_0 = 0$ , и рассмотрим движение на отрезке времени  $[t_0, t]$ , на котором  $\dot{r} > 0$ . Поскольку всегда  $\dot{\phi} \geq 0$ , то условие  $\dot{r} > 0$  означает, что на рассматриваемом участке траектории  $\phi > 0$ . Формула (3.23) дает

$$\begin{aligned}
 \phi &= \int_{r_{\min}}^r \frac{\frac{M}{r^2} dr}{\sqrt{2mE - \frac{M^2}{r^2} - \frac{2m\alpha}{r}}} = - \int_{r_{\min}}^r \frac{d\left(\frac{M}{r}\right)}{\sqrt{2mE + \frac{m^2\alpha^2}{M^2} - \left(\frac{M}{r} + \frac{m\alpha}{M}\right)^2}} \\
 &= \arccos \frac{\frac{M}{r} + \frac{m\alpha}{M}}{\sqrt{2mE + \frac{m^2\alpha^2}{M^2}}} \Bigg|_{r_{\min}}^r.
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

Вводя обозначения

$$e = \sqrt{1 + \frac{2EM^2}{m\alpha^2}}, \quad p = \frac{M^2}{m|\alpha|},$$

перепишем уравнение (3.28) в виде

$$\phi = \arccos \left\{ \frac{1}{e} \left[ \frac{p}{r} + \frac{\alpha}{|\alpha|} \right] \right\} \Big|_{r_{\min}}^r \quad (3.29)$$

Точки остановки по координате  $r$  (т.е. точки, в которых  $\dot{r} = 0$ ), в частности, точка  $r_{\min}$ , определяются нулями корня в подинтегральном выражении в (3.28), т.е. уравнением

$$2mE + \frac{m^2\alpha^2}{M^2} = \left( \frac{M}{r} + \frac{m\alpha}{M} \right)^2, \quad (3.30)$$

решениями которого во введенных обозначениях являются

$$r_{\min}^{\max} = \frac{p}{-\frac{\alpha}{|\alpha|} \pm e}. \quad (3.31)$$

В случае поля отталкивания  $\alpha > 0, E > 0, e > 1$ , следовательно, имеется лишь один положительный корень  $r_{\min} = p/(e - 1)$ . В случае поля притяжения  $\alpha < 0$  возможны два варианта. При  $E \geq 0$  мы имеем  $e \geq 1$  и снова лишь один положительный корень  $r_{\min} = p/(1 + e)$ , а при  $E < 0$  имеем  $e < 1$ , и поэтому оба корня (3.31) положительны:  $r_{\min} = p/(1 + e)$ ,  $r_{\max} = p/(1 - e)$ . Во всех трех случаях при  $r = r_{\min}$  аргумент  $\arccos$  в формуле (3.29) равен единице. Таким образом, уравнение траектории на участке  $\phi > 0$  имеет вид

$$\frac{p}{r} = -\frac{\alpha}{|\alpha|} + e \cos \phi. \quad (3.32)$$

Мы знаем, с другой стороны, что  $r(\phi) = r(-\phi)$ , поэтому на участке  $\phi < 0$  уравнение траектории имеет тот же самый вид (3.32).

#### А. Кулоново поле притяжения. Законы Кеплера

Рассмотрим движение с  $E < 0$  в кулоновом поле притяжения более подробно. При  $\alpha < 0, E < 0$  уравнение траектории имеет вид

$$\frac{p}{r} = 1 + e \cos \phi, \quad e = \sqrt{1 - \frac{2|E|M^2}{m\alpha^2}} < 1. \quad (3.33)$$

Покажем, прежде всего, что *финитное движение в кулоновом поле является периодическим*. Для этого рассмотрим движение материальной точки на отрезке  $\phi \in [-\pi, +\pi]$ . Согласно уравнению (3.33) на границах этого отрезка  $r = p/(1 - e) = r_{\max}$ , и поэтому  $\dot{r}(-\pi) = \dot{r}(+\pi) = 0$ . Далее, из уравнения (3.16) следует, что  $\dot{\phi}$  также имеет одно и то же значение [равное  $M/(mr_{\max}^2)$ ] в начале и конце пути. С другой стороны, значения  $\phi = -\pi$  и  $\phi = +\pi$  соответствуют одной и той же точке пространства. Таким образом, конечное состояние материальной точки совпадает с ее начальным состоянием. Поскольку

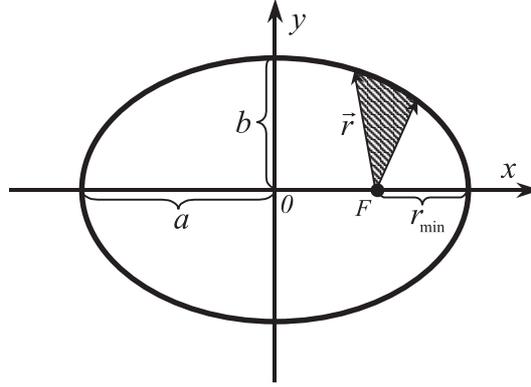


Рис. 5: Траектория финитного движения материальной точки в кулоновом поле. Центр поля обозначен через  $F$ .

задание состояния системы в некоторый момент времени полностью определяет ее дальнейшую эволюцию, то мы приходим к выводу о том, что движение материальной точки периодически. В частности, *траектории финитного движения в кулоновом поле замкнуты*.

Кривая, описываемая уравнением (3.33), представляет собой *эллипс*, один из фокусов которого совпадает с центром поля. В применении к движению планет солнечной системы это утверждение составляет содержание *первого закона Кеплера*. Введенные выше величины  $e$  и  $p$  называются *эксцентриситетом* и *параметром* эллипса, соответственно. Свяжем их с большой ( $a$ ) и малой ( $b$ ) полуосями эллипса, определяющими каноническую форму уравнения эллипса

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1, \quad (3.34)$$

где  $x, y$  – декартовы координаты точки эллипса (см. Рис. 5). Как видно из рисунка,

$$a = \frac{r_{\min} + r_{\max}}{2} = \frac{1}{2} \left[ \frac{p}{1+e} + \frac{p}{1-e} \right] = \frac{p}{1-e^2}.$$

Далее, по определению эксцентриситета,

$$e = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}}.$$

Поэтому

$$b = a\sqrt{1 - e^2} = \frac{p}{\sqrt{1 - e^2}}.$$

Из Рис. 5 очевидна связь декартовых и полярных координат:

$$\begin{aligned} x &= a - r_{\min} + r \cos \phi = ea + r \cos \phi, \\ y &= r \sin \phi. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Используя эти соотношения, нетрудно проверить эквивалентность уравнений (3.33) и (3.34). Наконец, используя определения  $e$  и  $p$ , можно выразить полуоси орбиты через

энергию и момент материальной точки:

$$a = \frac{|\alpha|}{2|E|}, \quad b = \frac{M}{\sqrt{2m|E|}}. \quad (3.36)$$

Вернемся к закону сохранения момента импульса (3.16). Выражение, стоящее в правой части этого уравнения, пропорционально площади, заштрихованной радиус-вектором материальной точки в единицу времени и называемой *секториальной скоростью* (заштрихованная площадь на Рис. 5). Действительно, рассмотрим перемещение точки за малый промежуток времени  $\Delta t$ . Тогда с точностью до величин порядка  $(\Delta t)^2$  заштрихованная площадь  $\Delta s$  равна площади прямоугольного треугольника с катетами  $r(t)$  и  $r(t)\dot{\phi}\Delta t$ :  $\Delta s = r^2\dot{\phi}\Delta t/2$ . В пределе  $\Delta t \rightarrow 0$  мы получим

$$\frac{ds}{dt} = \frac{1}{2}r^2(t)\dot{\phi} = \frac{M}{2m} = \text{const}. \quad (3.37)$$

Таким образом, при движении в любом центральном поле секториальная скорость постоянна. В применении к движению планет солнечной системы постоянство секториальной скорости называется *вторым законом Кеплера*. Определим теперь полную площадь  $S$ , заштрихованную радиус-вектором за период. Это есть площадь эллипса, равная  $\pi ab$ . С помощью выражений (3.36) ее можно преобразовать так

$$S = \pi \frac{|\alpha|}{2|E|} \frac{M}{\sqrt{2m|E|}} = \frac{\pi M}{\sqrt{m|\alpha|}} \sqrt{\left(\frac{|\alpha|}{2|E|}\right)^3} = \frac{\pi M}{\sqrt{m|\alpha|}} a^{3/2}.$$

С другой стороны, интегрируя равенство (3.37) по времени, получим

$$S = \int_0^T \frac{ds}{dt} dt = \frac{MT}{2m}.$$

Из полученных уравнений следует выражение для периода движения

$$T = \pi|\alpha| \sqrt{\frac{m}{2|E|^3}} = 2\pi \sqrt{\frac{ma^3}{|\alpha|}}. \quad (3.38)$$

Если  $U(r)$  есть потенциальная энергия тяготеющих материальных точек, то  $\alpha = -Gm_1m_2$ , и мы имеем

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{a^3}{G(m_1 + m_2)}}.$$

В случае солнечной системы масса одной из точек (Солнца) намного превосходит массу другой (планеты)

$$m_1 \equiv M_{\odot} \gg m_2,$$

и поэтому приближенно

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{a^3}{GM_{\odot}}}.$$

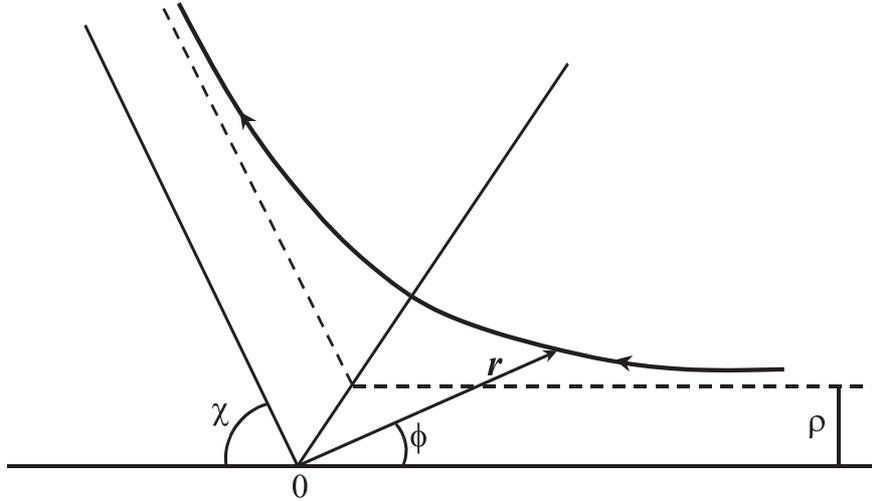


Рис. 6: Траектория материальной точки при рассеянии в центрально-симметричном поле. Штрихованные линии обозначают асимптоты траектории при  $t \rightarrow \pm\infty$ .

Из этой формулы следует, что между отношением  $a/a'$  больших полуосей орбит двух планет и отношением  $T/T'$  периодов их обращения вокруг Солнца имеет место следующая связь, называемая *третьим законом Кеплера*

$$\left(\frac{T}{T'}\right)^2 = \left(\frac{a}{a'}\right)^3.$$

### §3.4. Задача рассеяния. Формула Резерфорда

Рассмотрим однородный поток одинаковых частиц, налетающих на неподвижный силовой центр из бесконечности, где все они имеют одинаковую скорость  $\mathbf{v}_0$ . Пусть потенциальная энергия частиц есть  $U(r)$ . Назовем частицу, прошедшую поле и ушедшую снова на бесконечность, *рассеянной*. *Задача рассеяния* состоит в нахождении распределения рассеянных частиц по углу рассеяния, под которым понимают угол между начальной и конечной скоростью частицы.

Задача рассеяния является частным случаем задачи двух тел, и решается с помощью общей формулы (3.23). Для того чтобы применить эту формулу, нужно выразить входящие в нее параметры  $E, M$  через начальные данные – начальную скорость  $\mathbf{v}_0$  и так называемое *прицельное расстояние*  $\rho$ , которое определяется как расстояние между асимптотой траектории частицы в начале ее движения и центром поля (см. Рис. 6). Другими словами,  $\rho$  есть минимальное расстояние, на котором частица прошла бы от точки  $r = 0$  в отсутствие поля. Договоримся отсчитывать угол  $\phi$  от начального направления радиус-вектора частицы, т.е. положим  $\phi_0 = 0, r_0 = \infty$ . Тогда до рассеяния, т.е., когда  $\mathbf{v}$  еще параллельна  $\mathbf{v}_0$ , имеем  $M = |[\mathbf{r}, m\mathbf{v}]| = mrv \sin \phi$ . В пределе при  $\phi \rightarrow 0, r \rightarrow \infty$ , можно написать, по определению прицельного расстояния,  $r \sin \phi = \rho$ . Поэтому

$$M = m\rho v_0.$$

Учитывая также, что  $E = mv_0^2/2$ , получаем

$$\phi = \int_{\infty}^r \frac{\frac{\rho}{r^2} dr}{\pm \sqrt{1 - \frac{2U(r)}{mv_0^2} - \frac{\rho^2}{r^2}}}.$$

Для рассеянной частицы  $r \rightarrow \infty$ , а значение угла  $\phi$  в конце движения равно

$$\tilde{\phi} = \int_{\infty}^{r_{\min}} \frac{\frac{\rho}{r^2} dr}{-\sqrt{1 - \frac{2U(r)}{mv_0^2} - \frac{\rho^2}{r^2}}} + \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\frac{\rho}{r^2} dr}{+\sqrt{1 - \frac{2U(r)}{mv_0^2} - \frac{\rho^2}{r^2}}},$$

или

$$\tilde{\phi} = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\frac{2\rho}{r^2} dr}{\sqrt{1 - \frac{2U(r)}{mv_0^2} - \frac{\rho^2}{r^2}}}. \quad (3.39)$$

Напомним, что  $r_{\min}$  есть нуль корня в подинтегральном выражении. Как видно из Рис. 6, угол рассеяния  $\chi = \pi - \tilde{\phi}$ .

Для описания распределения рассеянных частиц по углу  $\chi$  используют так называемое *дифференциальное сечение рассеяния*,  $d\sigma$ , которое определяется как число частиц, рассеянных в интервал углов  $[\chi, \chi + d\chi]$  в единицу времени при единичной плотности потока налетающих частиц (плотностью потока частиц называют число частиц, пролетающих в единицу времени через единицу площади, расположенную перпендикулярно скорости частиц). Пусть интервал  $[\rho, \rho + d\rho]$  есть тот интервал прицельных расстояний, которые имеют частицы, рассеиваемые в интервал углов  $[\chi, \chi + d\chi]$ . Тогда число этих частиц равно  $2\pi\rho d\rho$ . Для того чтобы получить эффективное сечение рассеяния, это число следует выразить через  $\chi$  и  $d\chi$ . Для этого напишем

$$d\rho = \frac{d\rho}{d\chi} d\chi.$$

Обычно угол рассеяния уменьшается с увеличением прицельного расстояния, т.е. производная  $d\rho/d\chi$  отрицательна. Поэтому для того чтобы при положительном  $d\chi$  число частиц также было положительным, дифференциальное сечение рассеяния записывают в виде

$$d\sigma = 2\pi\rho \left| \frac{d\rho}{d\chi} \right| d\chi. \quad (3.40)$$

Число рассеянных частиц также можно относить не к  $d\chi$ , а к интервалу телесных углов  $do$  между двумя конусами с углами раствора  $\chi$  и  $\chi + d\chi$ , образующими которых являются асимптоты траекторий рассеянных частиц. Величиной телесного угла с началом в некоторой точке называют площадь поверхности, вырезаемой этим углом на единичной сфере с центром в данной точке, поэтому в рассматриваемом случае  $do = 2\pi \sin \chi d\chi$ , и формула (3.40) принимает вид

$$d\sigma = \frac{\rho}{\sin \chi} \left| \frac{d\rho}{d\chi} \right| do. \quad (3.41)$$

Найдем дифференциальное сечение рассеяния в кулоновом поле. Воспользуемся для этого уравнением (3.32). В этой формуле угол  $\phi$  отсчитывается от направления радиус-вектора точки в момент, когда  $r = r_{\min}$ . Поэтому угол  $\tilde{\phi}$  равен удвоенной величине угла  $\phi$  при  $r = \infty$ , а именно

$$\tilde{\phi} = 2 \arccos \left( \frac{\alpha}{e|\alpha|} \right),$$

или, подставляя  $\tilde{\phi} = \pi - \chi$ ,

$$e \sin \frac{\chi}{2} = \frac{\alpha}{|\alpha|}.$$

Учитывая, что

$$e = \sqrt{1 + \frac{2EM^2}{m\alpha^2}} = \sqrt{1 + \left( \frac{m\rho v_0^2}{\alpha} \right)^2},$$

находим

$$\rho^2 = \left( \frac{\alpha}{mv_0^2} \right)^2 \operatorname{ctg}^2 \frac{\chi}{2},$$

поэтому дифференциальное сечение рассеяния (3.41)

$$d\sigma = \frac{\rho}{\sin \chi} \left| \frac{d\rho}{d\chi} \right| do = \left| \frac{d\rho^2}{d\chi} \right| \frac{do}{2 \sin \chi} = \left( \frac{\alpha}{mv_0^2} \right)^2 \frac{\cos \frac{\chi}{2}}{\sin^3 \frac{\chi}{2}} \frac{do}{2 \sin \chi},$$

или

$$d\sigma = \left( \frac{\alpha}{2mv_0^2} \right)^2 \frac{do}{\sin^4 \frac{\chi}{2}}. \quad (3.42)$$

Это выражение называется *формулой Резерфорда*.

## Глава 4. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ (ПРОДОЛЖЕНИЕ)

### §4.1. Колебания систем со многими степенями свободы

Рассмотрим систему с произвольным числом степеней свободы  $s$ . Пусть для простоты  $V = 0$ , а потенциальная энергия  $U(q)$  системы не зависит явно от времени и при  $q = q^{(0)}$  имеет экстремум:

$$\frac{\partial U}{\partial q_\alpha}(q^{(0)}) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

Исследуем движение системы в малой окрестности  $q^{(0)}$ . Для этого, во-первых, запишем функцию Лагранжа, подставляя выражения (1.6) для декартовых скоростей точек системы в  $L = T - U$ :

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \left( \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha, \sum_{\beta=1}^s \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta} \dot{q}_\beta \right) - U(q) = \sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{m_{\alpha\beta}(q)}{2} \dot{q}_\alpha \dot{q}_\beta - U(q), \quad (4.1)$$

где

$$m_{\alpha\beta}(q) = \sum_{i=1}^N m_i \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\alpha}, \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_\beta} \right). \quad (4.2)$$

Введем новые переменные

$$\xi_\alpha = q_\alpha - q_\alpha^{(0)}, \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

$\xi$  определяют величину отклонения системы от положения равновесия и по предположению малы. Предположим, далее, что в начальный момент времени  $t_0$  скорости  $\dot{q} = \dot{\xi}$  также малы, и будем рассматривать движение системы при таких  $t$ , при которых эти предположения выполняются. Тогда можно разложить функцию Лагранжа (4.1) по степеням малых величин  $\xi, \dot{\xi}$ . Разложение потенциальной энергии имеет вид

$$\begin{aligned} U(q^{(0)} + \xi) &= U(q^{(0)}) + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial U}{\partial q_\alpha}(q^{(0)}) \xi_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{\partial^2 U}{\partial q_\alpha \partial q_\beta}(q^{(0)}) \xi_\alpha \xi_\beta + O(\xi^3) \\ &= U(q^{(0)}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^s k_{\alpha\beta} \xi_\alpha \xi_\beta + O(\xi^3), \end{aligned} \quad (4.3)$$

где

$$k_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 U}{\partial q_\alpha \partial q_\beta}(q^{(0)})$$

есть матрица постоянных коэффициентов. Заметим, что  $k_{\alpha\beta} = k_{\beta\alpha}$ , в силу перестановочности вторых производных. Член  $U(q^{(0)})$  в выражении (4.3) может быть опущен – поскольку в уравнения движения входят только производные от  $L$ , добавление постоянной к функции Лагранжа не меняет этих уравнений. Далее, кинетическая энергия является квадратичной по малым скоростям  $\xi$ , поэтому в низшем порядке в коэффициентах  $m(q)$  следует положить  $q = q^{(0)}$ : учет зависимости  $m(q^{(0)} + \xi)$  от  $\xi$  привел бы к членам

следующего порядка малости. Таким образом, в низшем порядке по малым  $\xi, \dot{\xi}$  функция Лагранжа принимает вид

$$L = \sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{m_{\alpha\beta}}{2} \dot{\xi}_\alpha \dot{\xi}_\beta - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^s k_{\alpha\beta} \xi_\alpha \xi_\beta, \quad (4.4)$$

где  $m_{\alpha\beta} = m_{\alpha\beta}(q^{(0)})$ . Составим уравнения Лагранжа. Мы имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}_\gamma} = \sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{m_{\alpha\beta}}{2} \left( \frac{\partial \dot{\xi}_\alpha}{\partial \dot{\xi}_\gamma} \dot{\xi}_\beta + \dot{\xi}_\alpha \frac{\partial \dot{\xi}_\beta}{\partial \dot{\xi}_\gamma} \right), \quad \gamma = 1, \dots, s.$$

В силу независимости обобщенных скоростей  $\dot{\xi}$

$$\frac{\partial \dot{\xi}_\alpha}{\partial \dot{\xi}_\gamma} = \delta_{\alpha\gamma}.$$

Поэтому

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}_\gamma} = \sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{m_{\alpha\beta}}{2} (\delta_{\alpha\gamma} \dot{\xi}_\beta + \dot{\xi}_\alpha \delta_{\beta\gamma}) = \sum_{\beta=1}^s \frac{m_{\gamma\beta}}{2} \dot{\xi}_\beta + \sum_{\alpha=1}^s \frac{m_{\alpha\gamma}}{2} \dot{\xi}_\alpha, \quad \gamma = 1, \dots, s.$$

Из определения (4.2) следует, что  $m_{\alpha\beta} = m_{\beta\alpha}$ . Учитывая это и заменяя индекс суммирования в последнем уравнении на  $\alpha$ , получим

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}_\gamma} = \sum_{\alpha=1}^s m_{\gamma\alpha} \dot{\xi}_\alpha, \quad \gamma = 1, \dots, s.$$

Аналогично,

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_\gamma} = - \sum_{\alpha=1}^s k_{\gamma\alpha} \xi_\alpha, \quad \gamma = 1, \dots, s.$$

Таким образом, уравнения Лагранжа имеют следующий вид

$$\sum_{\beta=1}^s (m_{\alpha\beta} \ddot{\xi}_\beta + k_{\alpha\beta} \xi_\beta) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (4.5)$$

*Напоминание.* В выводе уравнений (4.5) использовалась симметричность матриц  $m_{\alpha\beta}, k_{\alpha\beta}$ . Поэтому после “считывания” этих матриц по функции Лагранжа следует проверить, действительно ли они получились симметричными. Если нет, то их следует симметризовать, т.е. заменить  $m_{\alpha\beta} \rightarrow (m_{\alpha\beta} + m_{\beta\alpha})/2$ ,  $k_{\alpha\beta} \rightarrow (k_{\alpha\beta} + k_{\beta\alpha})/2$ .

Заметим, что  $\xi_\alpha(t) = 0$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$  являются решением уравнений (4.5). Это означает, что если в начальный момент времени система находилась в состоянии  $q = q^{(0)}$ ,  $\dot{q} = 0$ , то она будет оставаться в этом состоянии неограниченно долго. Другими словами, положение системы, определяемое набором  $q^{(0)}$ , является *положением равновесия*. Если при  $q = q^{(0)}$  функция  $U(q)$  имеет локальный минимум, то при малом отклонении состояния системы от  $q = q^{(0)}$ ,  $\dot{q} = 0$  она будет стремиться вернуться обратно. Другими словами, при достаточно

малом значении разности  $E - U(q^{(0)})$  движение в окрестности  $q^{(0)}$  будет финитным. Такое положение равновесия называют *устойчивым*.

Наряду с системой (4.5) рассмотрим аналогичную систему уравнений для *комплексных* функций  $\eta_\alpha(t)$  :

$$\sum_{\beta=1}^s (m_{\alpha\beta}\ddot{\eta}_\beta + k_{\alpha\beta}\eta_\beta) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (4.6)$$

Системы уравнений (4.5) и (4.6) эквивалентны. Действительно, любое решение (4.5) является также решением (4.6). С другой стороны, поскольку коэффициенты  $m_{\alpha\beta}$ ,  $k_{\alpha\beta}$  по определению вещественны, то, беря вещественную либо мнимую части уравнений (4.6), найдем

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \sum_{\beta=1}^s (m_{\alpha\beta}\ddot{\eta}_\beta + k_{\alpha\beta}\eta_\beta) &= \sum_{\beta=1}^s \left( m_{\alpha\beta} \frac{d^2}{dt^2} \operatorname{Re} \eta_\beta + k_{\alpha\beta} \operatorname{Re} \eta_\beta \right) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s, \\ \operatorname{Im} \sum_{\beta=1}^s (m_{\alpha\beta}\ddot{\eta}_\beta + k_{\alpha\beta}\eta_\beta) &= \sum_{\beta=1}^s \left( m_{\alpha\beta} \frac{d^2}{dt^2} \operatorname{Im} \eta_\beta + k_{\alpha\beta} \operatorname{Im} \eta_\beta \right) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \end{aligned}$$

Таким образом, вещественные величины  $\operatorname{Re} \eta$  и  $\operatorname{Im} \eta$  являются решениями системы (4.5). Отсюда следует, что любое решение  $\xi(t)$  системы (4.5) можно записать как

$$\xi_\alpha(t) = \operatorname{Re} \eta_\alpha(t), \quad \alpha = 1, \dots, s,$$

где  $\eta(t)$  – решение системы (4.6).

Будем искать частное решение системы уравнений (4.6) в виде

$$\eta_\alpha(t) = A_\alpha e^{i\omega t}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (4.7)$$

с постоянными *комплексными амплитудами*  $A_\alpha$  и частотой  $\omega$ . Соответствующий набор  $\xi_\alpha(t)$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$  описывает *нормальное колебание* системы с частотой  $\omega$ . Подставляя выражения (4.7) в (4.5), приходим к системе алгебраических уравнений

$$\sum_{\beta=1}^s (-m_{\alpha\beta}\omega^2 + k_{\alpha\beta}) A_\beta = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (4.8)$$

Условием совместности этой системы линейных однородных уравнений является обращение в нуль определителя, составленного из коэффициентов при  $A_\beta$  :

$$\det(-m_{\alpha\beta}\omega^2 + k_{\alpha\beta}) = 0. \quad (4.9)$$

Уравнение (4.9) называется *характеристическим уравнением*. Оно является алгебраическим уравнением порядка  $s$  относительно  $\omega^2$ , и по основной теореме алгебры имеет  $s$  корней  $\omega_k^2$ ,  $k = 1, \dots, s$ .  $\omega_k$  называют *собственными частотами* системы. Некоторые из корней  $\omega_k^2$  могут оказаться кратными. В этом случае соответствующие частоты называют *вырожденными*. Подставляя решения характеристического уравнения поочередно в систему (4.8), найдем  $s$  линейно-независимых векторов  $A_\alpha^{(k)}$ ,  $k = 1, \dots, s$ . Общее решение уравнений (4.5) является суммой всех частных решений:

$$\xi_\alpha(t) = \operatorname{Re} \left\{ \sum_{k=1}^s A_\alpha^{(k)} e^{i\omega_k t} \right\}, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (4.10)$$

*А. Невырожденный случай*

Как известно из курса линейной алгебры, в случае когда все корни характеристического уравнения различны, система (4.8) имеет для каждого  $\omega_k$  ровно одно линейно-независимое решение  $A_\alpha^{(k)}$ . Для того чтобы записать закон движения в явно вещественном виде, определим вещественные величины  $C_\alpha^{(k)}$  и  $\phi_\alpha^{(k)}$  согласно

$$A_\alpha^{(k)} = C_\alpha^{(k)} \exp\{i\phi_\alpha^{(k)}\}, \quad \phi_\alpha^{(k)} \in [0, \pi). \quad (4.11)$$

Эта запись аналогична представлению комплексного числа через его модуль и фазу, за исключением того, что в данном случае величина  $C_\alpha^{(k)}$  может быть как положительной, так и отрицательной, в соответствии с тем, что фаза  $\phi_\alpha^{(k)}$  может принимать значения только из полуоткрытого отрезка  $[0, \pi)$ . В силу единственности решения все фазы  $\phi_\alpha^{(k)}$  с данным  $k$  равны:

$$\phi_\alpha^{(k)} = \phi^{(k)}, \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

Действительно, если бы это было не так, система (4.8) имела бы для данного  $k$  два независимых решения  $\operatorname{Re} A_\alpha^{(k)} = C_\alpha^{(k)} \cos \phi_\alpha^{(k)}$  и  $\operatorname{Im} A_\alpha^{(k)} = C_\alpha^{(k)} \sin \phi_\alpha^{(k)}$ . Подставляя выражение (4.11) в уравнение (4.10), переписываем общее решение уравнений движения в виде

$$\xi_\alpha(t) = \sum_{k=1}^s C_\alpha^{(k)} \cos(\omega_k t + \phi^{(k)}), \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (4.12)$$

Заметим, что в невырожденном случае коэффициенты  $C_\alpha^{(k)}$  могут быть выражены через элементы матрицы  $(-m_{\alpha\beta}\omega_k^2 + k_{\alpha\beta})$  явно:

$$C_\alpha^{(k)} = C^{(k)} M_{\alpha_k \alpha}^{(k)}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (4.13)$$

где  $C^{(k)}$  – произвольная комплексная постоянная, а  $M_{\alpha_k \alpha}^{(k)}$  – миноры элементов  $\alpha_k$ -ой строки матрицы  $(-m_{\alpha\beta}\omega_k^2 + k_{\alpha\beta})$ . Номер строки  $\alpha_k$  может быть любым, лишь бы эта строка содержала хотя бы один элемент с отличным от нуля минором (такой элемент существует в силу предположения о невырожденности собственных частот). Таким образом, общее решение уравнений движения имеет следующий вид

$$\xi_\alpha(t) = \sum_{k=1}^s C^{(k)} M_{\alpha_k \alpha}^{(k)} \cos(\omega_k t + \phi^{(k)}), \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (4.14)$$

Это решение содержит  $2s$  произвольных постоянных  $C^{(k)}, \phi^{(k)}, k = 1, \dots, s$ , определяемых из начальных условий.

*В. Вырожденный случай*

В случае наличия кратных частот решения уравнений (4.8), соответствующие невырожденным частотам, по-прежнему имеют вид (4.13), тогда как для вырожденных частот число линейно-независимых уравнений в системе (4.8) равно  $s - r$ , где  $r > 1$  – кратность данного корня характеристического уравнения, и потому все миноры  $s - 1$ -го порядка

$M_{\alpha\beta} = 0$ , так что решение не может быть записано в виде (4.13). Совпадение некоторых частот означает наличие произвола в выборе линейно-независимых решений системы (4.8). Действительно, если для каких-либо двух решений  $A_\alpha^{(1)}$ ,  $A_\alpha^{(2)}$  системы (4.8)  $\omega_1^2 = \omega_2^2$ , то и любая их линейная комбинация  $c_1 A_\alpha^{(1)} + c_2 A_\alpha^{(2)}$  является решением системы (4.8) с той же частотой. Конкретный выбор линейно-независимых решений в вырожденном случае определяется соображениями удобства, в остальном же алгоритм решения задачи тот же, что и в невырожденном случае. В частности, общее решение уравнений движения имеет вид (4.12), где вещественные амплитуды  $C_\alpha^{(k)}$  удовлетворяют системе уравнений

$$\sum_{\beta=1}^s (-m_{\alpha\beta}\omega_k^2 + k_{\alpha\beta}) C_\beta^{(k)} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (4.15)$$

Для уяснения природы вырождения укажем, что его появление связано с наличием той или иной непрерывной симметрии в системе. Рассмотрим, например, двумерный осциллятор, описываемый функцией Лагранжа

$$L = \frac{m_1 \dot{\xi}_1^2}{2} + \frac{m_2 \dot{\xi}_2^2}{2} - \frac{k_1 \xi_1^2}{2} - \frac{k_2 \xi_2^2}{2}. \quad (4.16)$$

Эта система вырождена, если  $\omega_1^2 = k_1/m_1 = k_2/m_2 = \omega_2^2$ . При выполнении этого условия преобразование независимых переменных

$$\xi_1 = \left( \xi'_1 \cos \gamma + \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} \xi'_2 \sin \gamma \right), \quad \xi_2 = \left( -\sqrt{\frac{m_1}{m_2}} \xi'_1 \sin \gamma + \xi'_2 \cos \gamma \right), \quad (4.17)$$

где  $\gamma$  произвольно, не меняет вида функции Лагранжа:

$$L = \frac{m_1 \dot{\xi}'_1{}^2}{2} + \frac{m_2 \dot{\xi}'_2{}^2}{2} - \frac{k_1 \xi'^2_1}{2} - \frac{k_2 \xi'^2_2}{2}. \quad (4.18)$$

Поэтому если пара функций  $\xi'_1(t)$ ,  $\xi'_2(t)$  является решением уравнений движения, то решением является и их комбинация (4.17). Система (4.15) имеет в рассматриваемом случае вид

$$\begin{aligned} (-m_1 \omega_k^2 + k_1) C_1^{(k)} &= 0, \\ (-m_2 \omega_k^2 + k_2) C_2^{(k)} &= 0. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Преобразование симметрии (4.17) определяет преобразование амплитуд  $C_\alpha^{(k)}$ :

$$C_1 = \left( C'_1 \cos \gamma + \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} C'_2 \sin \gamma \right), \quad C_2 = \left( -\sqrt{\frac{m_1}{m_2}} C'_1 \sin \gamma + C'_2 \cos \gamma \right). \quad (4.20)$$

Это преобразование переводит линейно-независимые решения системы уравнений (4.19) друг в друга. Например, решение

$$\begin{pmatrix} C_1^{(1)} \\ C_2^{(1)} \end{pmatrix} = C^{(1)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

переходит во второе линейно-независимое решение

$$\begin{pmatrix} C_1^{(2)} \\ C_2^{(2)} \end{pmatrix} = C^{(2)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

при  $\gamma = \pi/2$ .

## §4.2. Колебания молекул

В силу малости массы электрона по сравнению с массой протона скорости электронов в атомах значительно превосходят ядерные скорости. Действительно, как следует из формулы (3.10), в системе центра масс двух частиц ( $\dot{\mathbf{R}} = 0$ ) отношение их скоростей

$$\frac{|\dot{\mathbf{r}}_1|}{|\dot{\mathbf{r}}_2|} = \frac{m_2}{m_1}.$$

Оценивая с помощью этой формулы задачи двух тел порядок отношения скоростей электронов и ядер в сложных атомах, мы видим, что это отношение  $\approx 10^3$ . Этот факт имеет принципиальное значение при изучении движения молекул. Он означает, что при возмущении молекул изменение электронной конфигурации происходит значительно быстрее, чем ядерной. Отсюда следует, что в каждый данный момент времени состояние электронов таково, каким оно было бы если бы ядра покоились. Поэтому, если мы усредним кинетическую и потенциальную энергию всех электронов в молекуле по интервалу времени, большому по сравнению с периодом обращения электрона вокруг ядра, но малому по сравнению с характерным временем движения атомных ядер (периодом колебаний молекулы), то эти величины будут зависеть лишь от взаимного расположения атомных ядер, т.е. от их радиус-векторов  $\mathbf{r}_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , но не от их скоростей, ускорений и т.д.:

$$E_e \equiv \langle T_e \rangle + \langle U_{ee} \rangle + \langle U_{en} \rangle = E_e(\mathbf{r}),$$

где  $T_e$ ,  $U_{ee}$  и  $U_{en}$  обозначают, соответственно, кинетическую энергию электронов, потенциальную энергию их взаимодействия друг с другом и с ядрами, а угловые скобки – усреднение по времени. С другой стороны, полная энергия молекулы есть

$$E = T_n(\dot{\mathbf{r}}) + U_{nn}(\mathbf{r}) + E_e(\mathbf{r}),$$

где  $T_n$  есть суммарная кинетическая энергия ядер, а  $U_{nn}$  – потенциальная энергия их взаимодействия друг с другом. Мы видим, что сумму  $U_{nn}(\mathbf{r}) + E_e(\mathbf{r}) \equiv U(\mathbf{r})$  можно рассматривать как эффективную потенциальную энергию взаимодействия ядер. Она называется *электронным термом* молекулы. Таким образом, в приближении, в котором массой электрона пренебрегается вовсе, функция Лагранжа ядер молекулы имеет вид

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} - U(\mathbf{r}). \quad (4.21)$$

Пусть  $\mathbf{r}_i^0$ ,  $i = 1, \dots, N$  обозначают радиус-векторы ядер в положении равновесия. В этом положении  $U(\mathbf{r})$  имеет наименьшее возможное значение. Это, однако, не означает, что в точке  $\mathbf{r}^0$  функция  $U(\mathbf{r})$  имеет минимум. Дело в том, что любой перенос или поворот молекулы как целого не меняет величины  $U(\mathbf{r})$ . Поэтому для того чтобы исследовать собственно колебательное движение молекулы, необходимо предварительно исключить ее поступательное и вращательное движения.

Рассмотрим сперва поступательное движение молекулы как целого. Интегрируя по времени закон сохранения декартова импульса

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i} = \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{P}_0,$$

находим

$$\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i = \mathbf{P}_0 t + \mathbf{R}_0.$$

Здесь  $\mathbf{P}_0, \mathbf{R}_0$  – некоторые постоянные векторы. Отсюда следует, что радиус-вектор центра масс молекулы

$$\mathbf{R} = \frac{1}{\mu} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i,$$

где

$$\mu = \sum_{i=1}^N m_i$$

есть суммарная масса ядер молекулы, движется равномерно со скоростью  $\mathbf{P}_0/\mu$ . Таким образом, условие отсутствия поступательного движения молекулы требует равенства нулю ее декартова импульса:  $\mathbf{P}_0 = 0$ . Далее, расположим центр масс колеблющейся молекулы в той же точке, в которой он находился до возбуждения колебаний, т.е. когда ядра занимали положения равновесия. Это дает

$$\frac{1}{\mu} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i = \frac{1}{\mu} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i^0,$$

или

$$\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{u}_i = 0, \quad (4.22)$$

где  $\mathbf{u}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_i^0$ ,  $i = 1, \dots, N$ .

Рассмотрим теперь вращательное движение молекулы. В отличие от закона сохранения импульса, закон сохранения момента импульса

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N [\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i] = \sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i, \dot{\mathbf{r}}_i] = \mathbf{M}_0$$

не может быть проинтегрирован в общем случае, т.к. выражение под знаком суммы не является полной производной по времени какой-либо функции координат. Оно является таковой, однако, в случае малых колебаний. В этом случае величины  $\mathbf{u}_i$ , определяющие отклонения ядер от их положений равновесия, остаются все время малыми в отсутствие вращения молекулы как целого. Переписывая закон сохранения момента импульса через  $\mathbf{u}_i$  и пренебрегая величинами второго порядка малости, получим

$$\sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i^0, \dot{\mathbf{u}}_i] = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i^0, \mathbf{u}_i] = \mathbf{M}_0,$$

откуда следует, что

$$\sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i^0, \mathbf{u}_i] = \mathbf{M}_0 t + \mathbf{N}_0, \quad (4.23)$$

где  $\mathbf{N}_0$  есть некоторый постоянный вектор. Поскольку отклонения  $\mathbf{u}_i$  остаются все время малыми, то линейный по времени член в правой части последнего уравнения должен отсутствовать. Таким образом, условие отсутствия вращения молекулы как целого требует обращения в нуль ее момента импульса:  $\mathbf{M}_0 = 0$ . Покажем теперь, что и вектор  $\mathbf{N}_0$  также следует положить равным нулю. Как мы знаем, произвольное малое колебание любой системы, в том числе и молекулы, является суперпозицией нормальных колебаний, каждое из которых соответствует одному члену суммы в решении (4.12). Рассмотрим, например, нормальное колебание с частотой  $\omega_k$ :

$$\xi_\alpha(t) = C_\alpha^{(k)} \cos(\omega_k t + \phi^{(k)}), \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

Видно, что в момент времени

$$t_0^{(k)} = -\frac{\phi^{(k)}}{\omega_k} + \frac{\pi}{2\omega_k}$$

все частицы системы проходят через положение равновесия, т.к.

$$\xi_\alpha(t_0^{(k)}) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

Пусть набор функций  $\mathbf{u}_i^{(k)}(t)$ ,  $i = 1, \dots, N$  описывает  $k$ -е нормальное колебание молекулы. При этом формула (4.23) имеет вид

$$\sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i^0, \mathbf{u}_i^{(k)}] = \mathbf{N}_0^{(k)}, \quad k = 1, \dots, s. \quad (4.24)$$

Поскольку  $\mathbf{u}_i^{(k)}(t_0^{(k)}) = 0$ ,  $i = 1, \dots, N$ , то из этих уравнений следует, что  $\mathbf{N}_0^{(k)} = 0$ ,  $k = 1, \dots, s$ . Складывая уравнения (4.24), получаем

$$\sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i^0, \mathbf{u}_i] = 0, \quad (4.25)$$

где  $\mathbf{u}_i = \sum_{k=1}^s \mathbf{u}_i^{(k)}$ ,  $i = 1, \dots, N$  описывает уже произвольное колебание молекулы. Заметим, что в отличие от функций  $\mathbf{u}_i^{(k)}(t)$  их сумма  $\mathbf{u}_i(t)$  уже не обязана проходить через точку  $\mathbf{u}_i = 0$ , т.е. через положение равновесия.

В соответствии с определениями, данными в главе 1, уравнения (4.22) и (4.25) представляют собой шесть идеальных голономных связей, наложенных на молекулу. Другими словами, число колебательных степеней свободы  $N$ -атомной молекулы равно  $3N - 6$ . Следуя алгоритму, указанному в начале главы 3, мы должны принять какие-либо  $3N - 6$  независимых компонент векторов  $\mathbf{u}_i$  за обобщенные координаты и выразить через них остальные 6 компонент из соотношений (4.22), (4.25). Подставив их в функцию Лагранжа (4.21), разложенную по степеням  $\mathbf{u}$ ,  $\dot{\mathbf{u}}$ , мы получим функцию Лагранжа, описывающую малые колебания молекулы.

**Пример 9.** Колебания трехатомной линейной молекулы. Рассмотрим движение произвольной трехатомной молекулы. Для нахождения нормальных колебаний такой молекулы достаточно рассматривать ее движение в какой-либо одной плоскости. Действительно, если молекула не является линейной, то колебания атомов молекулы должны происходить в

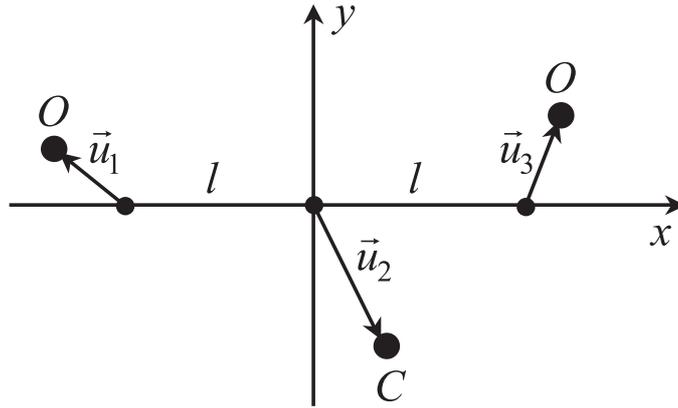


Рис. 7: Колебания молекулы  $CO_2$  в плоскости  $x, y$ . Жирные точки на оси  $x$  обозначают положения равновесия атомов.

плоскости, проходящей через положения равновесия атомов. В противном случае возникло бы вращение молекулы. В этом можно убедиться и простым подсчетом числа степеней свободы следующим образом. Число колебательных степеней свободы нелинейной трехатомной молекулы равно  $3 \times 3 - 6 = 3$ . С другой стороны, при движении в плоскости имеется две поступательные степени свободы и одна вращательная, поэтому число колебательных степеней свободы в этом случае также равно трем [ $2 \times 3 - (2 + 1) = 3$ ]. Таким образом, плоскими колебаниями исчерпываются все колебательные степени свободы рассматриваемой молекулы. Если же молекула линейна, то число ее колебательных степеней свободы равно  $3 \times 3 - 5 = 4$ , т.к. число вращательных степеней свободы в этом случае на единицу меньше по сравнению с нелинейной молекулой (для задания ориентации линейной молекулы требуется лишь два параметра, т.к. поворот молекулы вокруг ее оси не меняет положений атомов). Это соответствует тому, что для линейной молекулы возможно наложение колебаний, происходящих в двух плоскостях, пересекающихся по оси молекулы. При этом частоты таких колебаний должны совпадать в силу симметрии молекулы относительно поворотов вокруг ее оси. Таким образом, собственные частоты колебаний линейной молекулы, при которых атомы отклоняются от оси молекулы, являются двукратно вырожденными. Для нахождения же всех независимых нормальных колебаний линейной молекулы по-прежнему достаточно рассматривать каждое такое колебание как плоское.

Применим изложенную в предыдущем пункте схему к определению малых колебаний линейной молекулы типа молекулы  $CO_2$ . Совместим положение равновесия атома углерода с началом координат, а атомов кислорода – с осью  $x$ . Перенумеруем атомы слева направо и обозначим расстояние между атомами  $C$  и  $O$  в положении равновесия через  $l$  (см. Рис. 7). Тогда

$$\mathbf{r}_1^0 = (-l, 0, 0), \quad \mathbf{r}_2^0 = (0, 0, 0), \quad \mathbf{r}_3^0 = (l, 0, 0),$$

и условия (4.22), (4.25) принимают вид

$$m(\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_3) + M\mathbf{u}_2 = 0, \quad (4.26)$$

$$[\mathbf{r}_1^0, \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_3] = 0, \quad (4.27)$$

где  $m$  и  $M$  обозначают массы атомов кислорода и углерода, соответственно, а также учтено, что  $\mathbf{r}_3^0 = -\mathbf{r}_1^0$ . Пусть колебания происходят в плоскости  $x, y$ . Тогда левая часть условия (4.26) также лежит в этой плоскости, и условие отсутствия поступательного движения молекулы сводится к двум уравнениям

$$m(x_1 + x_3) + Mx_2 = 0, \quad (4.28)$$

$$m(y_1 + y_3) + My_2 = 0. \quad (4.29)$$

С другой стороны, поскольку все три вектора  $\mathbf{r}_1^0, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$  лежат в плоскости  $x, y$ , то левая часть условия (4.27) представляет собой вектор, параллельный оси  $z$ , поэтому условие отсутствия вращения молекулы как целого дает лишь одно уравнение

$$y_1 - y_3 = 0. \quad (4.30)$$

Запишем теперь выражение для потенциальной энергии атомов молекулы  $U(\mathbf{r})$ . Эта энергия меняется как при изменении расстояний между атомами (соответствующие колебания называются *валентными*), так и при изменении углов между различными валентными связями (такие колебания называют *деформационными*). Поэтому в рассматриваемом случае молекулы  $CO_2$   $U(\mathbf{r})$  имеет вид

$$U(\mathbf{r}) = U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, |\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2|, \alpha),$$

где  $\alpha$  есть угол между векторами  $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  и  $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3$ . В окрестности положения равновесия функция  $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, |\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2|, \alpha)$  квадратична по малым приращениям ее аргументов. Поэтому сами эти приращения достаточно найти в первом порядке по малым величинам  $\mathbf{u}_i$ . Имеем

$$\begin{aligned} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| &= |(\mathbf{r}_1^0 - \mathbf{r}_2^0) + (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)| = \sqrt{[(\mathbf{r}_1^0 - \mathbf{r}_2^0) + (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)]^2} \\ &\approx l \sqrt{1 + \frac{2(\mathbf{r}_1^0 - \mathbf{r}_2^0, \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)}{l^2}} \approx l + \frac{(\mathbf{r}_1^0 - \mathbf{r}_2^0, \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)}{l} = l + x_2 - x_1. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Аналогично,

$$|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3| = l + x_3 - x_2.$$

Далее, при малых деформациях молекулы угол  $\alpha$  мал, и поэтому

$$\alpha \approx \frac{y_1 - y_2}{l} + \frac{y_3 - y_2}{l}.$$

Разложение функции  $U$  по малым  $x_i, y_i, \alpha$  содержит, вообще говоря, всевозможные произведения:  $(x_1 - x_2)^2$ ,  $(x_1 - x_2)(x_2 - x_3)$ ,  $(x_1 - x_2)\alpha$  и т.д. Однако для простоты мы рассмотрим случай, когда потенциальные энергии валентных связей  $C - O$  независимы друг от друга, а также от потенциальной энергии деформационных колебаний. Это означает, что в разложении функции  $U(\mathbf{r}) = U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, |\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2|, \alpha)$  отсутствуют перекрестные члены  $(x_1 - x_2)(x_2 - x_3)$  и т.д., т.е.

$$U = U(l, l, 0) + \frac{k}{2}(x_1 - x_2)^2 + \frac{k}{2}(x_3 - x_2)^2 + \frac{\varkappa l^2 \alpha^2}{2},$$

где  $k, \varkappa$  – некоторые положительные константы.

Так как имеется три уравнения связей (4.28) – (4.30), то из шести переменных  $x_1, x_2, x_3, y_1, y_2, y_3$  только три являются независимыми. Выберем в качестве обобщенных координат  $x_1, x_3$  и  $y_1$ . Тогда остальные переменные выражаются через обобщенные координаты из уравнений связи:

$$x_2 = -\frac{m(x_1 + x_3)}{M}, \quad y_3 = y_1, \quad y_2 = -\frac{2my_1}{M}.$$

Подставляя их в функцию Лагранжа

$$L = \frac{m(\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{x}_3^2 + \dot{y}_3^2)}{2} + \frac{M(\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2)}{2} - U,$$

получаем функцию Лагранжа малых колебаний молекулы:

$$\begin{aligned} L = & \frac{m}{2} \left(1 + \frac{m}{M}\right) (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_3^2) + \frac{m^2}{M} \dot{x}_1 \dot{x}_3 + m \left(1 + \frac{2m}{M}\right) \dot{y}_1^2 - 2\kappa \left(1 + \frac{2m}{M}\right)^2 y_1^2 \\ & - \frac{k}{2} \left\{1 + \frac{2m}{M} \left(1 + \frac{m}{M}\right)\right\} (x_1^2 + x_3^2) - \frac{2km}{M} \left(1 + \frac{m}{M}\right) x_1 x_3. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Как видно, функция Лагранжа представляется суммой двух функций, зависящих либо только от  $y_1$  и  $\dot{y}_1$ , либо от  $x_1, x_3, \dot{x}_1, \dot{x}_3$ . Это – следствие предположения о независимости валентных и деформационных колебаний. Поэтому общее решение уравнений движения по этим двум наборам переменных можно искать независимо друг от друга. Рассмотрим сперва уравнение движения по переменной  $y_1$ . Имеем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{y}_1} = 2m \left(1 + \frac{2m}{M}\right) \dot{y}_1, \quad \frac{\partial L}{\partial y_1} = -4\kappa \left(1 + \frac{2m}{M}\right)^2 y_1,$$

поэтому уравнение Лагранжа имеет вид

$$m\ddot{y}_1 + 2\kappa \left(1 + \frac{2m}{M}\right) y_1 = 0.$$

Общее решение этого уравнения есть

$$y_1(t) = C^{(1)} \cos(\omega_1 t + \phi^{(1)}),$$

где  $C^{(1)}$  и  $\phi^{(1)}$  – произвольные амплитуда и фаза, а

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{2\kappa}{m} \left(1 + \frac{2m}{M}\right)}$$

– частота колебания. Таким образом, частное решение уравнений движения, описывающее деформационное колебание молекулы  $CO_2$ , имеет вид

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_3(t) \\ y_1(t) \end{pmatrix} = C^{(1)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cos(\omega_1 t + \phi^{(1)}).$$

Рассмотрим теперь валентные колебания. Матрицы кинетической и потенциальной энергий имеют следующий вид

$$m_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} m\rho & m^2/M \\ m^2/M & m\rho \end{pmatrix}, \quad k_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} k(1 + 2m\rho/M) & 2km\rho/M \\ 2km\rho/M & k(1 + 2m\rho/M) \end{pmatrix},$$

где  $\rho = 1 + m/M$ . Характеристическое уравнение имеет вид

$$\det \begin{pmatrix} -m\rho\omega^2 + k(1 + 2m\rho/M) & -m^2/M\omega^2 + 2km\rho/M \\ -m^2/M\omega^2 + 2km\rho/M & -m\rho\omega^2 + k(1 + 2m\rho/M) \end{pmatrix} = 0,$$

или

$$-m\rho\omega^2 + k(1 + 2m\rho/M) = \pm(-m^2/M\omega^2 + 2km\rho/M).$$

Отсюда находим собственные частоты

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \omega_3 = \sqrt{\frac{k(2m + M)}{mM}}.$$

Эти частоты различны, т.е. система невырождена. Применяя формулу (4.13), находим частные решения, соответствующие частотам  $\omega_{2,3}$

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_3(t) \\ y_1(t) \end{pmatrix} = C^{(2)} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos(\omega_2 t + \phi^{(2)}), \quad \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_3(t) \\ y_1(t) \end{pmatrix} = C^{(3)} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos(\omega_3 t + \phi^{(3)})$$

с произвольными амплитудами  $C^{(2)}, C^{(3)}$  и фазами  $\phi^{(2)}, \phi^{(3)}$ . Таким образом, общее решение уравнений движения, описывающее колебания молекулы  $CO_2$  в плоскости  $x, y$  имеет вид

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_3(t) \\ y_1(t) \end{pmatrix} = C^{(1)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cos(\omega_1 t + \phi^{(1)}) + C^{(2)} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos(\omega_2 t + \phi^{(2)}) + C^{(3)} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos(\omega_3 t + \phi^{(3)}).$$

Как было указано выше, линейная молекула может совершать одновременно колебания в двух плоскостях, пересекающихся по оси, проходящей через положения равновесия атомов. В рассматриваемом случае четвертым независимым нормальным колебанием является деформационное колебание в плоскости  $x, z$ . Соответствующее решение получится, если в вышеприведенных формулах заменить  $y$  на  $z$ .

## §4.3. Движение твердого тела

Если в условиях данной задачи движение системы материальных точек таково, что изменением взаимных расстояний между этими точками можно пренебречь, то такую систему называют *твердым телом*. Исследуем движение твердого тела, следуя общему алгоритму применения лагранжева формализма, указанному в начале главы 3.

**А.** Определим число степеней свободы твердого тела. Зафиксируем какую-либо его точку. Для этого требуется задать три ее пространственные координаты (например, декартовы). После этого зафиксируем какую-либо другую точку тела. Поскольку расстояния между всеми точками тела фиксированы, то для этого потребуется задать две ее координаты (например, два угла, определяющие направление вектора, соединяющего выбранные точки). Наконец, если в твердом теле имеются точки, не принадлежащие прямой, проходящей через первые две точки, то остающийся произвол в их положении соответствует поворотам вокруг указанной прямой, для фиксации которого необходимо задать один параметр, например, угол поворота. Таким образом, в этом случае число степеней свободы твердого тела  $s = 3 + 2 + 1 = 6$ . Если же все точки твердого тела лежат на одной прямой, то число степеней свободы такого тела  $s = 3 + 2 = 5$ .

**В.** Выберем теперь обобщенные координаты твердого тела. Для описания поступательного движения твердого тела удобно ввести радиус-вектор центра инерции тела,  $\mathbf{R}$ . За первые три обобщенные координаты мы примем декартовы компоненты  $\mathbf{R}$  в некоторой инерциальной системе отсчета (которую мы будем называть *неподвижной*). Для описания же его вращательного движения определим три угловых координаты следующим образом. Введем *подвижную* систему отсчета, жестко связанную с твердым телом, а в ней – декартову координатную систему, начало которой поместим в центре инерции тела, а направления координатных осей выберем пока произвольно. Оси подвижной системы будем отличать штрихом,  $(x', y', z')$ . Любую данную ориентацию твердого тела можно получить из некоторой исходной, поворачивая подвижную систему координат относительно неподвижной. При этом удобно считать, что центры обеих систем совпадают. Этого всегда можно добиться с помощью параллельных переносов подвижной системы, поскольку такие переносы не меняют ее ориентации. Пусть исходной является ориентация, когда координатные оси обеих систем совпадают. Тогда повернем подвижную систему 1) вокруг оси  $z$  на угол  $\phi$ , затем 2) вокруг нового направления оси  $x'$  на угол  $\theta$  и, наконец, 3) вокруг нового направления оси  $z'$  на угол  $\psi$  (см. Рис. 8). Все повороты производятся по правилу правого винта. Определенные таким образом углы  $(\phi, \theta, \psi)$  называются *углами Эйлера*.

**С.** Для того чтобы вычислить полную производную по времени от функции  $r_i(\mathbf{R}, \phi, \theta, \psi)$ ,  $i = 1, \dots, N$ , удобно ввести вектор  $\boldsymbol{\rho}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{R}$ , соединяющий центр масс тела с его  $i$ -ой материальной точкой. Поскольку расстояния между точками твердого тела неизменны, то вектор  $\boldsymbol{\rho}_i$  остается постоянным по величине при движении твердого тела, меняя лишь свое направление. Обозначим через  $d\varphi$  бесконечно малый вектор, направленный по оси поворота тела в данный момент времени, и по величине равный углу поворота за промежуток времени  $dt$ . Тогда согласно формуле (2.6) изменение вектора  $\boldsymbol{\rho}_i$  за это время есть

$$d\boldsymbol{\rho}_i = [d\varphi, \boldsymbol{\rho}_i].$$

Подставляя  $\boldsymbol{\rho}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{R}$  в левую часть этого равенства и деля его на  $dt$ , получаем

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \dot{\mathbf{R}} + [\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\rho}_i], \quad (4.33)$$

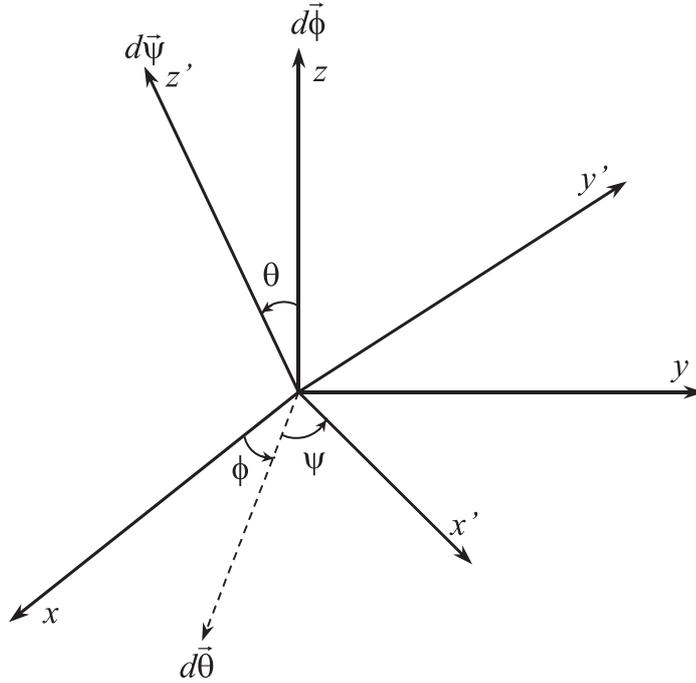


Рис. 8: Определение ориентации твердого тела с помощью углов Эйлера. Пунктирная линия – линия узлов.

где

$$\boldsymbol{\Omega} \equiv \frac{d\boldsymbol{\varphi}}{dt}. \quad (4.34)$$

Вектор  $\boldsymbol{\Omega}$  называется *угловой скоростью* вращения твердого тела. В формуле (4.33) векторы  $\boldsymbol{\rho}_i$  должны быть еще выражены через обобщенные координаты  $\phi, \theta, \psi$ , а вектор  $\boldsymbol{\Omega}$  – через  $\dot{\phi}, \dot{\theta}, \dot{\psi}$ .

Теперь с помощью формулы (4.33) выразим кинетическую энергию твердого тела через  $\dot{\mathbf{R}}, \boldsymbol{\Omega}$ . Имеем

$$\begin{aligned} T &= \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \sum_{i=1}^N m_i (\dot{\mathbf{R}}, [\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\rho}_i]) + \sum_{i=1}^N \frac{m_i [\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\rho}_i]^2}{2} \\ &= \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \left( [\dot{\mathbf{R}}, \boldsymbol{\Omega}], \sum_{i=1}^N m_i \boldsymbol{\rho}_i \right) + \sum_{i=1}^N \frac{m_i [\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\rho}_i]^2}{2}, \end{aligned} \quad (4.35)$$

где  $\mu = \sum_{i=1}^N m_i$  есть полная масса тела. Второй член в этой формуле тождественно равен нулю, поскольку начало подвижной системы выбрано в центре инерции тела, так что

$\sum_{i=1}^N m_i \boldsymbol{\rho}_i = 0$ . Третий же член можно переписать так:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \frac{m_i [\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\rho}_i]^2}{2} &= \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \{ \boldsymbol{\Omega}^2 \boldsymbol{\rho}_i^2 - (\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\rho}_i)^2 \} \equiv \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \{ \Omega_\alpha \Omega_\beta \delta^{\alpha\beta} \boldsymbol{\rho}_i^2 - \Omega_\alpha \rho_i^\alpha \Omega_\beta \rho_i^\beta \} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \Omega_\alpha \Omega_\beta \sum_{i=1}^N m_i \{ \delta^{\alpha\beta} \boldsymbol{\rho}_i^2 - \rho_i^\alpha \rho_i^\beta \}, \end{aligned} \quad (4.36)$$

где греческие индексы нумеруют декартовы компоненты векторов  $\boldsymbol{\Omega}$  и  $\boldsymbol{\rho}_i$ , а  $\delta^{\alpha\beta}$  – единичная матрица. Эти индексы помещены сверху для удобства записи. Поскольку кинетическая энергия выражается через скалярные произведения векторов  $\boldsymbol{\Omega}$  и  $\boldsymbol{\rho}_i$ , то не имеет значения в какой системе вычисляются их проекции на оси координат. Однако в неподвижной системе проекции векторов  $\boldsymbol{\rho}_i$  изменяются со временем из-за вращения тела, тогда как в подвижной системе они фиксированы. Поэтому в этой системе матрица

$$I^{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^N m_i \{ \delta^{\alpha\beta} \boldsymbol{\rho}_i^2 - \rho_i^\alpha \rho_i^\beta \} \quad (4.37)$$

постоянна и, в частности, не зависит от обобщенных координат. Эта матрица называется *тензором моментов инерции* тела и является основной его механической характеристикой. Итак, кинетическая энергия твердого тела принимает вид

$$T = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 I^{\alpha\beta} \Omega_\alpha \Omega_\beta, \quad (4.38)$$

где индексы  $\alpha, \beta$  нумеруют оси подвижной системы координат. По определению, тензор моментов инерции симметричен:  $I^{\alpha\beta} = I^{\beta\alpha}$ . Как и всякая симметричная матрица, поворотом системы координат  $I^{\alpha\beta}$  может быть приведен к диагональному виду, т.е. к виду, в котором  $I^{\alpha\beta} = 0$  при  $\alpha \neq \beta$ . Координатные оси, в которых тензор моментов диагонален, называют *главными осями инерции*, а диагональные элементы  $I^{\alpha\alpha} \equiv I_\alpha$  – *главными моментами инерции* тела. Теперь мы конкретизируем выбор системы координат, жестко связанной с твердым телом, договорившись выбирать оси этой системы вдоль главных осей инерции тела. Тогда выражение (4.38) существенно упрощается:

$$T = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{1}{2} (I_{x'} \Omega_{x'}^2 + I_{y'} \Omega_{y'}^2 + I_{z'} \Omega_{z'}^2). \quad (4.39)$$

Заметим, что из этой формулы нетрудно найти выражение для момента импульса вращающегося тела. Выберем произвольно момент времени  $t_0$  и рассмотрим эволюцию тела на малом отрезке времени  $[t_0, t_0 + dt]$ . По определению вектора  $d\boldsymbol{\varphi}$ , его проекции на оси подвижной системы  $(d\boldsymbol{\varphi})_{x'}$ ,  $(d\boldsymbol{\varphi})_{y'}$ ,  $(d\boldsymbol{\varphi})_{z'}$  определяют углы поворота тела вокруг этих осей за время  $dt$ . Эти проекции однозначно определяют положение тела в любой момент времени от  $t_0$  до  $t_0 + dt$  по его положению в момент времени  $t_0$ . Если временно принять их за обобщенные координаты, то компоненты  $\Omega_{x'}$ ,  $\Omega_{y'}$ ,  $\Omega_{z'}$  будут играть роль соответствующих обобщенных скоростей. Поэтому согласно формуле (2.12) дифференцирование функции Лагранжа по угловой скорости даст момент импульса тела:

$$M_{x'} = \frac{\partial L}{\partial \Omega_{x'}} = \frac{\partial T}{\partial \Omega_{x'}} = I_{x'} \Omega_{x'}, \quad M_{y'} = I_{y'} \Omega_{y'}, \quad M_{z'} = I_{z'} \Omega_{z'}. \quad (4.40)$$

В силу произвольности  $t_0$  эти формулы будут справедливы для всех моментов времени.

Для того чтобы выразить  $T$  через эйлеровы углы, нам остается найти проекции угловой скорости на оси подвижной системы. Для этого снова рассмотрим движение тела на бесконечно малом промежутке времени  $[t_0, t_0 + dt]$ . За это время углы  $\phi, \theta, \psi$  получают приращения  $d\phi, d\theta, d\psi$ , соответственно. Данный поворот тела можно представить как последовательность трех элементарных поворотов, при которых меняется лишь одна угловая координата, а остальные две фиксированы. При этом, выполняя второй или третий поворот, можно пренебречь приращениями углов, которые они получили на предыдущих этапах, в силу малости этих приращений. По этой же причине порядок поворотов не важен. Тогда по определению углов Эйлера вектор  $d\phi$  будет направлен по оси  $z$ , вектор  $d\theta$  – по линии пересечения плоскостей  $(x, y)$  и  $(x', y')$  (называемой *линией узлов*), и вектор  $d\psi$  – по оси  $z'$  (см. Рис. 8). Разлагая эти векторы по осям подвижной системы координат и суммируя три вклада, получим

$$\begin{aligned}(d\varphi)_{x'} &= d\phi \sin \theta \sin \psi + d\theta \cos \psi, \\(d\varphi)_{y'} &= d\phi \sin \theta \cos \psi - d\theta \sin \psi, \\(d\varphi)_{z'} &= d\phi \cos \theta + d\psi.\end{aligned}\tag{4.41}$$

Деля эти уравнения на  $dt$  и учитывая определение (4.34) вектора угловой скорости, находим проекции этого вектора на оси подвижной системы

$$\begin{aligned}\Omega_{x'} &= \dot{\phi} \sin \theta \sin \psi + \dot{\theta} \cos \psi, \\ \Omega_{y'} &= \dot{\phi} \sin \theta \cos \psi - \dot{\theta} \sin \psi, \\ \Omega_{z'} &= \dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi}.\end{aligned}\tag{4.42}$$

Подстановка в выражение (4.39) дает

$$\begin{aligned}T &= \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{1}{2} \left\{ I_{x'} (\dot{\phi} \sin \theta \sin \psi + \dot{\theta} \cos \psi)^2 + I_{y'} (\dot{\phi} \sin \theta \cos \psi - \dot{\theta} \sin \psi)^2 \right. \\ &\quad \left. + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 \right\}.\end{aligned}\tag{4.43}$$

Наконец, функция Лагранжа твердого тела получается отсюда вычитанием потенциальной энергии тела как функции его обобщенных координат:

$$L = T(\theta, \psi, \dot{\phi}, \dot{\theta}, \dot{\psi}, \dot{\mathbf{R}}) - U(\mathbf{R}, \phi, \theta, \psi).$$

После этого следует переходить к пп. **D, E** алгоритма.

Рассмотрим теперь примеры.

**Пример 10.** Тензор моментов инерции жесткого ротатора. Рассмотрим систему, состоящую из двух материальных точек, скрепленных жестким невесомым стержнем. Такую систему называют *жестким ротатором*. Примером ротатора может служить двухатомная молекула, у которой не возбуждены колебания. Обозначим расстояние между атомами через  $l$  и выберем ось  $z'$  по оси ротатора. Затем совместим начало координат с центром инерции ротатора, потребовав  $m_1 z'_1 + m_2 z'_2 = 0$ . Поскольку  $|z'_1 - z'_2| = l$ , то из этих соотношений следует, что  $z'_1 = -m_2 l / (m_1 + m_2)$ ,  $z'_2 = m_1 l / (m_1 + m_2)$  (считая, что  $z'_2 > z'_1$ .)

Поскольку  $x', y'$ -координаты точек равны нулю, то из формулы (4.37) следует, что из всех компонент тензора инерции отличны от нуля лишь  $I_{x'x'}, I_{y'y'}$ , причем

$$I_{x'x'} = I_{y'y'} = \sum_{i=1}^2 m_i \rho_i^2 = m_1 \left( \frac{m_2 l}{m_1 + m_2} \right)^2 + m_2 \left( \frac{m_1 l}{m_1 + m_2} \right)^2 = m l^2,$$

где  $m$  есть приведенная масса ротатора. Поскольку тензор  $I^{\alpha\beta}$  получился диагональным, то найденные значения являются главными моментами инерции ротатора.

**Пример 11.** Тензор моментов инерции однородного шара. Вычислим тензор моментов однородного шара массы  $M$  и радиуса  $R$ . В силу сферической симметрии центр инерции шара находится в его центре, а тензор инерции диагонален, причем  $I_{x'} = I_{y'} = I_{z'} \equiv I$ . Имеем:

$$\begin{aligned} 3I &= I_{x'} + I_{y'} + I_{z'} = \sum_{i=1}^N m_i \{ \delta^{11} \rho_i^2 - x_i'^2 \} + \sum_{i=1}^N m_i \{ \delta^{22} \rho_i^2 - y_i'^2 \} + \sum_{i=1}^N m_i \{ \delta^{33} \rho_i^2 - z_i'^2 \} \\ &= 2 \sum_{i=1}^N m_i \rho_i^2. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Здесь под  $m_i$  следует понимать бесконечно малую массу, заключенную в элементе объема  $dV$  шара:  $m_i = \rho dV$ , где  $\rho = M/V$  есть плотность тела, а под суммой по  $i$  – интеграл по всему его объему. Таким образом,

$$I = \frac{2}{3} \int_V r^2 \rho dV = \frac{2\rho}{3} \int_0^R r^2 4\pi r^2 dr = \frac{8\pi}{15} \rho R^5,$$

или

$$I = \frac{2}{5} M R^2. \quad (4.45)$$

**Пример 12.** Свободное движение симметрического волчка. Твердое тело, у которого какие-либо два главных момента инерции равны, называют *симметрическим волчком*. Таковым будет, например, любое тело, обладающее осью симметрии четвертого (или выше) порядка. Договоримся нумеровать оси так, чтобы  $I_{x'} = I_{y'}$ . В отсутствие внешних сил функция Лагранжа симметрического волчка имеет вид

$$L = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{1}{2} \left\{ I_{x'} (\dot{\phi}^2 \sin^2 \theta + \dot{\theta}^2) + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 \right\}. \quad (4.46)$$

Координаты  $\mathbf{R}$ ,  $\phi$ ,  $\psi$  являются циклическими. Соответствующие им обобщенные импульсы сохраняются:

$$\mathbf{p}_R = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{R}}} = \mu \dot{\mathbf{R}}, \quad (4.47)$$

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = I_{x'} \dot{\phi} \sin^2 \theta + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi}) \cos \theta, \quad (4.48)$$

$$p_\psi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi}). \quad (4.49)$$

Первый из этих интегралов движения выражает сохранение полного декартова импульса твердого тела. Из него следует, как всегда, что центр инерции тела движется с постоянной скоростью  $\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{p}_R/\mu$ . Будем рассматривать движение в системе центра инерции тела, положив  $\dot{\mathbf{R}} = 0$ . Далее, координаты  $\phi$  и  $\psi$  являются, по определению, углами поворота тела вокруг осей  $z$  и  $z'$ . Поэтому соответствующие им обобщенные импульсы  $p_\phi$  и  $p_\psi$  представляют собой проекции полного момента импульса тела на эти оси [см. формулу (2.12)]. Выберем ось  $z$  неподвижной системы координат вдоль сохраняющегося вектора момента импульса  $\mathbf{M}$ . Тогда

$$p_\phi = M, \quad p_\psi = M \cos \theta.$$

Поскольку  $M, p_\psi$  постоянны, то из второго уравнения вытекает, что постоянен и угол  $\theta$ . С другой стороны, из уравнений (4.48), (4.49) следует

$$p_\phi = I_{x'} \dot{\phi} \sin^2 \theta + p_\psi \cos \theta.$$

Комбинируя это уравнение с двумя предыдущими, получаем

$$\dot{\phi} = \frac{M}{I_{x'}},$$

т.е., обобщенная скорость  $\dot{\phi}$  также постоянна. Наконец, из уравнения (4.49) следует постоянство обобщенной скорости  $\dot{\psi}$ :

$$\dot{\psi} = M \cos \theta \left( \frac{1}{I_{z'}} - \frac{1}{I_{x'}} \right).$$

Таким образом, ось  $z'$  равномерно вращается со скоростью  $M/I_{x'}$  вокруг оси  $z$ , образуя с ней постоянный угол (так называемая *регулярная прецессия* оси). При этом сам волчок равномерно вращается вокруг оси  $z'$  с постоянной угловой скоростью [см. уравнение (4.42)]

$$\Omega_{z'} = \dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi} = \frac{M}{I_{z'}} \cos \theta.$$

Заметим, что энергия волчка (в рассматриваемом случае  $E = L$ ) также сохраняется ( $L$  не зависит явно от времени!). Однако закон сохранения энергии не дает ничего нового, так как он является следствием законов сохранения (4.47) – (4.49).

**Пример 13.** Движение тяжелого симметрического волчка. Рассмотрим движение твердого тела в однородном поле. Потенциальная энергия  $i$ -ой материальной точки тела в таком поле есть

$$U_i = -g_i(\mathbf{F}, \mathbf{r}_i),$$

где  $\mathbf{F}$  обозначает напряженность поля, а  $g_i$  – заряд точки. Подставляя  $\mathbf{r}_i = \mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}_i$  и суммируя по всем точкам тела, получаем потенциальную энергию тела

$$U = -G(\mathbf{F}, \mathbf{R}) - (\mathbf{F}, \mathbf{d}),$$

где  $G = \sum_{i=1}^N g_i$  есть полный заряд тела, а  $\mathbf{d} = \sum_{i=1}^N g_i \boldsymbol{\rho}_i$  – его *дипольный момент*. Аналогично тензору моментов, компоненты вектора  $\mathbf{d}$  имеют постоянные значения в подвижной

системе. Поэтому при движении тела  $\mathbf{d}$  меняет лишь свое направление, оставаясь постоянным по величине. В случае электрического поля заряды  $g_i$  – электрические заряды, а вектор  $\mathbf{d}$  есть электрический дипольный момент, в случае же гравитационного поля  $g_i$  – это массы точек тела,  $G \equiv \mu$ , а вектор  $\mathbf{d} \equiv 0$ , поскольку начало подвижной системы координат выбрано в центре инерции тела.

Рассмотрим движение симметрического волчка в поле тяжести (*тяжелый волчок*). Пусть волчок имеет точку опоры, расположенную на оси  $z'$ , которая может скользить без трения в плоскости  $x, y$ . Расстояние от центра инерции волчка до точки опоры обозначим через  $l$ . Ось  $z$  направим вертикально вверх. Тогда функция Лагранжа волчка будет иметь вид

$$L = \frac{\mu (\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2)}{2} + \frac{1}{2} \left\{ I_{x'} (\dot{\phi}^2 \sin^2 \theta + \dot{\theta}^2) + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 \right\} - \mu g Z, \quad (4.50)$$

где  $X, Y, Z$  – проекции вектора  $\mathbf{R}$  на оси неподвижной системы координат, а  $g$  – ускорение силы тяжести. Наличие опоры налагает следующую связь на волчок:

$$Z = l \cos \theta.$$

Эта связь голономна. Она уменьшает на единицу число степеней свободы волчка. Выбрав в качестве обобщенных координат  $X, Y, \phi, \theta, \psi$ , выражаем функцию Лагранжа через обобщенные координаты и скорости

$$L = \frac{\mu (\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + l^2 \dot{\theta}^2 \sin^2 \theta)}{2} + \frac{1}{2} \left\{ I_{x'} (\dot{\phi}^2 \sin^2 \theta + \dot{\theta}^2) + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 \right\} - \mu g l \cos \theta. \quad (4.51)$$

Координаты  $X, Y, \phi, \psi$  – циклические. Соответствующие сохраняющиеся обобщенные импульсы имеют вид

$$p_X = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}} = \mu \dot{X}, \quad (4.52)$$

$$p_Y = \frac{\partial L}{\partial \dot{Y}} = \mu \dot{Y}, \quad (4.53)$$

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = I_{x'} \dot{\phi} \sin^2 \theta + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi}) \cos \theta, \quad (4.54)$$

$$p_\psi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi}). \quad (4.55)$$

Функция Лагранжа (4.51) также не зависит от времени явно, поэтому сохраняется обобщенная энергия

$$E = \frac{\mu (\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + l^2 \dot{\theta}^2 \sin^2 \theta)}{2} + \frac{1}{2} \left\{ I_{x'} (\dot{\phi}^2 \sin^2 \theta + \dot{\theta}^2) + I_{z'} (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 \right\} + \mu g l \cos \theta. \quad (4.56)$$

Смысл законов сохранения (4.52) – (4.55) тот же, что и в случае свободного волчка. В отличие от последнего, однако, при наличии поля тяжести сохраняется не весь вектор  $\mathbf{M}$ , а лишь его проекция на ось  $z$ .

Итак, мы имеем систему из пяти интегралов движения для пяти неизвестных функций  $X(t), Y(t), \phi(t), \theta(t), \psi(t)$ .

Перейдем к интегрированию этой системы. Как и в случае свободного волчка, мы для простоты исключим поступательное движение волчка, перейдя в систему отсчета, в которой  $p_X = p_Y = 0$  (и потому  $X(t) = X(t_0), Y(t) = Y(t_0)$ ). Из уравнения (4.55) следует, что второй член в фигурных скобках в выражении для  $E$  есть постоянная, равная  $p_\psi^2/I_{z'}$ . Далее, из уравнений (4.54), (4.55) имеем

$$p_\phi = I_{x'} \dot{\phi} \sin^2 \theta + p_\psi \cos \theta. \quad (4.57)$$

Выражая отсюда  $\dot{\phi}$  и подставляя в уравнение (4.56), получим

$$E' = \frac{I_{x'} + \mu l^2 \sin^2 \theta}{2} \dot{\theta}^2 + U_{\text{eff}}(\theta),$$

$$U_{\text{eff}}(\theta) = \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta)^2}{2I_{x'} \sin^2 \theta} + \mu g l \cos \theta, \quad E' = E - \frac{p_\psi^2}{2I_{z'}}. \quad (4.58)$$

Разделение переменных в этом уравнении дает

$$dt = \pm \frac{\sqrt{I_{x'} + \mu l^2 \sin^2 \theta} d\theta}{\sqrt{2} \sqrt{E' - U_{\text{eff}}(\theta)}}, \quad (4.59)$$

откуда интегрированием получаем

$$t - t_0 = \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{\sqrt{I_{x'} + \mu l^2 \sin^2 \theta} d\theta}{\pm \sqrt{2} \sqrt{E' - U_{\text{eff}}(\theta)}}, \quad \theta_0 = \theta(t_0). \quad (4.60)$$

Знак  $+$  ( $-$ ) в правой части этой формулы берется на участках траектории, на которых  $\dot{\theta} > 0$  ( $\dot{\theta} < 0$ ). Далее, разделяя переменные  $\phi$  и  $t$  в уравнении (4.57), и используя равенство (4.59), находим

$$d\phi = \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta) dt}{I_{x'} \sin^2 \theta} = \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta) \sqrt{I_{x'} + \mu l^2 \sin^2 \theta} d\theta}{I_{x'} \sin^2 \theta \pm \sqrt{2} \sqrt{E' - U_{\text{eff}}(\theta)}}, \quad (4.61)$$

откуда

$$\phi - \phi_0 = \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta) \sqrt{I_{x'} + \mu l^2 \sin^2 \theta} d\theta}{I_{x'} \sin^2 \theta \pm \sqrt{2} \sqrt{E' - U_{\text{eff}}(\theta)}}, \quad \phi_0 = \phi(t_0). \quad (4.62)$$

Наконец, разделение переменных в уравнении (4.55) с учетом уравнения (4.61) дает

$$\psi - \psi_0 = \frac{p_\psi}{I_{z'}} (t - t_0) - \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{(p_\phi - p_\psi \cos \theta) \cos \theta \sqrt{I_{x'} + \mu l^2 \sin^2 \theta} d\theta}{I_{x'} \sin^2 \theta \pm \sqrt{2} \sqrt{E' - U_{\text{eff}}(\theta)}}, \quad (4.63)$$

$$\psi_0 = \psi(t_0).$$

Формулы (4.60), (4.62) и (4.63) определяют закон движения волчка в квадратурах.

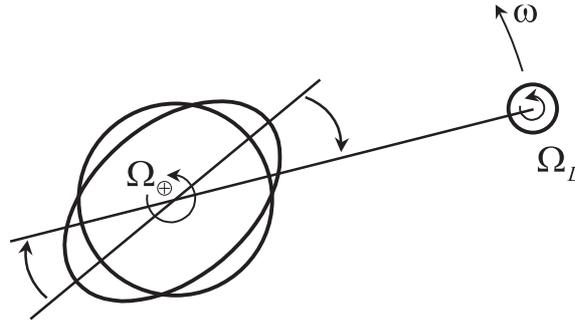


Рис. 9: Возникновение приливного бугра на Земле под влиянием гравитационного поля Луны. Угловая скорость вращения Земли  $\Omega_{\oplus}$  больше угловой орбитальной скорости Луны  $\omega$ , поэтому бугор смещается от линии Земля-Луна в направлении вращения Земли.

**Пример 14.** Влияние приливных сил на движение системы Земля-Луна. Если бы силы тяготения между планетами были строго центральными (зависящими лишь от положения их центров масс), приближение, в котором планеты рассматриваются как материальные точки, было бы точным. Однако в действительности имеются отклонения от центральности, связанные с тем, что распределения масс в планетах не являются строго сферически-симметричными. Одной из причин этой несимметричности являются сами силы тяготения между планетами, приводящие к тому, что взаимодействующие планеты слегка вытягиваются в направлении, соединяющем их центры. Примером такого рода влияния Луны на Землю являются морские приливы. Из-за того, что скорость вращения Земли больше угловой орбитальной скорости Луны, приливный бугор несколько смещается от направления Земля-Луна в направлении вращения Земли, поскольку массам воды для перемещения требуется некоторое время. Получающаяся конфигурация показана схематически на Рис. 9. Сила тяготения Луны, действующая на приливный бугор, стремится вернуть его на линию Земля-Луна. Возникающая своеобразная “сила трения,” называемая *приливной силой*, тормозит вращение Земли. Однако поскольку сила тяготения является потенциальной, это трение не приводит к уменьшению полной механической энергии или полного момента импульса системы. Исходя только лишь из этих законов можно ответить на интересный вопрос о том, как будет двигаться система, когда приливные силы полностью затормозят относительное вращение Земли и Луны, т.е. когда угловые скорости их вращения сравняются. Сделаем это, предполагая для простоты, что орбиты тел являются круговыми, а оси их вращения перпендикулярны плоскости орбиты. Для этого запишем выражение сохраняющегося момента импульса системы. Он складывается из момента импульса орбитального движения тел и момента импульса их вращения. Орбитальный момент импульса находим по формуле (3.16) задачи двух тел:

$$M_{\text{orb}} = mr^2\omega, \quad (4.64)$$

где  $m$  обозначает приведенную массу системы

$$m = \frac{m_{\oplus}m_L}{m_{\oplus} + m_L},$$

а  $\omega$  – угловая скорость вращения вектора  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_L - \mathbf{r}_{\oplus}$ ; нижние индексы  $\oplus, L$  относятся к Земле и Луне, соответственно. По условию задачи моменты импульса вращения Земли и

Луны перпендикулярны плоскости орбиты и, согласно формуле (4.40), по величине равны

$$M_{\oplus} = I_{\oplus}\Omega_{\oplus}, \quad M_L = I_L\Omega_L. \quad (4.65)$$

При вычислении моментов инерции Земли и Луны их можно считать шаровыми волчками, поскольку изменение распределения массы планеты под действием приливных сил относительно малó. Таким образом, полный момент импульса системы равен

$$M = mr^2\omega + I_{\oplus}\Omega_{\oplus} + I_L\Omega_L = \text{const}. \quad (4.66)$$

С другой стороны, поскольку изменение орбит под действием приливных сил происходит очень медленно, движение системы на каждом витке хорошо описывается решением задачи двух тел, полученным в §3.3. Подставляя  $T = 2\pi/\omega$ ,  $a = r$ ,  $|\alpha| = Gm_{\oplus}m_L$  в формулу (3.38), получаем

$$\omega = \sqrt{\frac{G(m_{\oplus} + m_L)}{r^3}},$$

откуда следует, что текущие значения параметров  $\omega, r$  связаны с их конечными значениями  $\omega', r'$  соотношением, аналогичным третьему закону Кеплера

$$\left(\frac{\omega'}{\omega}\right)^2 = \left(\frac{r}{r'}\right)^3. \quad (4.67)$$

Учитывая, что в конечном состоянии

$$\omega' = \Omega'_L = \Omega'_{\oplus},$$

находим из уравнения (4.66)

$$mr^2\omega + I_{\oplus}\Omega_{\oplus} + I_L\Omega_L = \omega' (mr'^2 + I_{\oplus} + I_L).$$

Подставляя сюда  $r'$  из уравнения (4.67), получаем уравнение для конечной угловой скорости

$$mr^2\omega + I_{\oplus}\Omega_{\oplus} + I_L\Omega_L = \omega' \left( mr^2 \left(\frac{\omega}{\omega'}\right)^{4/3} + I_{\oplus} + I_L \right). \quad (4.68)$$

Используя формулу (4.45) и учитывая, что масса Луны примерно в восемьдесят раз меньше массы Земли, а ее радиус – почти в четыре раза меньше земного, пренебрегаем  $I_L$  по сравнению с  $I_{\oplus}$ , полагаем  $m \approx m_L$  и переписываем уравнение (4.68) в виде

$$1 + \frac{2m_{\oplus}}{5m_L} \left(\frac{R_{\oplus}}{r}\right)^2 \left(\frac{\Omega_{\oplus}}{\omega} - x\right) = x^{-1/3}, \quad (4.69)$$

где  $x = \omega'/\omega$ , причем нас интересуют решения  $x < 1$  (т.к. приливные силы замедляют вращение). Текущие значения параметров, входящих в это уравнения, таковы:

$$\frac{m_{\oplus}}{m_L} = 81, \quad \frac{\Omega_{\oplus}}{\omega} = 27, \quad \frac{R_{\oplus}}{r} = 1/60.$$

При этих значениях решением уравнения (4.69) является  $x \approx 0,53$ , т.е. продолжительность земных суток составит 1месяц/0,53  $\approx 27 \cdot 24$  часа/0,53  $\approx 1220$  часов. При этом  $r' = rx^{-2/3} \approx 1,53r$ .

## Глава 5. КАНОНИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ

## §5.1. Уравнения Гамильтона

Основной величиной, определяющей механические свойства систем в формализме Лагранжа, является функция Лагранжа  $L(q, \dot{q}, t)$ . В рамках самой классической механики эта функция не имеет непосредственного физического смысла. Для решения ряда задач классической механики, а также при формулировке перехода к квантовой теории удобно работать с величинами, более тесно связанными с механическими свойствами систем. Оказывается, что уравнения движения механики можно представить в виде, в котором роль основной величины, определяющей механические свойства системы, играет обобщенная энергия системы, а в качестве независимых переменных используются обобщенные координаты и обобщенные импульсы системы. Математически такой переход осуществляется с помощью так называемого *преобразования Лежандра*, которое состоит в следующем. Построим полный дифференциал функции Лагранжа

$$dL(q, \dot{q}, t) = \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial q_{\alpha}} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} d\dot{q}_{\alpha} + \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (5.1)$$

Величина  $\partial L / \partial \dot{q}_{\alpha}$  есть, по определению, обобщенный импульс  $p_{q_{\alpha}}$ , соответствующий обобщенной координате  $q_{\alpha}$ . Для краткости, обозначение  $p_{q_{\alpha}}$  будет сокращаться ниже до  $p_{\alpha}$ . С этим обозначением, а также с помощью уравнений Лагранжа равенство (5.1) можно переписать так:

$$dL(q, \dot{q}, t) = \sum_{\alpha=1}^s \dot{p}_{\alpha} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s p_{\alpha} d\dot{q}_{\alpha} + \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (5.2)$$

Правая часть уравнения (5.2) содержит дифференциалы независимых переменных  $q, \dot{q}$  и  $t$ . Для того чтобы перейти от этого набора к новому набору независимых переменных  $q, p, t$ , напомним тождественно

$$p_{\alpha} d\dot{q}_{\alpha} = d(p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha}) - \dot{q}_{\alpha} dp_{\alpha}, \quad \alpha = 1, \dots, s$$

и представим уравнение (5.2) в виде

$$d \left( \sum_{\alpha=1}^s p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - L(q, \dot{q}, t) \right) = - \sum_{\alpha=1}^s \dot{p}_{\alpha} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s \dot{q}_{\alpha} dp_{\alpha} - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (5.3)$$

Тот факт, что правая часть этого тождества содержит дифференциалы переменных  $q, p, t$  означает, что величина, стоящая в его левой части под знаком полного дифференциала, также может быть выражена как функция этого набора переменных. В соответствии с определением (2.13), эта величина численно совпадает с обобщенной энергией системы. Выраженная через обобщенные координаты и импульсы (и время), она называется *функцией Гамильтона* системы и обозначается через  $H(q, p, t)$ . Таким образом, по определению, при построении функции Гамильтона переменные  $q, p$  рассматриваются как независимые переменные, аналогично тому, как в функции Лагранжа независимыми являются переменные  $q, \dot{q}$ . Для того чтобы получить эту функцию, следует разрешить определение

$p = \partial L / \partial \dot{q}$  относительно  $\dot{q}$  и подставить результат в функцию  $E(q, \dot{q}, t)$ :

$$H(q, p, t) = \left( \sum_{\alpha=1}^s p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - L(q, \dot{q}, t) \right) \Big|_{\dot{q}=\dot{q}(p,q)} .$$

Расписав явно полный дифференциал функции  $H(q, p, t)$  в левой части (5.3), получим

$$\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} dp_{\alpha} + \frac{\partial H}{\partial t} dt = - \sum_{\alpha=1}^s \dot{p}_{\alpha} dq_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s \dot{q}_{\alpha} dp_{\alpha} - \frac{\partial L}{\partial t} dt . \quad (5.4)$$

Приравнивая коэффициенты при дифференциалах независимых переменных в этом тождестве, находим следующие уравнения

$$\dot{p}_{\alpha} = - \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.5)$$

$$\dot{q}_{\alpha} = \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = - \frac{\partial L}{\partial t} . \quad (5.7)$$

Уравнения (5.5), (5.6) представляют собой систему  $2s$  дифференциальных уравнений первого порядка для  $2s$  функций  $q_{\alpha}(t), p_{\alpha}(t), \alpha = 1, \dots, s$ , которые заменяют  $s$  уравнений второго порядка (1.16) лагранжева формализма. Эти уравнения называются *уравнениями Гамильтона* или *каноническими уравнениями*.

#### А. Интегрирование уравнений Гамильтона

Для нахождения закона движения системы необходимо проинтегрировать дифференциальные уравнения (5.5), (5.6). Так же как и в формализме Лагранжа, для этого надо сначала исследовать систему на наличие законов сохранения. Если пространство однородно или изотропно по каким-либо направлениям, следует выписать соответствующие законы сохранения (2.5), (2.8), выразив левые их части через обобщенные координаты и обобщенные импульсы. В таком виде они будут представлять интегралы уравнений Гамильтона. В случае однородности задачи по времени следует записать закон сохранения обобщенной энергии (2.13). Как мы знаем, признаком сохранения обобщенной энергии является равенство нулю частной производной  $\partial L / \partial t$ . Из уравнения (5.7) следует, что при этом и  $\partial H / \partial t = 0$ . Таким образом, если функция Гамильтона системы не зависит явно от времени, то имеет место закон сохранения

$$H(q, p) = \text{const} .$$

Найденные законы сохранения следует дополнить уравнениями из набора (5.5), (5.6) так, чтобы в результате получить  $2s$  независимых уравнений для  $2s$  функций  $q_{\alpha}(t), p_{\alpha}(t), \alpha = 1, \dots, s$  и проинтегрировать полученную систему уравнений.

Пример 15. Функция Гамильтона гармонического осциллятора. Функция Лагранжа гармонического осциллятора

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

где  $m, \omega$  – масса и частота осциллятора. Из выражения для обобщенного импульса осциллятора

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

находим обобщенную скорость

$$\dot{x} = \frac{p}{m}.$$

Подставляя это выражение в обобщенную энергию осциллятора

$$E = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

находим его функцию Гамильтона

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (5.8)$$

Пример 16. Функция Гамильтона заряженной частицы в электромагнитном поле. Из функции Лагранжа (1.22) находим обобщенный декартов импульс частицы в электромагнитном поле

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}} + \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t).$$

Отсюда

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{m} \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right). \quad (5.9)$$

Подставляя это выражение в обобщенную энергию (2.17), получаем функцию Гамильтона

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + q\varphi(\mathbf{r}, t).$$

Пример 17. Гармонический осциллятор с частотой, зависящей от амплитуды. Рассмотрим одномерную систему, функция Гамильтона которой имеет вид

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \lambda \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)^2, \quad (5.10)$$

где  $m, \omega, \lambda$  – постоянные положительные параметры. Найдем закон движения системы. Поскольку функция Гамильтона (5.10) не зависит от времени явно, то имеем закон сохранения

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \lambda \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)^2 = \text{const},$$

откуда следует, что

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = C, \quad (5.11)$$

с некоторой положительной постоянной  $C$ . Это уравнение связывает две неизвестных функции  $x(t), p(t)$ . Дополним его уравнением (5.6):

$$\dot{x} = \frac{\partial H(x, p)}{\partial p} = \frac{p}{m} + 2\lambda \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \frac{p}{m}.$$

Выражая здесь  $p$  через  $x$  с помощью (5.11), получаем дифференциальное уравнение для функции  $x(t)$ :

$$\dot{x} = \pm(1 + 2\lambda C) \sqrt{\frac{2C}{m} - \omega^2 x^2},$$

интегрируя которое путем разделения переменных, находим

$$x(t) = \sqrt{\frac{2C}{m\omega^2}} \sin \{(1 + 2\lambda C)\omega(t - t_0)\}.$$

Этот закон описывает гармоническое колебание с частотой  $\Omega = (1 + 2\lambda C)\omega$  и амплитудой  $A = \sqrt{2C/m\omega^2}$ . Другими словами, частота рассматриваемых колебаний зависит от их амплитуды согласно

$$\Omega = \omega(1 + \lambda m\omega^2 A^2).$$

### В. Скобки Пуассона

Уравнения Гамильтона можно представить в формально симметричном виде, если ввести так называемую *скобку Пуассона*, определенную для двух функций обобщенных координат и обобщенных импульсов  $f(q, p), g(q, p)$  (эти функции также могут зависеть от времени или от каких-либо других параметров):

$$\{f, g\} = \sum_{\alpha=1}^s \left( \frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} - \frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} \right). \quad (5.12)$$

Тогда уравнения (5.5) и (5.6) могут быть переписаны в виде

$$\dot{p}_{\alpha} = \{H, p_{\alpha}\}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.13)$$

$$\dot{q}_{\alpha} = \{H, q_{\alpha}\}, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (5.14)$$

Действительно, учитывая независимость переменных  $q, p$ , имеем, например,

$$\{H, p_{\alpha}\} = \sum_{\beta=1}^s \left( \frac{\partial H}{\partial p_{\beta}} \frac{\partial p_{\alpha}}{\partial q_{\beta}} - \frac{\partial H}{\partial q_{\beta}} \frac{\partial p_{\alpha}}{\partial p_{\beta}} \right) = - \sum_{\beta=1}^s \frac{\partial H}{\partial q_{\beta}} \delta_{\alpha\beta} = - \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}}.$$

Заметим, что с помощью скобок Пуассона можно компактно записать выражение для полной производной по времени от произвольной функции  $f(q, p, t)$ , а именно, используя уравнения Гамильтона, получаем

$$\frac{df}{dt} = \sum_{\alpha=1}^s \left( \frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} + \frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \dot{p}_{\alpha} \right) + \frac{\partial f}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^s \left( \frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} - \frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} \right) + \frac{\partial f}{\partial t},$$

или

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\} + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (5.15)$$

Оказывается, что значение операции, определенной в (5.12), простирается гораздо дальше простых соображений удобства. Скобки Пуассона обладают рядом важных свойств, для вывода которых приведем сначала несколько простых правил их вычисления, непосредственно следующих из определения. Для любых функций  $f, g, h$ , зависящих от обобщенных координат и импульсов, а также, возможно, от некоторого параметра  $\lambda$  (роль которого может играть, например, время  $t$ )

$$\{f, g\} = -\{g, f\}, \quad (5.16)$$

$$\{f + h, g\} = \{f, g\} + \{h, g\}, \quad (5.17)$$

$$\{fh, g\} = h\{f, g\} + f\{h, g\}, \quad (5.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \{f, g\} = \left\{ \frac{\partial f}{\partial \lambda}, g \right\} + \left\{ f, \frac{\partial g}{\partial \lambda} \right\}. \quad (5.19)$$

Докажем, например, свойство (5.18). Имеем

$$\begin{aligned} \{fh, g\} &= \sum_{\alpha=1}^s \left( \frac{\partial(fh)}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} - \frac{\partial(fh)}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} \right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^s \left( h \frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} + f \frac{\partial h}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} - h \frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} - f \frac{\partial h}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} \right) \\ &= h \sum_{\alpha=1}^s \left( \frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} - \frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} \right) + f \sum_{\alpha=1}^s \left( \frac{\partial h}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} - \frac{\partial h}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} \right) \\ &= h\{f, g\} + f\{h, g\}. \end{aligned}$$

Докажем теперь следующее важное и нетривиальное свойство скобок Пуассона: для любых трех функций  $f, g, h$  справедливо *тождество Якоби*

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0. \quad (5.20)$$

Это тождество проверяется прямым вычислением. Левая его часть представляет собой сумму членов, каждый из которых пропорционален второй производной одной из функций  $f, g, h$  по переменным  $q, p$ . В силу симметрии относительно перестановки этих функций, достаточно доказать, что каждая из производных  $\partial^2 f / \partial p_{\alpha} \partial p_{\beta}$ ,  $\partial^2 f / \partial q_{\alpha} \partial q_{\beta}$ ,  $\partial^2 f / \partial q_{\alpha} \partial p_{\beta}$  входит в левую часть (5.20) с нулевым коэффициентом. Проверим это, например, для вторых производных  $\partial^2 f / \partial p_{\alpha} \partial p_{\beta}$ . Отмечая члены, не содержащие производных

$\partial^2 f / \partial p_\alpha \partial p_\beta$ , многоточием, имеем

$$\begin{aligned} \{f, \{g, h\}\} &= 0 + \dots, \\ \{g, \{h, f\}\} &= \left\{ g, -\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial h}{\partial q_\alpha} \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \right\} + \dots = -\sum_{\beta=1}^s \frac{\partial g}{\partial q_\beta} \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left( -\sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial h}{\partial q_\alpha} \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \right) + \dots \\ &= \sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{\partial g}{\partial q_\beta} \frac{\partial h}{\partial q_\alpha} \frac{\partial^2 f}{\partial p_\beta \partial p_\alpha} + \dots, \\ \{h, \{f, g\}\} &= \left\{ h, \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \frac{\partial g}{\partial q_\alpha} \right\} + \dots = -\sum_{\beta=1}^s \frac{\partial h}{\partial q_\beta} \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left( \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \frac{\partial g}{\partial q_\alpha} \right) + \dots \\ &= -\sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{\partial h}{\partial q_\beta} \frac{\partial^2 f}{\partial p_\beta \partial p_\alpha} \frac{\partial g}{\partial q_\alpha} + \dots = -\sum_{\alpha, \beta=1}^s \frac{\partial h}{\partial q_\alpha} \frac{\partial^2 f}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} \frac{\partial g}{\partial q_\beta} + \dots \end{aligned}$$

Складывая эти выражения и учитывая перестановочность вторых производных, мы видим, что члены, содержащие производные  $\partial^2 f / \partial p_\alpha \partial p_\beta$ , действительно сокращаются.

Теперь с помощью тождества Якоби мы докажем следующее интересное утверждение, называемое *теоремой Пуассона*: Если две функции  $f(q, p, t)$  и  $g(q, p, t)$  являются интегралами движения, т.е.  $\dot{f} = \dot{g} = 0$ , то интегралом движения является и их скобка Пуассона  $\{f, g\}$ . *Доказательство*. Поскольку по условию теоремы  $f$  и  $g$  остаются постоянными при движении системы, то из формулы (5.15) следует, что

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\{H, f\}, \quad \frac{\partial g}{\partial t} = -\{H, g\}. \quad (5.21)$$

Вычислим полную производную по времени от  $\{f, g\}$  по формуле (5.15):

$$\frac{d\{f, g\}}{dt} = \{H, \{f, g\}\} + \frac{\partial \{f, g\}}{\partial t}.$$

Применяя правило (5.19) дифференцирования скобки Пуассона по параметру и учитывая уравнения (5.21), получаем

$$\frac{d\{f, g\}}{dt} = \{H, \{f, g\}\} - \{\{H, f\}, g\} - \{f, \{H, g\}\},$$

или, переставляя аргументы скобок Пуассона по правилу (5.16),

$$\frac{d\{f, g\}}{dt} = \{H, \{f, g\}\} + \{g, \{H, f\}\} + \{f, \{g, H\}\}.$$

Правая часть последнего равенства равна нулю в силу тождества Якоби. Теорема доказана.

### С. Вычисление скобок Пуассона

Практически наиболее удобно вычислять скобки Пуассона, последовательно упрощая их с помощью правил (5.16) – (5.18). Если хотя бы один из аргументов данной скобки

Пуассона является полиномом по обобщенным координатам и обобщенным импульсам, то в результате такого упрощения приходят к скобкам Пуассона вида  $\{q_\alpha, f\}$  или  $\{p_\alpha, f\}$ . Из определения (5.12) следует, что

$$\{q_\alpha, f\} = -\frac{\partial f}{\partial p_\alpha}, \quad \{p_\alpha, f\} = \frac{\partial f}{\partial q_\alpha}. \quad (5.22)$$

В частности,

$$\{p_\alpha, q_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \{q_\alpha, q_\beta\} = 0, \quad \{p_\alpha, p_\beta\} = 0. \quad (5.23)$$

Скобки (5.23) называют *фундаментальными скобками Пуассона*.

**Пример 18.** Скобки Пуассона компонент момента импульса. Найдем скобки Пуассона  $x, y$ -компонент момента импульса частицы, предполагая, что обобщенными координатами являются декартовы компоненты ее радиус-вектора. Имеем

$$\begin{aligned} \{M_x, M_y\} &= \{(yp_z - zp_y), (zp_x - xp_z)\} \\ &= \{yp_z, zp_x\} - \{zp_y, zp_x\} - \{yp_z, xp_z\} + \{zp_y, xp_z\} \\ &= y\{p_z, z\}p_x + p_y\{z, p_z\}x. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Для краткости, в последней строке здесь выписаны лишь члены, содержащие ненулевые фундаментальные скобки Пуассона. Подставляя сюда  $\{p_z, z\} = -\{z, p_z\} = 1$ , находим

$$\{M_x, M_y\} = yp_x - p_yx = -M_z.$$

Аналогично можно получить формулы

$$\{M_y, M_z\} = -M_x, \quad \{M_z, M_x\} = -M_y.$$

Из этих формул и теоремы Пуассона следует, что если проекции момента импульса на какие-либо две декартовы оси (инерциальной) системы отсчета сохраняются, то сохраняется также и его проекция на третью ось.

**Пример 19.** Скобки Пуассона компонент скорости частицы в электромагнитном поле. Рассмотрим, далее, заряженную частицу в электромагнитном поле и вычислим скобки Пуассона компонент вектора ее скорости  $\mathbf{v}$ , например,  $\{v_x, v_y\}$ . Для этого необходимо сначала выразить компоненты вектора  $\mathbf{v}$  через обобщенные координаты и обобщенные импульсы частицы с помощью формулы (5.9). Выписывая опять лишь нетривиальные скобки Пуассона, получаем

$$\begin{aligned} \{v_x, v_y\} &= \left\{ \frac{1}{m} \left( p_x - \frac{q}{c} A_x(\mathbf{r}, t) \right), \frac{1}{m} \left( p_y - \frac{q}{c} A_y(\mathbf{r}, t) \right) \right\} \\ &= -\frac{q}{m^2 c} [\{A_x(\mathbf{r}, t), p_y\} + \{p_x, A_y(\mathbf{r}, t)\}] \\ &= \frac{q}{m^2 c} \left[ \frac{\partial A_x(\mathbf{r}, t)}{\partial y} - \frac{\partial A_y(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \right], \end{aligned} \quad (5.25)$$

или, используя обозначение (1.25),

$$\{v_x, v_y\} = -\frac{q}{m^2 c} H_z.$$

### §5.2. Принцип наименьшего действия

Аналогично тому, как уравнения Лагранжа могут быть получены из принципа минимальности действия (2.19), так и уравнения Гамильтона могут быть получены из условия минимальности следующего функционала действия

$$S[q(t), p(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left( \sum_{\alpha=1}^s p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - H(q, p, t) \right) dt, \quad (5.26)$$

в котором по-прежнему предполагаются фиксированными значения обобщенных координат в начальный и конечный моменты времени:

$$q_{\alpha}(t_1) = q_{\alpha}^{(1)}, \quad q_{\alpha}(t_2) = q_{\alpha}^{(2)}, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (5.27)$$

причем при отыскании минимума действия  $S[q(t), p(t)]$  функции  $p(t)$  варьируются независимо от функций  $q(t)$ , что и отражено добавлением  $p(t)$  вторым аргументом в обозначение функционала действия.

Вывод уравнений Гамильтона из принципа наименьшего действия вполне аналогичен выводу уравнений Лагранжа, подробно разобранному в §2.3. Пусть функционал  $S[q(t), p(t)]$  принимает наименьшее значение на функциях  $\bar{q}(t)$ ,  $\bar{p}(t)$ , где  $\bar{q}(t)$  удовлетворяют условиям (5.27). Рассмотрим виртуальную траекторию, описываемую функциями  $\bar{q}(t) + \delta q(t)$ ,  $\bar{p}(t)$ , где малые функции  $\delta q(t)$  удовлетворяют условиям

$$\delta q_{\alpha}(t_1) = \delta q_{\alpha}(t_2) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (5.28)$$

При этом действие получает приращение

$$\delta S = S[\bar{q}(t) + \delta q(t), \bar{p}(t)] - S[\bar{q}(t), \bar{p}(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left( \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_{\alpha} \delta(\dot{q}_{\alpha}) - \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_{\alpha}} \Big|_{q=\bar{q}} \delta q_{\alpha} \right) dt.$$

Используя равенство (2.1) и интегрируя по частям, находим

$$\delta S = \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_{\alpha} \delta q_{\alpha} \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \left( \dot{\bar{p}}_{\alpha} + \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_{\alpha}} \Big|_{q=\bar{q}} \right) \delta q_{\alpha} dt. \quad (5.29)$$

Поскольку правая часть этого уравнения линейна по вариации  $\delta q(t)$ , необходимым условием минимума действия является  $\delta S = 0$ . Первый член в правой части (5.29) равен нулю в силу условий (5.28), интегральный же член может быть равен нулю, только если равны нулю множители при всех независимых произвольных вариациях  $\delta q_{\alpha}$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$ :

$$\dot{\bar{p}}_{\alpha} + \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_{\alpha}} \Big|_{q=\bar{q}} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s.$$

Таким образом, функции  $\bar{q}(t)$ ,  $\bar{p}(t)$  должны удовлетворять  $s$  уравнениям Гамильтона (5.5).

Рассмотрим теперь вариацию действия при переходе от траектории  $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$  к близкой виртуальной траектории  $\bar{q}(t), \bar{p}(t) + \delta p(t)$ , где  $\delta p(t)$  – произвольные малые функции времени:

$$\delta S = S[\bar{q}(t), \bar{p}(t) + \delta p(t)] - S[\bar{q}(t), \bar{p}(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \left( \dot{\bar{q}}_{\alpha} - \left. \frac{\partial H(\bar{q}, p, t)}{\partial p_{\alpha}} \right|_{p=\bar{p}} \right) \delta p_{\alpha} dt. \quad (5.30)$$

Снова необходимым условием минимальности действия является обращение правой части равенства (5.30) в нуль, откуда ввиду независимости и произвольности вариаций  $\delta p_{\alpha}$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$  следует, что функции  $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$  должны удовлетворять уравнениям

$$\dot{\bar{q}}_{\alpha} - \left. \frac{\partial H(\bar{q}, p, t)}{\partial p_{\alpha}} \right|_{p=\bar{p}} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, s,$$

т.е. оставшимся  $s$  уравнениям Гамильтона (5.6).

### §5.3. Канонические преобразования

Как было установлено в §1.3, уравнения Лагранжа ковариантны относительно преобразований обобщенных координат, т.е. имеют один и тот же вид при любом их выборе. Отсюда следует, что и уравнения Гамильтона также ковариантны, поскольку по построению они имеют один и тот же вид (5.5), (5.6) независимо от конкретного выбора обобщенных координат. С другой стороны, как мы видели в предыдущем пункте, в гамильтоновой формулировке принципа наименьшего действия функции  $p(t)$ , заменяющие обобщенные скорости  $\dot{q}(t)$  лагранжева формализма, являются независимыми от функций  $q(t)$ . Этот факт позволяет расширить понятие преобразования переменных в гамильтоновом формализме, включив в него наряду с преобразованиями обобщенных координат также и преобразования обобщенных импульсов системы. Итак, в общем случае такое преобразование имеет вид

$$Q_{\alpha} = Q_{\alpha}(q, p, t), \quad P_{\alpha} = P_{\alpha}(q, p, t), \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.31)$$

где  $q, p$  и  $Q, P$  – наборы старых и новых обобщенных координат и обобщенных импульсов, соответственно. Поскольку преобразования (5.31) шире, чем обычные преобразования координат, с которыми мы имели дело в лагранжевом формализме, по отношению к ним уравнения движения уже не обязаны быть ковариантными. Если тем не менее данное преобразование (5.31) не меняет вида уравнений движения, то оно называется *каноническим*. Таким образом, каноничность преобразования означает, что в новых переменных  $Q, P$  уравнения движения имеют вид

$$\dot{P}_{\alpha} = - \frac{\partial H'}{\partial Q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.32)$$

$$\dot{Q}_{\alpha} = \frac{\partial H'}{\partial P_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.33)$$

с некоторой новой функцией Гамильтона  $H' = H'(Q, P, t)$ .

Гамильтонова формулировка принципа наименьшего действия, изложенная в предыдущем пункте, дает возможность очень просто выделить один важный и широкий подкласс

канонических преобразований. Как мы видели, уравнения Гамильтона (5.32), (5.33) могут быть получены из условия минимальности действия

$$S'[Q(t), P(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left( \sum_{\alpha=1}^s P_{\alpha} \dot{Q}_{\alpha} - H'(Q, P, t) \right) dt, \quad (5.34)$$

при условии

$$Q_{\alpha}(t_1) = Q_{\alpha}^{(1)}, \quad Q_{\alpha}(t_2) = Q_{\alpha}^{(2)}, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (5.35)$$

Допустим, что нам удалось задать некоторое соотношение между двумя функционалами  $S[q(t), p(t)]$  и  $S'[Q(t), P(t)]$ , такое, что если  $S[q(t), p(t)]$  принимает минимальное значение на функциях  $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$ , то  $S'[Q(t), P(t)]$  принимает минимальное значение на функциях  $\bar{Q}(t), \bar{P}(t)$ , связанных с  $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$  соотношениями вида (5.31), и наоборот. Поскольку уравнения Гамильтона получаются именно из условия минимальности действия, то это означало бы, что при преобразовании (5.31) уравнения (5.5), (5.6) переходят в уравнения (5.32), (5.33), т.е. как раз каноничность преобразования (5.31).

Свяжем теперь функционалы  $S[q(t), p(t)]$  и  $S'[Q(t), P(t)]$  следующим соотношением

$$S[q(t), p(t)] = S'[Q(t), P(t)] + \int_{t_1}^{t_2} \frac{dF(q, Q, t)}{dt} dt, \quad (5.36)$$

с некоторой функцией  $F(q, Q, t)$  старых и новых обобщенных координат. Это соотношение задает желаемое соответствие между минимумами функционалов  $S[q(t), p(t)]$  и  $S'[Q(t), P(t)]$ . Действительно, второй член в его правой части можно переписать так:

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{dF(q, Q, t)}{dt} dt = F(q, Q, t)|_{t_1}^{t_2} = F(q^{(2)}, Q^{(2)}, t_2) - F(q^{(1)}, Q^{(1)}, t_1). \quad (5.37)$$

В силу условий (5.27), (5.35) правая часть последнего равенства представляет собой некоторую фиксированную постоянную, значение которой не зависит от выбора виртуальной траектории на промежутке  $t \in [t_1, t_2]$ , и поэтому из минимальности действия  $S$  следует минимальность  $S'$ , и наоборот.

Равенство (5.36) будет выполняться для всех моментов времени  $t_1, t_2$ , только если подынтегральные выражения в обеих его частях тождественно совпадают:

$$\sum_{\alpha=1}^s p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - H(q, p, t) = \sum_{\alpha=1}^s P_{\alpha} \dot{Q}_{\alpha} - H'(Q, P, t) + \frac{dF(q, Q, t)}{dt}.$$

Последнее равенство может быть также переписано в виде соотношения для дифференциалов

$$\sum_{\alpha=1}^s p_{\alpha} dq_{\alpha} - H(q, p, t) dt = \sum_{\alpha=1}^s P_{\alpha} dQ_{\alpha} - H'(Q, P, t) dt + dF(q, Q, t). \quad (5.38)$$

Подставляя сюда выражение для дифференциала функции  $F(q, Q, t)$

$$dF(q, Q, t) = \sum_{\alpha=1}^s \left( \frac{\partial F}{\partial q_{\alpha}} dq_{\alpha} + \frac{\partial F}{\partial Q_{\alpha}} dQ_{\alpha} \right) + \frac{\partial F}{\partial t} dt,$$

и приравнявая коэффициенты при независимых дифференциалах  $dq_{\alpha}$ ,  $dQ_{\alpha}$  и  $dt$ , получим формулы перехода от набора переменных  $q, p$  к  $Q, P$  в виде

$$p_{\alpha} = \frac{\partial F}{\partial q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.39)$$

$$P_{\alpha} = -\frac{\partial F}{\partial Q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.40)$$

$$H' = H + \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (5.41)$$

Таким образом, канонические преобразования рассматриваемого типа определяются заданием некоторой функции старых и новых обобщенных координат системы и времени, в связи с чем эту функцию называют *производящей функцией* канонического преобразования.

То же самое преобразование можно также задать с помощью производящей функции, зависящей от старых координат и новых импульсов (и времени). Для этого совершим в тождестве (5.38) преобразование Лежандра от независимых переменных  $q, Q, t$  к независимым переменным  $q, P, t$ , написав тождественно в его правой части

$$P_{\alpha} dQ_{\alpha} = d(P_{\alpha} Q_{\alpha}) - Q_{\alpha} dP_{\alpha}.$$

Получим

$$\sum_{\alpha=1}^s (p_{\alpha} dq_{\alpha} + Q_{\alpha} dP_{\alpha}) + (H' - H) dt = d \left( F(q, Q, t) + \sum_{\alpha=1}^s P_{\alpha} Q_{\alpha} \right). \quad (5.42)$$

Обозначим величину, стоящую под знаком полного дифференциала в правой части этого тождества через  $\Phi$  и выразим ее через переменные  $q, P, t$  с помощью уравнений (5.39), (5.40):

$$\Phi(q, P, t) = \left[ F(q, Q, t) + \sum_{\alpha=1}^s P_{\alpha} Q_{\alpha} \right]_{Q=Q(q, P, t)}.$$

Подставляя выражение для дифференциала этой функции

$$d\Phi(q, P, t) = \sum_{\alpha=1}^s \left( \frac{\partial \Phi}{\partial q_{\alpha}} dq_{\alpha} + \frac{\partial \Phi}{\partial P_{\alpha}} dP_{\alpha} \right) + \frac{\partial \Phi}{\partial t} dt$$

в уравнение (5.42) и приравнявая коэффициенты при независимых дифференциалах  $dq_{\alpha}$ ,  $dP_{\alpha}$ ,  $dt$ , получим формулы канонического преобразования в виде

$$p_{\alpha} = \frac{\partial \Phi}{\partial q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.43)$$

$$Q_{\alpha} = \frac{\partial \Phi}{\partial P_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.44)$$

$$H' = H + \frac{\partial \Phi}{\partial t}. \quad (5.45)$$

Аналогичным образом можно было бы задать переход  $q, p \rightarrow Q, P$  помощью производящей функции, зависящей от переменных  $p, Q$  или  $p, P$ .

**Пример 20.** Точечные преобразования. Рассмотрим каноническое преобразование, задаваемое производящей функцией

$$\Phi(q, P, t) = \sum_{\alpha=1}^s f_{\alpha}(q) P_{\alpha}, \quad (5.46)$$

где  $f_{\alpha}(q)$  – некоторые функции. По формулам (5.43) – (5.45) находим

$$p_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^s \frac{\partial f_{\beta}(q)}{\partial q_{\alpha}} P_{\beta}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.47)$$

$$Q_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^s f_{\beta}(q) \frac{\partial P_{\beta}}{\partial P_{\alpha}} = \sum_{\beta=1}^s f_{\beta}(q) \delta_{\alpha\beta} = f_{\alpha}(q), \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.48)$$

$$H' = H. \quad (5.49)$$

Уравнение (5.48) показывает, что канонические преобразования, порождаемые функциями вида (5.46) являются не чем иным, как обычными заменами обобщенных координат  $q \rightarrow f(q)$ , с которыми мы имели дело в лагранжевом формализме (их обычно называют *точечными*).

**Пример 21.** Гармонический осциллятор. Совершим каноническое преобразование переменных линейного гармонического осциллятора [см. пример 15], задаваемое производящей функцией

$$F(x, Q, t) = \frac{m\omega x^2}{2} \operatorname{ctg} Q.$$

По формулам (5.39) – (5.41) находим

$$p = \frac{\partial F}{\partial x} = m\omega x \operatorname{ctg} Q, \quad P = -\frac{\partial F}{\partial Q} = \frac{m\omega x^2}{2} \frac{1}{\sin^2 Q}, \quad H' = H.$$

Отсюда

$$x = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}} \sin Q, \quad p = \sqrt{2Pm\omega} \cos Q. \quad (5.50)$$

Подставляя эти выражения в старую функцию Гамильтона (5.8), получаем новую функцию Гамильтона в виде

$$H' = \omega P.$$

Уравнения Гамильтона в новых переменных

$$\dot{P} = -\frac{\partial H'}{\partial Q} = 0, \quad \dot{Q} = \frac{\partial H'}{\partial P} = \omega.$$

Их решением является

$$P = P_0, \quad Q = \omega t + Q_0,$$

где  $P_0, Q_0$  – некоторые постоянные. Подставляя его в (5.50), получаем закон движения в исходных координатах

$$x(t) = \sqrt{\frac{2P_0}{m\omega}} \sin(\omega t + Q_0).$$

**§5.4. Бесконечно-малые канонические преобразования**

Любое преобразование переменных, в том числе и каноническое, можно представить как последовательность большого числа преобразований, каждое из которых близко к тождественному. Для таких преобразований многие формулы и доказательства существенно упрощаются, поскольку их можно проводить в дифференциальной форме. Например, если некоторое свойство системы остается неизменным при любых преобразованиях, близких к тождественному, то оно не изменится и при конечном преобразовании.

Рассмотрим каноническое преобразование, задаваемое производящей функцией

$$\Phi(q, P, t) = \sum_{\alpha=1}^s q_{\alpha} P_{\alpha} + \phi(q, P, t).$$

Согласно формулам (5.43) – (5.45)

$$p_{\alpha} = P_{\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial q_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.51)$$

$$Q_{\alpha} = q_{\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial P_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.52)$$

$$H' = H + \frac{\partial \phi}{\partial t}.$$

Видно, что если функция  $\phi(q, P, t)$  является малой, то старые и новые переменные мало отличаются друг от друга. В этом случае формулы перехода можно переписать в компактном виде с помощью скобок Пуассона. Для этого заметим, что поскольку  $\phi(q, P, t)$  мала, то пренебрегая величинами порядка  $O(\phi^2)$  ее аргумент  $P$  можно заменить на  $p$ . Например, производные  $\partial \phi(q, P, t)/\partial P$  можно заменить на  $\partial \phi(q, p, t)/\partial p$ . Тогда используя формулы (5.22), перепишем формулы перехода от старых переменных к новым в виде

$$P_{\alpha} = p_{\alpha} + \{\phi, p_{\alpha}\}_{q,p}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.53)$$

$$Q_{\alpha} = q_{\alpha} + \{\phi, q_{\alpha}\}_{q,p}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.54)$$

где нижний индекс у скобок Пуассона указывает переменные, относительно которых они определены. Заметим, что преобразование произвольной функции  $F(Q, P)$  также можно представить в аналогичном виде, а именно, имеем

$$F(Q, P) = F\left(q + \frac{\partial \phi}{\partial p}, p - \frac{\partial \phi}{\partial q}\right) = F(q, p) + \sum_{\alpha=1}^s \left( \frac{\partial F}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial \phi}{\partial p_{\alpha}} - \frac{\partial F}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial \phi}{\partial q_{\alpha}} \right),$$

т.е.

$$F(Q, P) = F(q, p) + \{\phi, F\}_{q,p}. \quad (5.55)$$

*А. Теорема об инвариантности скобок Пуассона*

Рассмотрим две произвольные функции обобщенных координат и обобщенных импульсов  $F, G$ . Оказывается, что если преобразование от переменных  $q, p$  к  $Q, P$  является каноническим, то значение величины  $\{F, G\}$  не зависит от того, вычисляется ли она по старым переменным или по новым, т.е.

$$\{F, G\}_{q,p} = \{F, G\}_{Q,P}.$$

*Доказательство.* Будем рассматривать  $F$  и  $G$  как функции новых переменных и рассмотрим скобки Пуассона  $\{F(Q, P), G(Q, P)\}_{q,p}$ . Используя формулу (5.55) и пренебрегая величинами порядка  $O(\phi^2)$ , эти скобки можно преобразовать так:

$$\begin{aligned} \{F(Q, P), G(Q, P)\}_{q,p} &= \{F(q, p) + \{\phi, F\}_{q,p}, G(q, p) + \{\phi, G\}_{q,p}\}_{q,p} \\ &= \{F(q, p), G(q, p)\}_{q,p} + \{F, \{\phi, G\}_{q,p}\}_{q,p} + \{\{\phi, F\}_{q,p}, G\}_{q,p} \\ &= \{F(q, p), G(q, p)\}_{q,p} + \{F, \{\phi, G\}_{q,p}\}_{q,p} + \{G, \{F, \phi\}_{q,p}\}_{q,p}. \end{aligned}$$

Согласно тождеству Якоби, сумма второго и третьего членов в последнем выражении равна  $-\{\phi, \{G, F\}\}_{q,p}$ . Таким образом,

$$\{F(Q, P), G(Q, P)\}_{q,p} = \{F(q, p), G(q, p)\}_{q,p} + \{\phi, \{F, G\}\}_{q,p}.$$

В силу формулы (5.55) правая часть этого равенства есть в точности  $\{F(Q, P), G(Q, P)\}_{Q,P}$ , что и доказывает инвариантность скобок Пуассона.

### В. Теорема об инвариантности фазового объема

Рассмотрим систему, имеющую  $s$  степеней свободы и введем  $2s$ -мерное пространство, снабженное декартовой системой координат, по осям которой откладываются значения обобщенных координат и обобщенных импульсов системы. Это пространство называют *фазовым пространством* системы. Каждая его точка определяет некоторое состояние системы. Действительно, согласно определению, данному в главе 1, состояние системы в некоторый момент времени определяется значениями ее обобщенных координат и обобщенных скоростей в этот момент, обобщенные же скорости взаимнооднозначно связаны с обобщенными импульсами соотношениями  $p_\alpha = \partial L / \partial \dot{q}_\alpha$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$ .

Рассмотрим некоторую область  $g$  фазового пространства и определим ее *объем*  $\gamma$ :

$$\gamma = \int_g d\gamma, \quad d\gamma = \prod_{\alpha=1}^s dq_\alpha dp_\alpha. \quad (5.56)$$

Рассмотрим, далее, произвольное каноническое преобразование от переменных  $q, p$  к новым переменным  $Q, P$ . Область в фазовом пространстве, образованном новыми переменными, на которую отображается область  $g$ , обозначим через  $G$ . Определим объем  $\Gamma$  этой области формулой, аналогичной (5.56):

$$\Gamma = \int_G d\Gamma, \quad d\Gamma = \prod_{\alpha=1}^s dQ_\alpha dP_\alpha.$$

Оказывается, что имеет место равенство

$$\gamma = \Gamma. \quad (5.57)$$

*Доказательство* достаточно провести для бесконечно-малого канонического преобразования. Согласно известной формуле замены переменных интегрирования в кратном интеграле,

$$\int_G d\Gamma = \int_g J d\gamma,$$

где  $J$  есть якобиан преобразования от переменных  $q, p$  к переменным  $Q, P$ . Он представляет собой определитель матрицы, составленной из частных производных новых координат по старым:

$$J = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial Q_1}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial Q_1}{\partial q_s} & \frac{\partial Q_1}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial Q_1}{\partial p_s} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial Q_s}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial Q_s}{\partial q_s} & \frac{\partial Q_s}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial Q_s}{\partial p_s} \\ \frac{\partial P_1}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial P_1}{\partial q_s} & \frac{\partial P_1}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial P_1}{\partial p_s} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial P_s}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial P_s}{\partial q_s} & \frac{\partial P_s}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial P_s}{\partial p_s} \end{pmatrix}$$

Для бесконечно-малого преобразования (5.53), (5.54) эта матрица отличается от единичной на члены порядка  $O(\phi)$ . Если элементы некоторой матрицы  $A$  имеют вид  $A_{ik} = \delta_{ik} + a_{ik}$ ,  $i, k = 1, \dots, n$ , где все величины  $a_{ik}$  малы, то, пренебрегая величинами порядка  $O(a^2)$ , имеем для ее определителя:

$$\det(\delta_{ik} + a_{ik}) = 1 + \sum_{i=1}^n a_{ii}.$$

Применяя эту формулу к матрице якобиана преобразования (5.53), (5.54), находим

$$J = 1 + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial\{\phi, q_\alpha\}}{\partial q_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial\{\phi, p_\alpha\}}{\partial p_\alpha} = 1 + \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial^2 \phi}{\partial q_\alpha \partial p_\alpha} - \sum_{\alpha=1}^s \frac{\partial^2 \phi}{\partial p_\alpha \partial q_\alpha} = 1,$$

что и доказывает равенство (5.57).

### §5.5. Действие как функция координат и времени

В рамках классической механики величина действия системы, вычисленного на действительной траектории системы, сама по себе не имеет прямого физического смысла. Однако исследование зависимости этой величины от начального и конечного положений системы позволяет сформулировать принципиально новый подход к интегрированию уравнений движения – так называемый метод Гамильтона-Якоби.

Полагая  $q(t) = \bar{q}(t)$ ,  $p(t) = \bar{p}(t)$  в функционале  $S[q(t), p(t)]$ , мы получим некоторую функцию параметров  $q^{(1)}, t_1, q^{(2)}, t_2$ , которые определяют действительную траекторию. Обозначим эту функцию через  $S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2)$ . Структуру этой функции можно определить, исследуя ее изменение при малом изменении какого-либо из параметров  $q^{(1)}, t_1, q^{(2)}, t_2$  при фиксированных остальных.

#### А. Зависимость действия от координат

Рассмотрим две близкие действительные траектории системы, одна из которых определяется условиями (2.18), а другая – условиями

$$q_\alpha(t_1) = q_\alpha^{(1)}, \quad q_\alpha(t_2) = q_\alpha^{(2)} + \delta q_\alpha^{(2)}, \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (5.58)$$

Функции, описывающие эти траектории, обозначим соответственно через  $[\bar{q}(t), \bar{p}(t)]$  и  $[\bar{q}(t) + \delta\bar{q}(t), \bar{p}(t) + \delta\bar{p}(t)]$ . Другими словами, в обоих случаях система выходит из точки с координатами  $q^{(1)}$  в момент времени  $t_1$ , но в момент времени  $t_2$  приходит в точки, разность координат которых равна  $\delta q^{(2)}$ . Разность значений функционала действия (5.26) для этих двух траекторий есть

$$\begin{aligned} & S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)} + \delta q^{(2)}, t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \left( \bar{p}_\alpha \delta \dot{\bar{q}}_\alpha + \dot{\bar{q}}_\alpha \delta \bar{p}_\alpha - \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_\alpha} \Big|_{q=\bar{q}} \delta \bar{q}_\alpha - \frac{\partial H(\bar{q}, p, t)}{\partial p_\alpha} \Big|_{p=\bar{p}} \delta \bar{p}_\alpha \right) dt \\ &= \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha \delta \bar{q}_\alpha \Big|_{t_1}^{t_2} + \sum_{\alpha=1}^s \int_{t_1}^{t_2} \left( - \left[ \dot{\bar{p}}_\alpha + \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_\alpha} \Big|_{q=\bar{q}} \right] \delta \bar{q}_\alpha + \left[ \dot{\bar{q}}_\alpha - \frac{\partial H(\bar{q}, p, t)}{\partial p_\alpha} \Big|_{p=\bar{p}} \right] \delta \bar{p}_\alpha \right) dt. \end{aligned}$$

Интегральный член в последнем выражении тождественно равен нулю, поскольку траектория  $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$  – действительная, т.е. удовлетворяет уравнениям Гамильтона (5.5), (5.6). Поэтому с учетом условий (5.58) находим

$$S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)} + \delta q^{(2)}, t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha(t_2) \delta q_\alpha^{(2)}. \quad (5.59)$$

С другой стороны, согласно определению частной производной

$$S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)} + \delta q^{(2)}, t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \frac{\partial S}{\partial q^{(2)}} \delta q^{(2)}.$$

Подставляя это в уравнение (5.59) и сравнивая коэффициенты при независимых вариациях  $\delta q_\alpha^{(2)}$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$ , получаем

$$\frac{\partial S}{\partial q_\alpha^{(2)}} = \bar{p}_\alpha(t_2), \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (5.60)$$

Аналогичным образом можно вывести соотношение

$$\frac{\partial S}{\partial q_\alpha^{(1)}} = -\bar{p}_\alpha(t_1), \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (5.61)$$

### *В. Зависимость действия от времени*

Рассмотрим теперь две близкие траектории, одна из которых по-прежнему определяется условиями (2.18), а другая – условиями

$$q_\alpha(t_1) = q_\alpha^{(1)}, \quad q_\alpha(t_2 + \delta t_2) = q_\alpha^{(2)}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.62)$$

снова обозначая функции, описывающие эти траектории, через  $[\bar{q}(t), \bar{p}(t)]$  и  $[\bar{q}(t) + \delta\bar{q}(t), \bar{p}(t) + \delta\bar{p}(t)]$ , соответственно. Другими словами, в обоих случаях система выходит

из точки с координатами  $q^{(1)}$  в момент времени  $t_1$ , но в точку с координатами  $q^{(2)}$  приходит с разницей во времени, равной  $\delta t_2$ . Соответствующая разность в величине действия есть

$$\begin{aligned} & S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2 + \delta t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) \\ &= \int_{t_1}^{t_2 + \delta t_2} \left( \sum_{\alpha=1}^s (\bar{p}_\alpha + \delta \bar{p}_\alpha) (\dot{\bar{q}}_\alpha + \delta \dot{\bar{q}}_\alpha) - H(\bar{q} + \delta \bar{q}, \bar{p} + \delta \bar{p}, t) \right) dt - \int_{t_1}^{t_2} \left( \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha \dot{\bar{q}}_\alpha - H(\bar{q}, \bar{p}, t) \right) dt. \end{aligned}$$

Разлагая первый интеграл по  $\delta t_2$  с помощью формулы Ньютона-Лейбница, находим

$$\begin{aligned} & S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2 + \delta t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \left( \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha \dot{\bar{q}}_\alpha - \bar{H} \right)_{t=t_2} \delta t_2 \\ & + \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^s \left( \bar{p}_\alpha \delta \dot{\bar{q}}_\alpha + \dot{\bar{q}}_\alpha \delta \bar{p}_\alpha - \frac{\partial H(q, \bar{p}, t)}{\partial q_\alpha} \Big|_{q=\bar{q}} \delta \bar{q}_\alpha - \frac{\partial H(\bar{q}, p, t)}{\partial p_\alpha} \Big|_{p=\bar{p}} \delta \bar{p}_\alpha \right) dt, \end{aligned}$$

где  $\bar{H} \equiv H(\bar{q}, \bar{p}, t)$  есть значение функции Гамильтона на действительной траектории. Преобразуя интегральный член как и выше с помощью интегрирования по частям и учитывая, что  $\bar{q}(t), \bar{p}(t)$  удовлетворяют уравнения Гамильтона, получаем

$$S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2 + \delta t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \left( \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha \dot{\bar{q}}_\alpha - \bar{H} \right)_{t=t_2} \delta t_2 + \left[ \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha \delta \bar{q}_\alpha \right]_{t_1}^{t_2}.$$

Для определения величины  $\delta \bar{q}(t_2)$  запишем условие (5.62) для функции  $\bar{q}(t) + \delta \bar{q}(t)$ :

$$(\bar{q}_\alpha + \delta \bar{q}_\alpha)(t_2 + \delta t_2) = q_\alpha^{(2)},$$

откуда, разлагая левую часть равенства по малому  $\delta t_2$ , найдем

$$\bar{q}_\alpha(t_2) + \dot{\bar{q}}_\alpha(t_2) \delta t_2 + \delta \bar{q}_\alpha(t_2) = q_\alpha^{(2)}.$$

Учитывая, что в силу условий (2.18) для функции  $\bar{q}(t)$

$$\bar{q}_\alpha(t_2) = q_\alpha^{(2)},$$

получаем

$$\delta \bar{q}_\alpha(t_2) = -\dot{\bar{q}}_\alpha(t_2) \delta t_2.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} & S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2 + \delta t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) \\ &= \left( \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha(t_2) \dot{\bar{q}}_\alpha(t_2) - \bar{H}(t_2) \right) \delta t_2 - \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha(t_2) \dot{\bar{q}}_\alpha(t_2) \delta t_2 = -\bar{H}(t_2) \delta t_2, \end{aligned} \quad (5.63)$$

С другой стороны, согласно определению частной производной

$$S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2 + \delta t_2) - S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \frac{\partial S}{\partial t_2} \delta t_2.$$

Подставляя это в уравнение (5.63) и сокращая на  $\delta t_2$ , получаем

$$\frac{\partial S}{\partial t_2} = -\bar{H}(t_2). \quad (5.64)$$

Аналогично выводится соотношение

$$\frac{\partial S}{\partial t_1} = \bar{H}(t_1). \quad (5.65)$$

### С. Теорема Лиувилля

Рассмотрим некоторую область  $g$  в фазовом пространстве данной системы. Как мы знаем, каждая точка этой области определяет некоторое состояние системы. Будем считать, что все эти состояния заданы в момент времени  $t_1$  и рассмотрим их эволюцию за фиксированный промежуток времени  $t_2 - t_1 = t$ . По его истечении каждое состояние  $(q^{(1)}, p^{(1)}) \in g$  перейдет в некоторое конечное состояние  $(q^{(2)}, p^{(2)})$ , так что область  $g$  отображится на некоторую новую область  $G$  фазового пространства системы (см. Рис. 10). Выясним, как соотносятся фазовые объемы этих областей. Для этого заметим, что соотношения (5.60), (5.61), (5.64), (5.65) эквивалентны следующему выражению для полного дифференциала действия как функции координат и времени:

$$dS(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2) = \sum_{\alpha=1}^s [\bar{p}_\alpha(t_2) dq_\alpha^{(2)} - \bar{p}_\alpha(t_1) dq_\alpha^{(1)}] - \bar{H}(t_2) dt_2 + \bar{H}(t_1) dt_1. \quad (5.66)$$

Учитывая, что при фиксированном  $t$

$$dt_2 = dt_1,$$

перепишем уравнение (5.66) в виде

$$\sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha(t_1) dq_\alpha^{(1)} - \bar{H}(t_1) dt_1 = \sum_{\alpha=1}^s \bar{p}_\alpha(t_2) dq_\alpha^{(2)} - \bar{H}(t_2) dt_1 - dS(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_1 + t). \quad (5.67)$$

Поскольку конечное состояние системы однозначно определяется начальным, соответствие между точками областей  $g, G$  можно рассматривать как преобразование координат  $(q^{(1)}, p^{(1)}) \rightarrow (q^{(2)}, p^{(2)})$ . Сравнение уравнений (5.38) и (5.67) показывает тогда, что это преобразование является каноническим с производящей функцией

$$F(q^{(1)}, q^{(2)}, t_1) = -S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_1 + t),$$

причем  $q^{(1)}, p^{(1)}$  играют роль старых обобщенных координат и обобщенных импульсов, а  $q^{(2)}, p^{(2)}$  – новых. С другой стороны, выше было доказано, что фазовый объем инвариантен относительно канонических преобразований. Таким образом, мы приходим к выводу, что объемы областей  $g$  и  $G$  равны, т.е. фазовый объем сохраняется при движении системы. Этот результат, называемый *теоремой Лиувилля*, играет важнейшую роль в статистической физике.

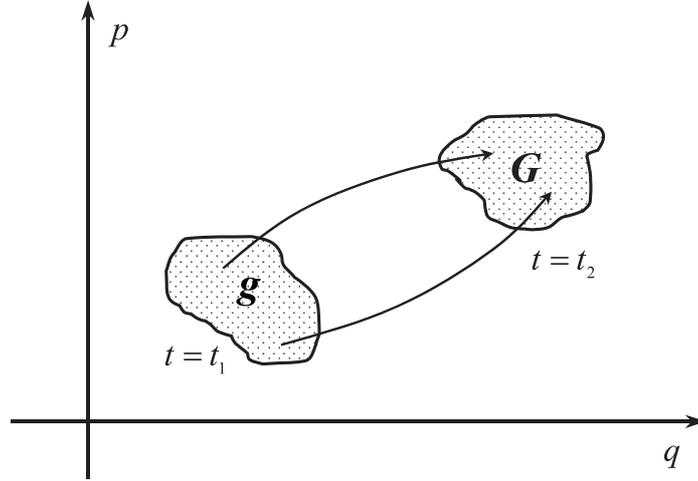


Рис. 10: Эволюция области в фазовом пространстве в случае одномерной системы.

#### D. Уравнение Гамильтона-Якоби

Соотношения (5.60), (5.64) позволяют записать замкнутое уравнение для функции  $S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2)$ . Для этого зафиксируем момент времени  $t_1$  и начальные координаты  $q^{(1)}$  и будем рассматривать зависимость действия лишь от параметров  $t_2, q^{(2)}$ , обозначая их для краткости просто  $t, q$ . Соответственно, обозначение  $S(q^{(1)}, t_1; q^{(2)}, t_2)$  сократим до  $S(q, t)$ . Поскольку в дальнейшем все величины вычисляются на действительной траектории, черта над  $q, p, H$  будет опускаться. Выражая аргументы  $p$  функции Гамильтона в правой части (5.64) через производные от действия с помощью (5.60), приходим к *уравнению Гамильтона-Якоби*

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) = 0. \quad (5.68)$$

Уравнение (5.68) является нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных первого порядка для действия  $S(q, t)$ , являющегося функцией от  $s+1$  независимых переменных:  $s$  координат  $q_\alpha$  и времени  $t$ . Оказывается, что уравнение Гамильтона-Якоби вполне эквивалентно уравнениям Гамильтона (или Лагранжа), в том смысле что решениями этого уравнения определяется также и закон движения системы. Однако для этого подходит далеко не всякое решение. Например, для свободной частицы уравнение (5.68) имеет такое малоинтересное решение:  $S(q, t) = A$  с произвольной постоянной  $A$ . Выделим нужный нам класс решений следующим определением: *полным интегралом* уравнения Гамильтона-Якоби для системы с  $s$  степенями свободы называется его решение, содержащее ровно  $s+1$  независимых произвольных постоянных интегрирования. Одной из этих постоянных будет аддитивная постоянная, поскольку  $S$  входит в уравнение (5.68) только через свои производные, так что если некоторое  $S(q, t)$  является его решением, то решением является и  $S'(q, t) = S(q, t) + A$ . Полный интеграл будем обозначать через  $S(q, C, t) + A$ , где  $C = \{C_\alpha\}$ ,  $\alpha = 1, \dots, s$  есть набор  $s$  независимых произвольных постоянных.

Покажем теперь каким образом можно найти закон движения системы, если известен полный интеграл уравнения Гамильтона-Якоби. Для этого совершим каноническое преобразование переменных  $q, p \rightarrow Q, P$ , выбрав в качестве производящей функции  $\Phi(q, P, t) =$

$S(q, P, t)$ . Другими словами, функциональная зависимость действия от  $C_\alpha, \alpha = 1, \dots, s$  рассматривается как зависимость от новых обобщенных импульсов  $P_\alpha, \alpha = 1, \dots, s$ . Такое рассмотрение допустимо, т.к. постоянные  $C_\alpha$  по условию независимы и произвольны. Тогда согласно формулам перехода (5.43) – (5.45) получим

$$p_\alpha = \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.69)$$

$$Q_\alpha = \frac{\partial S}{\partial P_\alpha}, \quad \alpha = 1, \dots, s, \quad (5.70)$$

$$H' = H + \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (5.71)$$

Но поскольку  $S$  удовлетворяет уравнению (5.68), то новая функция Гамильтона  $H' \equiv 0$ . Поэтому уравнения Гамильтона в новых переменных  $Q, P$  имеют следующий простой вид

$$\dot{P}_\alpha = -\frac{\partial H'}{\partial Q_\alpha} = 0, \quad (5.72)$$

$$\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial H'}{\partial P_\alpha} = 0. \quad (5.73)$$

Из уравнения (5.72) следует постоянство новых импульсов  $P_\alpha, \alpha = 1, \dots, s$  (эти постоянные мы будем по-прежнему обозначать через  $C_\alpha$ ), а из уравнения (5.73) – постоянство новых координат  $Q_\alpha, \alpha = 1, \dots, s$ . Учитывая это обстоятельство, вернемся снова к уравнениям (5.69) – (5.70). Первое из этих уравнений воспроизводит соотношение (5.60), определяющее обобщенные импульсы в данной точке траектории по действию системы. Второе же связывает обобщенные координаты системы и время, т.е. определяет закон движения системы.

Итак, формулируем общий алгоритм решения основной задачи механики методом Гамильтона-Якоби.

- a. По функции Лагранжа системы построить ее функцию Гамильтона [см. §5.1].
- b. С помощью найденной функции Гамильтона записать уравнение Гамильтона-Якоби (5.68).
- c. Найти решение этого уравнения  $S(q, C, t) + A$ , содержащее независимые произвольные постоянные  $C$  (помимо аддитивной постоянной  $A$ ) в числе, равном числу степеней свободы системы.
- d. Продифференцировать найденную функцию  $S(q, C, t)$  по произвольным постоянным  $C$ , приравнявая результаты дифференцирования новым произвольным постоянным  $Q$ :

$$\frac{\partial S(q, C, t)}{\partial C_\alpha} = Q_\alpha \quad \alpha = 1, \dots, s. \quad (5.74)$$

*Е. Разделение переменных в уравнении Гамильтона-Якоби*

Полный интеграл уравнения Гамильтона-Якоби может быть найден в квадратурах в случае так называемых систем с *разделяющимися переменными*. Перепишем уравнение (5.68) схематически в виде

$$F\left(q_1, \dots, q_s, t, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_s}, \frac{\partial S}{\partial t}\right) = 0. \quad (5.75)$$

Предположим, что какая-либо из независимых переменных, скажем  $q_1$ , входит в это уравнение вместе с соответствующей производной  $\partial S/\partial q_1$  в некоторой комбинации, не содержащей явно других переменных (неявно в  $S$  входят все переменные). Это означает, что уравнение (5.75) имеет специальный вид

$$F\left(f\left(q_1, \frac{\partial S}{\partial q_1}\right), q_2, \dots, q_s, t, \frac{\partial S}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_s}, \frac{\partial S}{\partial t}\right) = 0. \quad (5.76)$$

В этом случае говорят, что переменная  $q_1$  *отделяется*. Тогда решение уравнения Гамильтона-Якоби можно искать в виде

$$S(q, t) = S_1(q_1) + S'(q_2, \dots, q_s, t). \quad (5.77)$$

Подставляя это выражение в уравнение (5.76), получаем

$$F\left(f\left(q_1, \frac{dS_1}{dq_1}\right), q_2, \dots, q_s, t, \frac{\partial S'}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial S'}{\partial q_s}, \frac{\partial S'}{\partial t}\right) = 0. \quad (5.78)$$

В результате в уравнении Гамильтона-Якоби выделилась комбинация  $f(q_1, dS_1/dq_1)$ , которая ни явно, ни неявно не содержит переменные  $q_2, \dots, q_s, t$ . Поскольку же все переменные  $q_1, \dots, q_s, t$  в уравнении Гамильтона-Якоби являются независимыми, то равенство (5.78) может выполняться только в том случае, когда эта комбинация тождественно равна некоторой постоянной:

$$f\left(q_1, \frac{dS_1}{dq_1}\right) = C_1. \quad (5.79)$$

Уравнение (5.79) является уже обыкновенным дифференциальным уравнением первого порядка, которое может быть решено в квадратурах. Уравнение же (5.78) принимает вид

$$F\left(C_1, q_2, \dots, q_s, t, \frac{\partial S'}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial S'}{\partial q_s}, \frac{\partial S'}{\partial t}\right) = 0. \quad (5.80)$$

Это уравнение имеет тот же вид, что и исходное уравнение (5.75), но содержит на одну независимую переменную меньше. Может оказаться, что в уравнении (5.80) некоторая из переменных  $q_2, \dots, q_s, t$  снова отделяется. Тогда к ней следует применить описанную выше процедуру. Если таким образом удастся отделить все переменные, то в результате мы получаем решение уравнения Гамильтона-Якоби в виде

$$S = A + S_0(t) + \sum_{\alpha=1}^s S_\alpha(q_\alpha, C), \quad (5.81)$$

содержащее  $s + 1$  независимых произвольных постоянных  $A, C_\alpha, \alpha = 1, \dots, s$ , т.е. полный интеграл.

**Пример 22.** Движение в поле электрического диполя. Рассмотрим заряженную материальную точку, движущуюся в поле системы зарядов на расстояниях, больших по сравнению с характерными размерами системы. Даже если система является в целом электрически нейтральной, на точку будет действовать некоторая сила благодаря тому, что кулоновы поля частиц, составляющих систему, не вполне компенсируют друг друга. Например, при движении электрона в поле молекулы HCl электрон будет притягиваться к молекуле, облетая ее со стороны атома водорода, и отталкиваться со стороны атома хлора. Определим потенциал поля такой системы. Выберем начало декартовой системы координат где-нибудь внутри системы и обозначим через  $\mathbf{r}_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  радиус-векторы составляющих ее частиц, а через  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор материальной точки. По условию,

$$|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}_i|, \quad i = 1, \dots, n.$$

Используя это неравенство, кулонов потенциал  $i$ -ой частицы в точке  $\mathbf{r}$  можно приближенно написать как ( $q_i$  – ее заряд)

$$\varphi_i = \frac{q_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} = \frac{q_i}{\sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)^2}} \approx \frac{q_i}{r\sqrt{1 - \frac{2(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)}{r^2}}} \approx \frac{q_i}{r\left(1 - \frac{(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)}{r^2}\right)} \approx \frac{q_i}{r} + \frac{q_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)}{r^3}.$$

Суммируя по всем частицам и учитывая электронейтральность системы ( $\sum_{i=1}^n q_i = 0$ ), получаем

$$\varphi = \frac{(\mathbf{d}, \mathbf{r})}{r^3}, \quad \mathbf{d} = \sum_{i=1}^n q_i \mathbf{r}_i.$$

Вектор  $\mathbf{d}$  называется *дипольным моментом* системы. Найдем закон движения точки в случае, когда  $\mathbf{d}$  не зависит от времени. Выберем сферическую систему координат с началом в точке  $\mathbf{r} = 0$  и полярной осью, направленной параллельно вектору  $\mathbf{d}$ . Тогда функция Лагранжа материальной точки будет иметь вид

$$L = \frac{m}{2} \left( \dot{r}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 \right) - \frac{qd \cos \theta}{r^2}, \quad d \equiv |\mathbf{d}| \quad (5.82)$$

( $q$  – ее заряд). Отсюда находим обобщенные импульсы и обобщенную энергию точки

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \quad p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mr^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}, \quad p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2 \dot{\theta}, \quad (5.83)$$

$$E = \frac{m}{2} \left( \dot{r}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 \right) + \frac{qd \cos \theta}{r^2}.$$

Выражая обобщенные скорости через обобщенные импульсы и подставляя результат в обобщенную энергию, находим функцию Гамильтона

$$H = \frac{1}{2m} \left( p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{p_\theta^2}{r^2} \right) + \frac{qd \cos \theta}{r^2}.$$

Наконец, по функции Гамильтона записываем уравнение Гамильтона-Якоби

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left\{ \left( \frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial S}{\partial \phi} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 \right\} + \frac{qd \cos \theta}{r^2} = 0. \quad (5.84)$$

Переменные  $t, \phi$  входят в это уравнение лишь через производные  $\partial S/\partial t, \partial S/\partial \phi$ . В соответствии с методом разделения переменных ищем решение в виде

$$S = S_1(t) + S_2(\phi) + S'(r, \theta)$$

и приходим к уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{dS_1}{dt} &= C_1, & \frac{dS_2}{d\phi} &= C_2, \\ C_1 + \frac{1}{2m} \left\{ \left( \frac{\partial S'}{\partial r} \right)^2 + \frac{C_2^2}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial S'}{\partial \theta} \right)^2 \right\} + \frac{qd \cos \theta}{r^2} &= 0. \end{aligned}$$

Первые два из этих уравнений интегрируются тривиально:

$$S_1 = C_1 t, \quad S_2 = C_2 \phi.$$

Перепишем последнее уравнение в виде

$$2mC_1 + \left( \frac{\partial S'}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{C_2^2}{\sin^2 \theta} + \left( \frac{\partial S'}{\partial \theta} \right)^2 + 2mqd \cos \theta \right] = 0.$$

Из этой записи видно, что переменная  $\theta$  отделяется, поэтому мы полагаем

$$S' = S_3(\theta) + S_4(r)$$

и получаем уравнения

$$\begin{aligned} \frac{C_2^2}{\sin^2 \theta} + \left( \frac{dS_3}{d\theta} \right)^2 + 2mqd \cos \theta &= C_3, \\ 2mC_1 + \left( \frac{dS_4}{dr} \right)^2 + \frac{C_3}{r^2} &= 0. \end{aligned}$$

Их решения имеют вид

$$\begin{aligned} S_3 &= \int_{\theta_0}^{\theta} \pm \sqrt{C_3 - 2mqd \cos \theta - \frac{C_2^2}{\sin^2 \theta}} d\theta, \\ S_4 &= \int_{r_0}^r \pm \sqrt{-2mC_1 - \frac{C_3}{r^2}} dr. \end{aligned}$$

Итак, мы нашли решение уравнения Гамильтона-Якоби в виде

$$S = A + C_1 t + C_2 \phi + \int_{\theta_0}^{\theta} \pm \sqrt{C_3 - 2mqd \cos \theta - \frac{C_2^2}{\sin^2 \theta}} d\theta + \int_{r_0}^r \pm \sqrt{-2mC_1 - \frac{C_3}{r^2}} dr. \quad (5.85)$$

Это решение содержит произвольные постоянные  $A, C_1, C_2, C_3, \theta_0, r_0$ . Однако изменение  $\theta_0, r_0$  эквивалентно переопределению  $A$ , так что независимыми являются лишь постоянные  $A, C_1, C_2, C_3$ . Их число равно числу степеней свободы материальной точки плюс

один, следовательно, выражение (5.85) представляет собой полный интеграл уравнения (5.84). Определим знаки, с которыми следует брать корни в этом решении. Подставляя его в соотношения (5.69), находим значения обобщенных импульсов  $p_r, p_\theta$  в данной точке траектории:

$$p_r = \pm \sqrt{-2mC_1 - \frac{C_3}{r^2}}, \quad p_\theta = \pm \sqrt{C_3 - 2mqd \cos \theta - \frac{C_2^2}{\sin^2 \theta}}.$$

С другой стороны, согласно формулам (5.83) знаки этих импульсов совпадают со знаками соответствующих обобщенных скоростей. Таким образом, подынтегральное выражение в интеграле по  $r$  в формуле (5.85) следует брать с верхним (нижним) знаком, если на данном участке траектории  $\dot{r} > 0$  ( $\dot{r} < 0$ ), и аналогично для интеграла по  $\theta$ .

Выясним теперь физический смысл постоянных  $C_1, C_2, C_3$ . Подставляя решение (5.85) в уравнение Гамильтона-Якоби находим  $C_1 + H(q, p, t) = 0$ , т.е. постоянная  $C_1$  есть величина обобщенной энергии точки, взятая со знаком минус. Подстановка же решения в соотношения (5.69) дает  $p_\phi = \partial S / \partial \phi = C_2$ . Таким образом, постоянная  $C_2$  есть величина сохраняющейся проекции момента импульса точки на направление вектора  $\mathbf{d}$ .

То, что величины  $E, p_\phi$  в рассматриваемой задаче сохраняются, можно было утверждать заранее, поскольку время в ней однородно, а пространство изотропно относительно поворотов системы (материальной точки) вокруг направления  $\mathbf{d}$  [функция Лагранжа (5.82) не зависит от переменных  $t, \phi$  явно]. Сохранение же комбинации  $(C_2^2 / \sin^2 \theta + p_\theta^2 + 2mqd \cos \theta)$  никак не связано с подобными симметриями и является специфическим для данной задачи. В том, что метод Гамильтона-Якоби позволяет регулярным образом находить такие интегралы движения, заключается его существенное преимущество по сравнению с лагранжевым методом.

Наконец, найдем закон движения материальной точки. Дифференцируя решение (5.85) по постоянным  $C_1 \equiv -E, C_2 \equiv M_z, C_3$  и приравнявая результат новым произвольным постоянным, получаем

$$-t + \int_{r_0}^r \frac{m dr}{\pm \sqrt{2mE - \frac{C_3}{r^2}}} = Q_1, \quad (5.86)$$

$$\phi - \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{M_z d\theta}{\pm \sin^2 \theta \sqrt{C_3 - 2mqd \cos \theta - \frac{M_z^2}{\sin^2 \theta}}} = Q_2, \quad (5.87)$$

$$+ \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{d\theta}{\pm \sqrt{C_3 - 2mqd \cos \theta - \frac{M_z^2}{\sin^2 \theta}}} - \int_{r_0}^r \frac{dr}{\pm r^2 \sqrt{2mE - \frac{C_3}{r^2}}} = Q_3. \quad (5.88)$$

Уравнение (5.86) определяет в неявном виде зависимость  $r(t)$ , а уравнения (5.87), (5.88) – зависимости  $\phi(\theta)$  и  $\theta(r)$ . Таким образом, мы нашли решение уравнений движения материальной точки в квадратурах. Оно содержит 6 независимых произвольных постоянных  $E, M_z, C_3, Q_1, Q_2, Q_3$ , которые могут быть определены из начальных условий.

## Глава 6. ПЕРЕХОД ОТ КЛАССИЧЕСКОЙ К КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Основным уравнением квантовой механики является уравнение Шредингера для так называемой волновой функции системы. Если рассматриваемая система является классической, т.е. ее движение может быть с достаточной точностью описано с помощью уравнений классической механики (например, солнечная система), то уравнение Шредингера для такой системы должно каким-то образом сводиться к уравнениям классической механики. Оказывается, что классическим пределом уравнения Шредингера является уравнение Гамильтона-Якоби. Поэтому в качестве первого шага перехода от классической механики к квантовой мы формально “восстановим” уравнение Шредингера из уравнения Гамильтона-Якоби. Важнейшим отличием в структуре этих уравнений является то, что уравнение Шредингера является линейным. Затем мы обсудим связь этого изменения в структуре основного уравнения с теми изменениями в основных положениях механики, которые требуется сделать при переходе к описанию явлений микромира.

### §6.1. Уравнение Гамильтона-Якоби как классический предел уравнения Шредингера

Преобразуем уравнение Гамильтона-Якоби (5.68), введя вместо  $S(q, t)$  новую неизвестную функцию  $\Psi(q, t)$  с помощью соотношения

$$\Psi(q, t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(q, t) \right\}, \quad (6.1)$$

где  $i$  есть мнимая единица, а  $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-27}$  г·см<sup>2</sup>/с есть так называемая *постоянная Планка*. В силу малости этой постоянной для обычных классических систем, которые мы рассматривали до сих пор, всегда выполняется условие

$$S \gg \hbar. \quad (6.2)$$

Ограничимся для простоты случаем одномерного движения материальной точки массы  $m$  в потенциальном поле  $U(x, t)$ . Здесь  $x$  обозначает декартову координату точки. Уравнение Гамильтона-Якоби в этом случае имеет вид

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + U(x, t) = 0. \quad (6.3)$$

Дифференцируя соотношение (6.1) один раз по времени и дважды по координатам, получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi, \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\} \right] \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\} \\ &= \left[ -\frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] \Psi. \end{aligned} \quad (6.4)$$

В силу условия (6.2) второй член в квадратных скобках в последнем выражении мал по сравнению с первым. Поэтому можно приближенно написать

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 \Psi. \quad (6.5)$$

Домножая уравнение (6.3) на  $\Psi$ , переписываем его с помощью соотношений (6.4), (6.5) в следующем виде

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x, t) \Psi, \quad (6.6)$$

Это уравнение называется *уравнением Шредингера* и является основным уравнением квантовой механики. Несмотря на то, что мы получили его приближенно из уравнения Гамильтона-Якоби, именно уравнение (6.6) оказывается точным, т.е. описывающим любые системы, а не только те, что удовлетворяют условию (6.2). Таким образом, проделанный выше “вывод” уравнения Шредингера следует рассматривать как демонстрацию того, что уравнение Гамильтона-Якоби является классическим пределом уравнения Шредингера.

Заметим для дальнейшего, что правую часть уравнения (6.6) можно представить как

$$\left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x) \right) \Psi,$$

где

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

есть так называемый *оператор импульса*, причем квадрат оператора понимается как его повторное применение два раза. При этом выражение в круглых скобках имеет вид функции Гамильтона частицы в данном поле, в которой импульс частицы заменен его оператором. Поэтому  $\hat{p}^2/2m + U(x)$  называется *оператором энергии*, или *гамильтонианом* частицы. Значение операторов в квантовой механике будет объяснено в следующей главе, а сейчас заметим лишь, что действие оператора импульса на функцию (6.1) сводится к умножению этой функции на текущий импульс частицы. Действительно, согласно формуле (5.69) имеем

$$\hat{p}\Psi(x, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(x, t) \right\} = \frac{\partial S}{\partial x} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(x, t) \right\} = p(x, t) \Psi(x, t).$$

Важнейшим качественным отличием уравнения Шредингера от уравнения Гамильтона-Якоби является его *линейность*: если две функции  $\Psi_1(x, t)$  и  $\Psi_2(x, t)$  удовлетворяют уравнению (6.6), то ему удовлетворяет и любая их линейная комбинация  $c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t)$ , где  $c_1, c_2$  – произвольные постоянные.

## §6.2. Основные предположения квантовой теории

В этом параграфе мы определим те изменения в основных положениях механики, которые требуется сделать при переходе от классического к квантовому описанию природы. По той же причине, по которой уравнение Шредингера нельзя вывести из уравнений

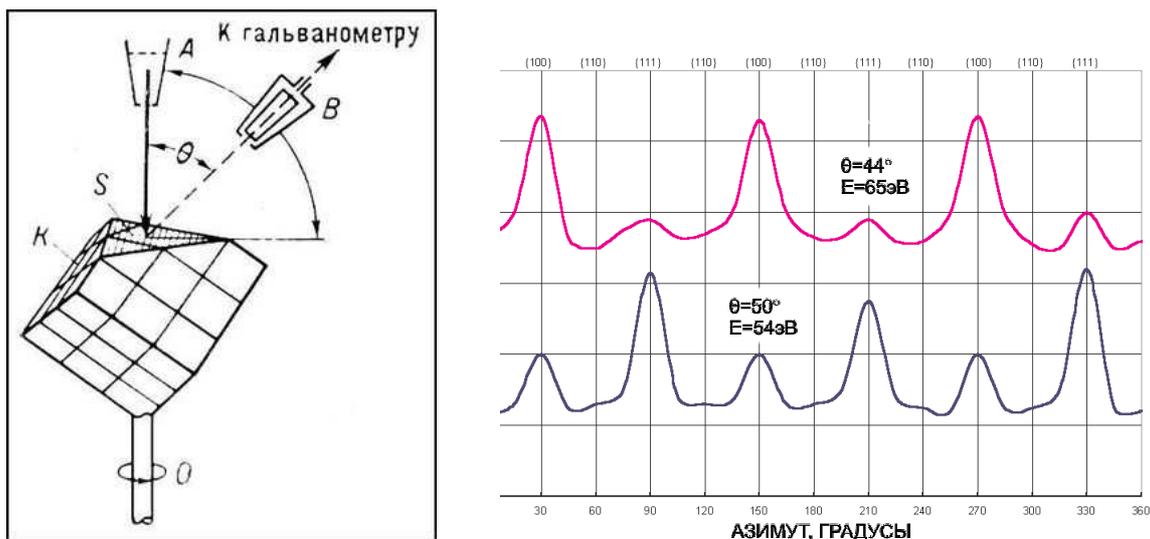


Рис. 11: Слева: схема опыта Дэвиссона — Джермера:  $K$  — монокристалл никеля;  $A$  — источник электронов;  $B$  — детектор электронов;  $\theta$  — угол отклонения электронных пучков; пучок электронов падает перпендикулярно отшлифованной плоскости кристалла  $S$ . При поворотах кристалла вокруг оси  $O$  гальванометр, присоединенный к датчику  $B$ , дает периодически возникающие максимумы. Справа: графики зависимости тока (в условных единицах) детектора от угла поворота вокруг оси  $O$  для различных значений угла  $\theta$  и энергии электронов  $E$ .

классической механики, новые положения можно лишь угадать, опираясь на данные эксперимента. Исторически, это “угадывание” происходило в первой четверти XX века.

Первое, от чего следует отказаться при переходе к квантовому описанию, это понятие закона движения (в частности, траектории) частицы как зависимости ее координат от времени вида  $\{q_\alpha(t)\}$ . Как показывают наблюдения, это основное для классической механики понятие несовместимо с поведением объектов микромира. Об этом говорят, например, результаты опыта Дэвиссона-Джермера по рассеянию электронов на кристаллах (он был поставлен американскими физиками К. Дэвиссоном и Л. Джермером в 1927 г. уже после создания квантовой механики). В этом опыте пучок медленных электронов в вакууме направлялся на монокристалл никеля (см. Рис. 11). Регистрация рассеянных электронов показала, что они образовывали интерференционные картины, характерные для рассеяния на кристаллах рентгеновских лучей. Максимумы и минимумы интенсивности в обоих случаях возникают в результате взаимного усиления или ослабления вторичных волн, порождаемых атомами кристалла при прохождении через него пучка электронов или фотонов. Таким образом, движение элементарных частиц имеет волновой характер, означающий, в частности, отсутствие определенного положения у каждой частицы, в противоположность корпускулярному движению классической механики — движению материальных точек по определенным траекториям. Математически, эта “размазанность” электрона выражается в том, что положение электрона в квантовой механике должно описываться не тремя параметрами (обобщенными координатами), имеющими в каждый момент времени определенные значения, а некоторой функцией пространственных координат. Эта функция называется *волновой функцией*. Она определяет, таким образом, степень “размазанности” частицы в пространстве. Например, для того чтобы в опыте Дэвиссона-Джермера наблюдалась интерференционная картина, эта размазанность (т.е. область, в которой волновая

функция отлична от нуля) должна быть больше периода кристаллической решетки, так чтобы электрон рассеивался одновременно на нескольких атомах. Напротив, в областях, в которых электрон находиться не может, она должна быть равна нулю. Поскольку интерференционные картины, наблюдающиеся в опытах по рассеянию электронных и электромагнитных волн, очень похожи друг на друга, а электромагнитные поля удовлетворяют *линейным* уравнениям Максвелла, то естественно предположить, что линейность является свойством также и уравнений квантовой механики. Таким образом, мы делаем следующее

**Предположение 1:** Уравнение для волновой функции должно быть линейным.

С другой стороны, мы видели выше (на простейшем примере одномерного движения), что уравнения классической механики могут быть приближенно представлены в линейном виде. А именно, как было указано в конце предыдущего параграфа, уравнение Шредингера (6.6), “полученное” из уравнения Гамильтона-Якоби при  $\hbar \rightarrow 0$ , является линейным. Поэтому естественно сделать

**Предположение 2:** уравнение (6.6) является в действительности *точным*, и его следует принять в качестве основного уравнения квантовой механики, отождествив функцию  $\Psi(x, t)$  с волновой функцией.

Сами по себе эти предположения пока еще не отменяют классических понятий закона движения и траектории, поскольку переход по формуле (6.1) от функции  $S(x, t)$  к  $\Psi(x, t)$  представляет собой не более, чем замену неизвестной функции. Закон движения и уравнения траектории в классической механике определяются решением уравнения Гамильтона-Якоби по правилу (5.74). Напомним, что в самом уравнении Гамильтона-Якоби переменные  $x, t$  являются независимыми, и только после подстановки его решения в уравнения (5.74) возникает зависимость  $x(t)$ , т.е. закон движения. Поэтому отказ от этого понятия означает отмену уравнений (5.74). Таким образом, мы делаем

**Предположение 3:** Эволюция системы в квантовой механике определяется полностью одним лишь уравнением Шредингера. При этом аргументы  $x, t$  волновой функции остаются полностью независимыми.

Предположения 1 – 3 в корне меняют понятие *состояния* системы (см. §1.1). А именно, поскольку уравнение Шредингера является дифференциальным уравнением первого порядка по времени, то для однозначного его решения, т.е. определения эволюции системы, следует задать лишь начальное значение функции  $\Psi(x, t)$  в некоторый момент времени  $t = t_0$ , тогда как в классическом случае требовалось задать дополнительно значения постоянных  $Q_\alpha$  в уравнениях (5.74). Но и этого изменения понятия состояния еще недостаточно для того, чтобы получить принципиально новую механику. Если мы отказываемся от знания части начальных условий в форме набора постоянных  $Q_\alpha$ , ограничиваясь заданием  $\Psi(x, t_0)$ , то это означает лишь изменение способа наблюдения за системой, а не физических свойств самой системы. Действительно, этот отказ вносит в описание системы неопределенность, аналогичную неопределенности термодинамического описания, при котором наблюдатель отказывается от знания всей совокупности данных о координатах и скоростях отдельных частиц системы, заменяя ее гораздо меньшим числом параметров (температура, давление, концентрации отдельных компонент и их химические потенциалы и т.д.). Рассмотрим, например, атом водорода. Даже если наблюдатель отказался от попытки точно измерить значения параметров  $Q_\alpha$ , задающих закон движения электрона, эти параметры в действительности имеют какие-то определенные значения, т.е. электрон движется по определенной траектории. Но согласно электродинамике любое ускоренное движение заряда приводит к излучению им электромагнитных волн. Эти волны непре-

ривно уносят энергию электрона, так что он в конце концов должен упасть на протон, что абсолютно противоречит наблюдаемой стабильности атома. Поэтому связанные состояния электрона должны описываться такими волновыми функциями, которые менее всего соответствуют движению по определенным траекториям. Способ допустить такие состояния подсказывает *линейность* уравнения Шредингера. А именно, пусть каждая из функций  $\Psi_1(x, t)$  и  $\Psi_2(x, t)$  описывает некоторое движение частицы. Обе эти функции удовлетворяют уравнению Шредингера. Тогда в силу Предположения 1 ему удовлетворяет и любая линейная комбинация  $c_1\Psi_1(x, t) + c_2\Psi_2(x, t)$ , где  $c_1, c_2$  – произвольные комплексные постоянные. Конечно, ниоткуда не следует *a priori*, что функция  $c_1\Psi_1(x, t) + c_2\Psi_2(x, t)$  будет описывать какое-либо реальное физическое состояние, но опять-таки по аналогии с электромагнитной теорией этого естественно ожидать. Поэтому мы делаем

**Предположение 4:** Если каждая из функций  $\Psi_1(x)$ ,  $\Psi_2(x)$  описывает возможное состояние системы, то и любая их линейная комбинация, или *суперпозиция*,  $c_1\Psi_1(x) + c_2\Psi_2(x)$  с произвольными комплексными постоянными  $c_1, c_2$  также описывает возможное состояние.

Это предположение называется *принципом суперпозиции*. Оно играет важнейшую роль во всей квантовой теории. Принцип суперпозиции делает неопределенность в квантовомеханическом понятии состояния реальной, т.е. не связанной с простым отбрасыванием наблюдателем части данных о системе. Именно принцип суперпозиции означает радикальный отход от классических представлений о движении, поскольку говорить о наложении движений частицы по различным траекториям в рамках классической механики бессмысленно. Наложение различных состояний означает, в частности, что координаты частицы, вообще говоря, не имеют определенных значений. Эта неопределенность и соответствует той “размазанности” частицы в пространстве, о которой говорилось в начале этого параграфа. С другой стороны, как показывает опыт, в каждый отдельный момент времени положение частицы может быть определено с любой точностью, но при этом измерения координат частицы, проводимые в одних и тех же условиях и для одного и того же состояния частицы, дают различные результаты. Различные значения координат появляются с различной частотой, зависящей от конкретного состояния частицы. Это конкретизирует понятие “размазанности” и означает, что координаты частицы могут принимать различные значения с различной *вероятностью*. Таким образом, измерение координат в квантовой механике является *вероятностным процессом*. Подчеркнем еще раз отличие квантовомеханического понятия о вероятности от термодинамического. Вероятность в квантовой механике связана с описанной выше принципиальной неопределенностью в положении частицы и не может быть устранена усовершенствованием измерительной техники. Поскольку размазанность частицы определяется волновой функцией, то естественно предположить, что именно волновая функция определяет распределение вероятностей координат частиц. Следуя аналогии с электромагнитным полем, энергия (интенсивность) которого в некоторой малой области пространства определяется квадратом напряженности электрического или магнитного полей в этой области, естественно сделать

**Предположение 5:** Вероятность нахождения частицы в данной малой области пространства пропорциональна квадрату модуля значения волновой функции в этой точке. Например, в одномерном случае вероятность найти частицу на интервале  $dx$  около точки  $x_0$  будет пропорциональна  $|\Psi(x_0, t)|^2 dx$ . Отсюда сразу вытекают

**Следствие 1:** волновая функция должна быть непрерывной функцией пространственных координат, поскольку в противном случае вероятность нахождения частицы в малой

области, окружающей точку разрыва непрерывности  $\Psi(x, t)$ , зависела бы от выбора точки в этой малой области, что физически бессмысленно.

**Следствие 2:** поскольку сумма всех вероятностей должна быть равна единице, а вероятность пропорциональна  $|\Psi(x, t)|^2 dx$ , то волновая функция должна быть *нормированной*, т.е. интеграл  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi(x, t)|^2$  должен быть конечен. В этом случае заменой  $\Psi \rightarrow C\Psi$ ,  $C = \text{const}$ , допустимой в силу Предположения 4, можно добиться выполнения равенства  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = 1$ . Тогда вероятность найти частицу на интервале  $dx$  около точки  $x_0$  будет в точности равна  $|\Psi(x_0, t)|^2 dx$ . Константу  $C$ , подобранную таким образом, называют *нормировочной постоянной*.

### §6.3. Механика квазиклассической частицы

Для классических систем условие (6.2) выполняется по определению всегда. При определенных условиях оно может выполняться также и для чисто квантовой системы. Другими словами, хотя данная система и проявляет квантовые свойства (например, может описываться суперпозицией состояний, различных с классической точки зрения), но ее состояние таково, что выполняется условие  $S(x, t)/\hbar \gg 1$ , так что функция (6.1) по-прежнему приближенно удовлетворяет уравнению Шредингера. Систему, находящуюся в таком состоянии, называют *квазиклассической*. Посмотрим, что получится, если применить сделанные выше Предположения к квазиклассической частице.

#### А. Свободное движение. Волны де Бройля

Начнем с простейшего случая – свободного движения ( $U = 0$ ) частицы по прямой  $x$ . В классической механике в этом случае сохраняется импульс частицы. Решение уравнения Гамильтона-Якоби, описывающее движение частицы с заданным постоянным импульсом  $p_0$ , есть

$$S(x, t) = -\frac{p_0^2}{2m}t + p_0x + A, \quad (6.7)$$

где  $A$  – произвольная постоянная. Действительно, согласно формуле (5.69) импульс частицы в любой момент времени  $t$  равен

$$p = \frac{\partial S}{\partial x} = p_0.$$

Подставляя (6.7) в формулу (6.1), получаем волновую функцию частицы

$$\Psi(x, t) = C_0 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left( -\frac{p_0^2}{2m}t + p_0x \right) \right\}, \quad C_0 = e^{iA/\hbar}. \quad (6.8)$$

Таким образом, волновая функция, описывающая движение частицы с определенным импульсом  $p_0$ , представляет собой плоскую волну с частотой  $p_0^2/(2m\hbar)$  и волновым вектором  $k = p_0/\hbar$ . Несмотря на то, что выражение (6.8) получено с помощью приближенного решения (6.1) уравнения Шредингера, нетрудно проверить, что оно является точным решением этого уравнения [так получилось потому, что член  $\partial^2 S/\partial x^2$ , которым мы пренебрегли

при переходе от (5.68) к (6.6), в рассматриваемом случае равен нулю]. Функцию (6.8) называют *волной де Бройля*. Длина этой волны, называемая *дебройлевской длиной волны частицы*, равна  $\lambda = 2\pi\hbar/p_0$ . Например, в эксперименте Дэвиссона-Джермера электроны имели энергию порядка  $E_0 = 100 \text{ эВ} \approx 1,6 \cdot 10^{-10} \text{ г}\cdot\text{см}^2/\text{с}^2$ . Этой энергии соответствует импульс  $p_0 = \sqrt{2mE_0} \approx \sqrt{2 \cdot 10^{-27} \cdot 1,6 \cdot 10^{-10}} \text{ г}\cdot\text{см}/\text{с} \approx 6 \cdot 10^{-19} \text{ г}\cdot\text{см}/\text{с}$  (масса электрона  $m = 9,11 \cdot 10^{-28} \text{ г} \approx 10^{-27} \text{ г}$ ). Поэтому дебройлевская длина волны таких электронов  $\lambda \approx 2 \cdot 3 \cdot 10^{-27} / (6 \cdot 10^{-19}) \text{ см} = 10^{-8} \text{ см}$  ( $\hbar \approx 10^{-27} \text{ г}\cdot\text{см}^2/\text{с}$ ). Это есть как раз порядок величины межатомных расстояний в твердом теле.

Возьмем теперь в качестве решения  $S(x, t)$  уравнения Гамильтона-Якоби для той же свободной частицы функцию  $S(x^{(1)}, t_1; x, t) = \int_{t_1}^t m\dot{x}^2/2 dt$ . Этот интеграл легко вычисляется:

$$S(x^{(1)}, t_1; x, t) = \int_{t_1}^t \frac{m\dot{x}^2}{2} dt = \frac{m\dot{x}^2}{2}(t - t_1).$$

По определению функции  $S(x^{(1)}, t_1; x, t)$ , она должна быть выражена через начальные и конечные координаты и моменты времени. Для этого подставляем  $\dot{x} = (x - x^{(1)})/(t - t_1)$  и получаем

$$S(x^{(1)}, t_1; x, t) = \frac{m(x - x^{(1)})^2}{2(t - t_1)}. \quad (6.9)$$

Согласно формуле (5.69) импульс частицы в момент времени  $t$  равен

$$p = \frac{\partial S}{\partial x} = \frac{m(x - x^{(1)})}{(t - t_1)}.$$

Но в соответствии с Предположением 3 переменные  $x, t$  являются независимыми, и поэтому  $p$  не сводится к постоянной. Подставляя (6.9) в (6.1), находим волновую функцию, описывающую движение с заданной начальной координатой

$$\Psi(x, t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m(x - x^{(1)})^2}{2(t - t_1)} \right\}. \quad (6.10)$$

Следует отметить, что сами по себе выражения (6.8), (6.10) не могут являться волновыми функциями частицы, т.е. описывать реальное состояние. Действительно, в обоих случаях  $|\Psi(x, t)|^2 = 1$ , и потому эти функции не являются нормируемыми (см. Следствие 2). Это значит, что *в квантовой механике не существует состояний, в которых импульс или координата частицы имеют строго определенное значение*. Таким образом, в любом состоянии координата и импульс принципиально “размазаны” по некоторому интервалу значений. Этот интервал может быть сколь угодно мал, но он всегда конечен.

С классической точки зрения, обе функции (6.7), (6.9) эквивалентны – они описывают одно и то же движение частицы. Действительно, согласно определению из §5.5D, обе они являются полными интегралами уравнения Гамильтона-Якоби, причем в решении (6.7) постоянная интегрирования  $C_1 = p_0$ , а в решении (6.9)  $C_1 = x^{(1)}$ . Если мы вернемся к использованию уравнений (5.74), то в первом случае получим закон движения

$$\frac{\partial S}{\partial p_0} = -\frac{p_0}{m}t + x = Q,$$

а во втором –

$$\frac{\partial S}{\partial x^{(1)}} = -\frac{m(x - x^{(1)})}{(t - t_1)} = Q.$$

Оба закона описывают равномерное движение, причем в первом случае константа  $Q$  определяет начальную координату частицы, а во втором – ее импульс. С квантовой же точки зрения решения (6.7), (6.9) приводят к совершенно разным волновым функциям. Таким образом, в одних и тех же внешних условиях вид волновой функции частицы зависит от того, является ли фиксированным ее импульс или начальное положение (как было указано выше, слово “фиксированный” означает, что значения импульса (координаты) лежат в некотором малом интервале значений). Другими словами, координату и импульс частицы нельзя задать одновременно сколь угодно точно. Количественное выражение этого ограничения – так называемый *принцип неопределенности Гейзенберга* – будет получено в §7.5В.

### В. Классические траектории с точки зрения квантовой механики

Итак, отказавшись от понятий закона движения и траектории (см. Предположения 3–5), мы пришли к выводу, что вид волновой функции частицы существенно зависит от того, стартует ли частица из определенной точки пространства или с определенным импульсом. Поскольку в классической механике дело обстоит совершенно противоположным образом – состояние частицы определяется одновременным заданием ее координаты и импульса – то возникает вопрос о том, как из квантовомеханического описания движения частицы с помощью волновой функции может возникнуть понятие закона движения. Мы подробно разберем этот вопрос на примере свободной частицы, используя Предположения, сделанные в §6.2. Рассуждение, которое при этом применяется, будет неоднократно использовано в дальнейшем (см. §7.4С, §8.3А).

Как было уже указано, функция (6.10) сама по себе не представляет никакого реального состояния, поскольку сумма вероятностей всех значений координаты частицы равна бесконечности ( $\int |\Psi|^2 dx = \infty$ ), что конечно же бессмысленно. Это значит, что координата частицы не может иметь строго определенного значения даже в какой-либо отдельный момент времени, т.е. должна быть “размазана.” В частности, начальная координата  $x^{(1)}$  должна быть “размазана” по некоторому малому интервалу  $\Delta x$  вокруг некоторого  $x_0$ . Для того чтобы получить волновую функцию классической частицы в таком состоянии, воспроизводящую движение по классической траектории, построим суперпозицию функций (6.10) с коэффициентами  $e^{ipx^{(1)}/\hbar}$ , где  $x^{(1)} \in \Delta x$ , а  $p$  – некоторое вещественное число:

$$\Psi(x, t) = \int_{\Delta x} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{m(x - x^{(1)})^2}{2(t - t_1)} + px^{(1)} \right] \right\} dx^{(1)}. \quad (6.11)$$

Для классической (т.е. достаточно массивной) частицы показатель экспоненты велик по абсолютной величине – даже при небольшом изменении  $x^{(1)}$  он меняется на большую величину. Поскольку же он является чисто мнимым, экспонента представляет собой быстроосциллирующую функцию и при интегрировании по  $x^{(1)}$  дает практически нуль. Заметный от нуля результат получится только в одном случае – когда в интервал интегрирования попадает точка экстремума показателя. В окрестности этой точки показатель меняется относительно медленно, и потому вклады от различных  $x^{(1)}$  не полностью компенсируют

друг друга. Положение экстремума находится приравниваем нулю производной показателя по  $x^{(1)}$ :

$$-\frac{m(x - x^{(1)})}{(t - t_1)} + p = 0.$$

Поскольку  $x^{(1)}$  лежит в малом интервале  $\Delta x$  около  $x_0$ , то из полученного уравнения следует, что волновая функция (6.11) будет отлична от нуля лишь вблизи точки

$$x = x_0 + \frac{p}{m}(t - t_1).$$

Но это есть классический закон движения свободной частицы с импульсом  $p$  из начальной точки  $x_0$ . Таким образом, малая область пространства, в которой вероятность нахождения частицы заметно отлична от нуля, перемещается согласно законам классической механики. Отсюда следует, в частности, что сумма вероятностей, определяемых функцией (6.11), является уже может быть нормирована на единицу.

Аналогично, функции (6.8) по-отдельности не представляют физических состояний частицы. Для того чтобы построить физическое состояние, в котором импульс частицы приближенно равен  $p_0$ , возьмем линейную комбинацию функций

$$\Psi(x, t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left( -\frac{p^2}{2m}t + px \right) \right\}, \quad (6.12)$$

с коэффициентами  $e^{-ipx_0/\hbar}$ , где  $x_0$  есть некоторая вещественная постоянная, а  $p$  принадлежит малому интервалу  $\Delta p$  вокруг заданного значения  $p_0$ :

$$\Psi(x, t) = \int_{\Delta p} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ -\frac{p^2}{2m}t + px - px_0 \right] \right\} dp. \quad (6.13)$$

Как и раньше, волновая функция будет отлична от нуля лишь в тех точках  $x$ , для которых точка экстремума показателя экспоненты попадает в интервал  $\Delta p$ . Дифференцируя показатель по  $p$  и приравнивая результат нулю, получаем

$$-\frac{p}{m}t + x - x_0 = 0.$$

Поскольку  $p$  здесь близко к  $p_0$ , то из полученного условия следует, что функция (6.13) отлична от нуля лишь вблизи точки

$$x = x_0 + \frac{p_0}{m}t.$$

Таким образом, мы опять пришли к классическому закону движения.

### *С. Фinitное движение с определенной энергией. Правило квантования Бора-Зоммерфельда*

Рассмотрим теперь движение частицы по прямой  $x$  в поле  $U(x)$ , не зависящем от времени. В классической механике в этом случае сохраняется энергия частицы. Решение

уравнения Гамильтона-Якоби, описывающее движение частицы с заданной постоянной энергией  $E$ , имеет вид

$$S(x, t) = -Et + \int_a^x p_x dx + A, \quad p_x = \pm \sqrt{2m(E - U(x))}. \quad (6.14)$$

Действительно, согласно формуле (5.68) численное значение функции Гамильтона для этого решения равно

$$H = -\frac{\partial S}{\partial t} = E,$$

т.е. как раз заданному значению энергии. Подставляя это выражение в формулу (6.1), получаем волновую функцию частицы в виде

$$\Psi(x, t) = C_0 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left( -Et + \int_a^x p_x dx \right) \right\}, \quad C_0 = e^{iA/\hbar}. \quad (6.15)$$

Нижний предел  $a$  в интеграле по  $x$  может быть выбран произвольно – его изменение сводится к переопределению несущественной постоянной  $A$ . Следует заметить, что выражение (6.15) не вполне определено, поскольку не указано, с каким знаком берется корень  $\sqrt{2m(E - U)}$ . В классической механике выбор знака определяется направлением движения в данной точке траектории – при движении вправо (т.е.  $\dot{x} > 0$ ) выбирается “+”, а при движении влево “-”. Вместе с отказом от понятия траектории естественно отпадает и это правило, поскольку переменные  $x, t$  остаются независимыми. Таким образом, выбор знака остается произвольным, и мы имеем два независимых решения для волновой функции. Заметим еще, что так же как в случае решений (6.8), (6.10) для свободной частицы, полученные решения не являются физическими в том смысле, что функция (6.15) не является нормируемой: при любом выборе знака перед корнем имеем  $|\Psi(x, t)|^2 = 1$ , так что интеграл  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = \infty$ . Это значит, что так же как импульс и координата, энергия частицы, вообще говоря, “размазана” по некоторому интервалу значений.

Замечательно, однако, что в определенных условиях квантовые состояния со строго определенной энергией могут существовать. Предположим, что данный потенциал  $U(x)$  допускает финитное движение классической частицы (случаи  $E = E_2$  и  $E = E_3$  на Рис. 3). Обозначим через  $x_1, x_2$  ( $x_1 < x_2$ ) точки остановки классической частицы при данном значении ее энергии (точки  $q_1, q_2$  на Рис. 3). Тогда классическая частица не может находиться в областях слева от  $x_1$  или справа от  $x_2$ . Попытаемся построить волновую функцию, которая описывала бы аналогичную ситуацию в квантовом случае, а именно, такую функцию  $\Psi_E(x, t)$ , для которой вероятность частице оказаться точках  $x \notin [x_1, x_2]$  обращалась бы в нуль. Согласно Предположению 5 эта вероятность пропорциональна  $|\Psi(x, t)|^2$ . Итак, должно быть  $\Psi_E(x, t) = 0$  при  $x < x_1$  и  $x > x_2$ . Тогда в силу Следствия 1 (непрерывность волновой функции)  $\Psi_E$  должна обращаться в нуль также и в самих точках остановки

$$\Psi_E(x_1, t) = \Psi_E(x_2, t) = 0. \quad (6.16)$$

Для того чтобы построить функцию, удовлетворяющую этим условиям, применим Предположение 4, и будем искать  $\Psi_E(x, t)$  в виде суперпозиции функций (6.15):

$$\Psi_E(x, t) = c_1 \Psi_+(x, t) + c_2 \Psi_-(x, t), \quad (6.17)$$

где нижний индекс у  $\Psi$  соответствует знаку корня в решении (6.15). Подставив это выражение в условия (6.16), получим два уравнения для определения коэффициентов  $c_1, c_2$

$$\begin{aligned} c_1 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^{x_1} \sqrt{2m(E - U(x))} dx \right\} + c_2 \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_a^{x_1} \sqrt{2m(E - U(x))} dx \right\} &= 0, \\ c_1 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^{x_2} \sqrt{2m(E - U(x))} dx \right\} + c_2 \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_a^{x_2} \sqrt{2m(E - U(x))} dx \right\} &= 0. \end{aligned}$$

Условие совместности этой системы есть

$$\exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - U(x))} dx \right\} = 1.$$

Это равенство означает, что показатель экспоненты должен быть целым кратным от  $2\pi i$ , т.е.

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - U(x))} dx = \pi \hbar n, \quad n \in N. \quad (6.18)$$

Если использовать классическое правило знаков и брать корень  $\sqrt{2m(E - U(x))}$  со знаком плюс при интегрировании от меньших  $x$  к большим, и знак минус при интегрировании в обратном направлении, то последнее равенство можно записать коротко так:

$$\oint p_x dx = 2\pi \hbar n, \quad n \in N, \quad (6.19)$$

где символ  $\oint dx$  означает интеграл по полному периоду движения классической частицы – от  $x_1$  до  $x_2$  и обратно. Это условие называется *правилом квантования Бора-Зоммерфельда*. Оно было предложено датским физиком Н. Бором и немецким физиком А. Зоммерфельдом в 1913–1916 гг. еще до создания современной квантовой механики, и затем выведено для квазиклассических систем из уравнения Шредингера. С учетом этого условия волновая функция принимает вид

$$\Psi_E(x, t) = \begin{cases} C_0 e^{-iEt/\hbar} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m(E - U(x))} dx \right\}, & x \in [x_1, x_2], \\ 0, & x \notin [x_1, x_2]. \end{cases} \quad (6.20)$$

Эта функция уже является нормируемой, и поэтому энергия частицы уже не должна быть “размазана” по конечному интервалу, а может принимать строго определенное значение. Однако это значение не может быть произвольно выбрано, а должно удовлетворять условию Бора-Зоммерфельда. Действительно, точки  $x_{1,2}$  определяются из уравнения  $U(x) = E$ , т.е. являются функциями энергии:  $x_{1,2} = x_{1,2}(E)$ . Поэтому уравнение (6.18) определяет допустимые значения энергии частицы. Мы видим, таким образом, что энергия частицы при финитном движении может принимать лишь определенный дискретный набор значений, или как говорят, *энергия квантуется*.

В связи с полученным результатом сделаем следующие замечания:

**Замечание 1.** Из выражения (6.20) видно, что величина  $|\Psi(x, t)|^2$  не зависит от времени (так как  $|e^{-iEt/\hbar}|^2 = 1$ ). Таким образом, волновые функции, соответствующие определенным значениям энергии, описывают *стационарные состояния*, т.е. состояния, в которых распределение вероятностей для координат частицы не зависит от времени (см. Предположение 3).

**Замечание 2.** Условие (6.18) является следствием граничных условий (6.16), которые выражают финитность движения. Поэтому при инфинитном движении (в одну или в обе стороны) энергия частицы не квантуется (на Рис. 3 этому соответствует случай  $E = E_1$ ). Для систем, не удовлетворяющих условию квазиклассичности, волновая функция уже не обязана обращаться в нуль в точках, соответствующих точкам остановки классической частицы. Поэтому в общем случае граничные условия не имеют вида (6.16), а определяются требованием интегрируемости функции  $|\Psi(x)|^2$ . Это значит, что в квантовой механике частица может находиться в областях пространства, запрещенных для классической частицы с той же энергией. Например, если классическая частица колеблется с энергией  $E = E_2$  между точками  $q_1$  и  $q_2$  на Рис. 3, то квантовая частица в соответствующем состоянии может пребывать и в точках справа от  $q_2$ . В частности, она может “просочиться” в область правее точки  $q_3$ , которая опять соответствуют классически доступной области при том же значении энергии. Оказавшись справа от  $q_3$ , частица уйдет на бесконечность вправо. Это явление называют *квантовым туннелированием*. Вероятность такого процесса тем меньше, чем шире и выше потенциальный барьер между точками  $q_2$ ,  $q_3$  и чем более “классична” частица, но при  $E = E_2$  она в принципе отлична от нуля, так что рано или поздно частица с такой энергией покинет яму  $[q_1, q_2]$ . Поэтому даже для квазиклассических частиц состояние с  $E = E_2$ , строго говоря, не является стационарным. Таковыми являются лишь состояния при  $E = E_3$ .

**Пример 23.** Квантование энергии гармонического осциллятора. Применим правило квантования Бора-Зоммерфельда к частице, описываемой функцией Гамильтона (5.8). Для того чтобы вычислить  $\int p_x dx$ , заметим, что если формулу (5.8) подставить  $H(x, p) = E$ , где  $E$  есть заданное значение энергии осциллятора, то получим уравнение

$$\frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = E, \quad (6.21)$$

представляющее собой уравнение эллипса в фазовой плоскости  $(x, p_x)$  с полуосями

$$a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}, \quad b = \sqrt{2mE}.$$

С другой стороны, интеграл в левой стороне равенства (6.19) определяет площадь, ограниченную в плоскости  $(x, p_x)$  замкнутой кривой  $p_x(x)$ . Учитывая, что площадь эллипса с полуосями  $a, b$  равна  $\pi ab$ , получаем правило квантования в виде  $E/\omega = \hbar n, n \in N$ , откуда следует, что энергия осциллятора может принимать лишь значения

$$E_n = \hbar\omega n, \quad n \in N. \quad (6.22)$$

Условие применимости этой формулы следует из общего условия квазиклассичности  $S[x(t)] \gg \hbar$ , которое должно выполняться на классической траектории. Поскольку  $S = \int L dt$ , а по порядку величины  $L \sim E$ , то  $S \sim E\Delta t$ , где  $\Delta t \sim 1/\omega$  есть характерное время движения осциллятора. Таким образом, должно быть  $E/\omega \gg \hbar$ , и потому формула (6.22) применима при  $n \gg 1$ .

**Пример 24.** Модель Бора атома водорода. Как мы знаем из §3.2, радиальное движение частицы в центральном поле  $U(r)$  может быть представлено как одномерное движение в эффективном поле  $U_{\text{eff}}(r) = U(r) + M^2/(2mr^2)$ , где  $M$  есть момент импульса частицы массы  $m$ . Поэтому в правиле квантования Бора-Зоммерфельда (6.18) следует заменить  $U \rightarrow U_{\text{eff}}$ :

$$\int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2m(E - U_{\text{eff}}(r))} dr = \pi \hbar k, \quad k \in N. \quad (6.23)$$

Применим эту формулу к кулоновскому полю  $U(r) = \alpha/r, \alpha < 0$ . Финитному движению соответствуют  $E < 0$ . Мы должны вычислить интеграл

$$I = \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2m \left( E - \frac{\alpha}{r} - \frac{M^2}{2mr^2} \right)} dr.$$

Интегрируя по частям и учитывая, что  $r_{\min}, r_{\max}$  являются корнями подынтегрального выражения, перепишем этот интеграл в виде

$$\begin{aligned} I &= r \sqrt{2m \left( E - \frac{\alpha}{r} - \frac{M^2}{2mr^2} \right)} \Big|_{r_{\min}}^{r_{\min}} - \sqrt{2m} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \frac{\frac{\alpha}{r} + \frac{M^2}{mr^2}}{2\sqrt{E - \frac{\alpha}{r} - \frac{M^2}{2mr^2}}} dr \\ &= \sqrt{2m} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \frac{\left( E - \frac{\alpha}{r} - \frac{M^2}{2mr^2} \right) - E - \frac{M^2}{2mr^2}}{2\sqrt{E - \frac{\alpha}{r} - \frac{M^2}{2mr^2}}} dr = \frac{I}{2} - \sqrt{2m} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \frac{E + \frac{M^2}{2mr^2}}{2\sqrt{E - \frac{\alpha}{r} - \frac{M^2}{2mr^2}}} dr, \end{aligned}$$

откуда с учетом формул (3.21), (3.22) находим

$$I = -\sqrt{2m} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \frac{E + \frac{M^2}{2mr^2}}{\sqrt{E - \frac{\alpha}{r} - \frac{M^2}{2mr^2}}} dr = -2E \int_{t(r_{\min})}^{t(r_{\max})} dt - M \int_{\phi(r_{\min})}^{\phi(r_{\max})} d\phi = -2E \frac{T}{2} - M\pi.$$

Наконец, подстановка выражения (3.38) для периода  $T$  дает

$$I = \pi |\alpha| \sqrt{\frac{m}{2|E|}} - \pi M.$$

Таким образом, правило квантования Бора-Зоммерфельда для радиального движения имеет вид

$$|\alpha| \sqrt{\frac{m}{2|E|}} - M = \hbar k, \quad k \in N. \quad (6.24)$$

Для того чтобы вывести отсюда формулу квантования энергии частицы, нам остается применить правило Бора-Зоммерфельда к угловому движению. Покажем, что это правило применимо к угловой координате  $\phi$  и сопряженному с ней обобщенному импульсу

$p_\phi$  в том же виде (6.18). Действительно, хотя при движении частицы угол  $\phi$  монотонно возрастает со временем, но значения этого угла, отличающиеся на  $2\pi$ , соответствуют одной и той же точке пространства. Поэтому если в качестве обобщенной координаты мы выберем вместо угла  $\phi$  какую-либо непрерывную периодическую его функцию, например,  $x = \sin \phi$ , то при обращении частицы вокруг центра поля новая координата будет изменяться периодически, принимая значения между  $-1$  и  $+1$ , играющими роль точек остановки. С другой стороны, замена  $\phi \rightarrow x$ , как и любая замена обобщенных координат, является канонической (см. пример 20). Поэтому в силу теоремы об инвариантности фазового объема при канонических преобразованиях (см. §5.4В)

$$\oint p_x dx = \oint p_\phi d\phi,$$

поскольку, как уже указывалось выше, интеграл  $\oint p_x dx$  равен площади фигуры, ограниченной кривой  $p_x(x)$  в фазовом пространстве. Учитывая также, что обобщенный импульс  $p_\phi = \partial L / \partial \dot{\phi} = M$  сохраняется, условие квантования (6.18) дает

$$\oint p_\phi d\phi = M \oint d\phi = 2\pi M = 2\pi \hbar l, \quad l \in N,$$

откуда

$$M = \hbar l, \quad l \in N. \quad (6.25)$$

Подставляя это выражение в уравнение (6.24), находим из него формулу квантования энергии

$$E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n \equiv k + l \in N. \quad (6.26)$$

Применяя ее к движению электрона в атоме водорода ( $\alpha = -e^2$ ), приходим к знаменитой формуле Бора для уровней энергии атома водорода

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}. \quad (6.27)$$

Как и в случае осциллятора, условие квазиклассичности требует  $n \gg 1$ . Однако как мы увидим в §9.7, на самом деле эта формула справедлива при всех  $n$ .

При обсуждении предпосылок принципа суперпозиции уже говорилось о том, что для устойчивости атома необходимо, чтобы электроны находились в таких состояниях, в которых отсутствует движение заряда, поскольку иначе энергия электрона непрерывно тратилась бы на излучение. Из Замечания 1 следует, что состояния с определенной энергией как раз удовлетворяют этому условию. Действительно, согласно Предположению 5 электрон “размазан” в пространстве с плотностью  $\sim |\Psi|^2$ , т.е. его заряд распределен с плотностью  $\sim e|\Psi|^2$ . В состояниях же с определенной энергией  $|\Psi|^2$  не зависит от времени. Таким образом, в связанных состояниях электрон может излучать энергию лишь дискретными порциями при переходах между различными стационарными состояниями. В частности, состояние с наименьшей энергией является абсолютно устойчивым.

## Глава 7. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Концептуальные Предположения 1–5, сделанные в предыдущей главе, будут теперь естественным образом обобщены и приняты в качестве постулатов квантовой механики. Для этого необходимо предварительно определить понятие оператора физической величины и изучить основные свойства операторов.

### §7.1. Конфигурационное пространство, функции и операторы

Рассмотрим систему, состоящую из  $N$  материальных точек (частиц), положение которых в пространстве определяется радиус-векторами  $\mathbf{r}_i, i = 1, \dots, N$ . Введем  $3N$ -мерное пространство и в нем декартову систему координат, по осям которой откладываются декартовы координаты векторов  $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i), i = 1, \dots, N$ . Это пространство называют *конфигурационным пространством* системы. Через  $d\tau$  обозначим элемент объема конфигурационного пространства

$$d\tau \equiv \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dz_i.$$

Рассмотрим, далее, на конфигурационном пространстве множество однозначных ограниченных непрерывных комплексных функций  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ . Ограниченность означает, что для каждой функции  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  можно найти такое число  $A_\Psi$ , что  $|\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 < A_\Psi$  для всех  $\mathbf{r}_i, i = 1, \dots, N$ . Кроме того, везде за исключением лишь §8.3 и §8.6, мы будем считать, что все рассматриваемые функции имеют частные производные любого порядка по каждому из своих аргументов. Множество всех таких функций обозначим через  $\mathcal{M}$ . Для любых двух функций  $\Psi_1(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  и  $\Psi_2(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  из  $\mathcal{M}$  любая их линейная комбинация  $c_1\Psi_1(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + c_2\Psi_2(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  с произвольными комплексными коэффициентами  $c_1, c_2$  также является однозначной ограниченной функцией и имеет производные любого порядка, и потому принадлежит  $\mathcal{M}$ . Таким образом,  $\mathcal{M}$  является *векторным пространством*, а его элементы, т.е. функции  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ , – *векторами* в этом пространстве. Аргументы  $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$  в обозначении вектора обычно будут опускаться. Совокупность  $n$  векторов  $\Psi_k, k = 1, \dots, n$  называется *линейно-зависимой*, если существует такой набор  $n$  комплексных чисел  $c_k, k = 1, \dots, n$ , не все из которых равны нулю, что для всех  $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$  справедливо равенство

$$\sum_{k=1}^n c_k \Psi_k = 0.$$

Если это равенство выполняется лишь в случае, когда все  $c_k = 0$ , то говорят, что векторы  $\Psi_k, k = 1, \dots, n$  являются *линейно-независимыми*.

Говорят, что на  $\mathcal{M}$  определен *оператор*  $\hat{f}$ , если задано правило, по которому любой функции  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \in \mathcal{M}$  сопоставляется некоторая другая функция  $(\hat{f}\Psi)(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \in \mathcal{M}$ . Символ  $\hat{f}\Psi$  заключен здесь в скобки с целью подчеркнуть, что аргументы  $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$  относятся уже не к вектору  $\Psi$ , а к результату действия на него оператора  $\hat{f}$ . Говорят также, что оператор  $\hat{f}$  переводит вектор  $\Psi$  в вектор  $\hat{f}\Psi$ , или что  $\hat{f}\Psi$  есть результат действия  $\hat{f}$  на  $\Psi$ . Оператор  $\hat{f}$  называется *линейным*, если для любых векторов  $\Psi_1, \Psi_2$  и любых комплексных постоянных  $c_1, c_2$  справедливо равенство

$$\hat{f}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{f}\Psi_1 + c_2\hat{f}\Psi_2. \quad (7.1)$$

Определим *произведение оператора  $\hat{f}$  на комплексное число  $c$* . Обозначив это произведение через  $c\hat{f}$ , зададим его действие на произвольный вектор  $\Psi$  равенством

$$(c\hat{f})\Psi = c(\hat{f}\Psi). \quad (7.2)$$

Далее, *суммой двух операторов  $\hat{f}_1, \hat{f}_2$*  назовем оператор  $\hat{f}_1 + \hat{f}_2$ , действие которого на любой  $\Psi$  определено согласно

$$(\hat{f}_1 + \hat{f}_2)\Psi = \hat{f}_1\Psi + \hat{f}_2\Psi. \quad (7.3)$$

Наконец, *произведением двух операторов  $\hat{f}_1, \hat{f}_2$*  назовем оператор  $\hat{f}_1\hat{f}_2$ , действие которого на произвольный вектор  $\Psi$  определяется как результат последовательного действия на него операторов  $\hat{f}_1, \hat{f}_2$ :

$$(\hat{f}_1\hat{f}_2)\Psi = \hat{f}_1(\hat{f}_2\Psi). \quad (7.4)$$

Если для данного оператора  $\hat{f}$  существует такой оператор  $\hat{f}^{-1}$ , что для любого  $\Psi$  выполняются тождества

$$\hat{f}\hat{f}^{-1}\Psi = \Psi, \quad (7.5)$$

$$\hat{f}^{-1}\hat{f}\Psi = \Psi, \quad (7.6)$$

то говорят, что оператор  $\hat{f}^{-1}$  является *обратным* оператору  $\hat{f}$ . Ввиду произвольности  $\Psi$ , определение (7.5), (7.6) можно переписать в операторном виде как

$$\hat{f}\hat{f}^{-1} = \hat{1}, \quad \hat{f}^{-1}\hat{f} = \hat{1},$$

где *единичный* оператор  $\hat{1}$  определен равенством

$$\hat{1}\Psi = \Psi.$$

Используя определения (7.2) – (7.4), можно строить суммы и произведения любого числа операторов, включая их “отрицательные степени” (при условии существования обратных операторов).

Заметим, что из определения (7.3) следует, что  $\hat{f}_1 + \hat{f}_2 = \hat{f}_2 + \hat{f}_1$ . Действительно,

$$(\hat{f}_1 + \hat{f}_2)\Psi = \hat{f}_1\Psi + \hat{f}_2\Psi = \hat{f}_2\Psi + \hat{f}_1\Psi = (\hat{f}_2 + \hat{f}_1)\Psi.$$

Другими словами, сумма операторов не зависит от их порядка, т.е. сложение операторов *коммутативно*. С другой стороны, умножение операторов, вообще говоря, не является коммутативным, т.е.  $\hat{f}_1\hat{f}_2 \neq \hat{f}_2\hat{f}_1$ . Разность  $\hat{f}_1\hat{f}_2 - \hat{f}_2\hat{f}_1$  называется *коммутатором* операторов  $\hat{f}_1, \hat{f}_2$  и обозначается через  $[\hat{f}_1, \hat{f}_2]$ :

$$[\hat{f}_1, \hat{f}_2] = \hat{f}_1\hat{f}_2 - \hat{f}_2\hat{f}_1.$$

Если  $[\hat{f}_1, \hat{f}_2] = 0$ , то говорят, что оператор  $\hat{f}_1$  коммутирует с оператором  $\hat{f}_2$ , или что операторы  $\hat{f}_1, \hat{f}_2$  являются коммутирующими.

**Пример 25.** Функции из пространства  $\mathcal{M}$ . Рассмотрим одномерное движение частицы, и пусть  $x$  обозначает ее декартову координату,  $x \in (-\infty, +\infty)$ . Конфигурационное пространство в этом случае – прямая  $x \in (-\infty, +\infty)$ . Функция  $\Psi_1(x) = 1$  однозначна, ограничена и дифференцируема любое число раз, следовательно,  $\Psi_1 \in \mathcal{M}$ . Функция  $\Psi_2(x) = x$  также однозначна и дифференцируема любое число раз, но не является ограниченной, т.к.  $|\Psi_2| \rightarrow \infty$  при  $x \rightarrow \pm\infty$ , поэтому  $\Psi_2 \notin \mathcal{M}$ . Далее, функция  $\Psi_3(x) = e^{-|x|}$  однозначна, ограничена и непрерывна, но ее производная имеет разрыв в точке  $x = 0$ , и потому  $\Psi_3 \notin \mathcal{M}$ . С функциями подобного типа мы будем иметь дело лишь в §8.3 и §8.6. Как мы увидим, в некотором ограниченном смысле такие негладкие функции все же можно включать в множество  $\mathcal{M}$ . Наконец, функция  $\Psi_4(x) = e^{-x^2}$  однозначна, ограничена и имеет производные любого порядка, следовательно,  $\Psi_4 \in \mathcal{M}$ .

**Пример 26.** Линейные операторы. Рассмотрим снова одномерное движение частицы по оси  $x$ . Пусть  $U(x)$  – обычная функция переменной  $x$ , удовлетворяющая тем же условиям, что и функции из  $\mathcal{M}$ . Определим оператор  $\hat{U}$  формулой

$$(\hat{U}\Psi)(x) = U(x)\Psi(x), \quad (7.7)$$

где  $\Psi$  – произвольный вектор. Оператор  $\hat{U}$  является линейным. Действительно, для произвольных комплексных чисел  $c_1, c_2$  и произвольных векторов  $\Psi_1, \Psi_2$  имеем по определению (7.7)

$$\begin{aligned} (\hat{U}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2))(x) &= U(x)(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)(x) = c_1U(x)\Psi_1(x) + c_2U(x)\Psi_2(x) \\ &= c_1(\hat{U}\Psi_1)(x) + c_2(\hat{U}\Psi_2)(x), \end{aligned} \quad (7.8)$$

или, опуская аргумент  $x$  в обозначении векторов,

$$\hat{U}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{U}\Psi_1 + c_2\hat{U}\Psi_2,$$

что в соответствии с определением (7.1) и означает линейность оператора  $\hat{U}$ .

Определим, далее, оператор  $\hat{T}_a$  формулой

$$(\hat{T}_a\Psi)(x) = \Psi(x + a),$$

где  $a$  – вещественное число. Поскольку действие оператора  $\hat{T}_a$  на функцию  $\Psi(x)$  сводится к прибавлению числа  $a$  к ее аргументу, его называют *оператором сдвига на расстояние  $a$* . Имеем

$$\begin{aligned} (\hat{T}_a(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2))(x) &= (c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)(x + a) = c_1\Psi_1(x + a) + c_2\Psi_2(x + a) \\ &= c_1(\hat{T}_a\Psi_1)(x) + c_2(\hat{T}_a\Psi_2)(x), \end{aligned}$$

или

$$\hat{T}_a(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{T}_a\Psi_1 + c_2\hat{T}_a\Psi_2.$$

Итак, по определению (7.1) оператор  $\hat{T}_a$  является линейным.

Наконец, определим *оператор инверсии*  $\hat{P}$  формулой

$$(\hat{P}\Psi)(x) = \Psi(-x).$$

Этот оператор также является линейным, поскольку

$$\begin{aligned} \left( \hat{P}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) \right) (x) &= (c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)(-x) = c_1\Psi_1(-x) + c_2\Psi_2(-x) \\ &= c_1(\hat{P}\Psi_1)(x) + c_2(\hat{P}\Psi_2)(x). \end{aligned}$$

Приведем примеры операторов, не являющихся линейными. Пусть действие оператора  $\hat{C}$  на функцию  $\Psi$  задается формулой

$$(\hat{C}\Psi)(x) = \{\Psi(x)\}^*.$$

Поскольку вещественный аргумент функции  $\Psi(x)$  при действии оператора  $\hat{C}$  не изменяется, это определение можно записать короче так

$$\hat{C}\Psi = \Psi^*.$$

Имеем

$$\hat{C}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = (c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)^* = c_1^*\Psi_1^* + c_2^*\Psi_2^* = c_1^*\hat{C}\Psi_1 + c_2^*\hat{C}\Psi_2.$$

Таким образом,

$$\hat{C}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) \neq c_1\hat{C}\Psi_1 + c_2\hat{C}\Psi_2,$$

и следовательно, оператор  $\hat{C}$  не является линейным. Оператор  $\hat{A}$ , определенный согласно

$$\hat{A}\Psi = \Psi^2,$$

также не является линейным, т.к.

$$\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = (c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)^2 = c_1^2\Psi_1^2 + 2c_1c_2\Psi_1\Psi_2 + c_2^2\Psi_2^2 \neq c_1\Psi_1^2 + c_2\Psi_2^2.$$

**Пример 27.** Обратные операторы, произведения операторов и их коммутаторы. Вычислим операторы, обратные операторам, определенным в предыдущем примере. В соответствии с (7.5) оператор  $\hat{T}_a^{-1}$  удовлетворяет соотношению

$$(\hat{T}_a\hat{T}_a^{-1}\Psi)(x) = \Psi(x).$$

С учетом определения произведения операторов и определения самого оператора  $\hat{T}_a$  находим

$$(\hat{T}_a\hat{T}_a^{-1}\Psi)(x) = (\hat{T}_a(\hat{T}_a^{-1}\Psi))(x) = (\hat{T}_a^{-1}\Psi)(x+a) = \Psi(x).$$

Поскольку переменная  $x$  может принимать любые значения, мы можем положить  $x = y - a$ , где  $y$  также произвольно, что дает

$$(\hat{T}_a^{-1}\Psi)(y) = \Psi(y-a) = (\hat{T}_{-a}\Psi)(y).$$

Поскольку это соотношение справедливо для любого вектора  $\Psi$ , его можно переписать в операторном виде

$$\hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_{-a}.$$

Нетрудно проверить, что найденный оператор удовлетворяет также уравнению (7.6), второму из уравнений, определяющих обратный оператор:

$$(\hat{T}_a^{-1}\hat{T}_a\Psi)(x) = (\hat{T}_a^{-1}(\hat{T}_a\Psi))(x) = (\hat{T}_a\Psi)(x-a) = \Psi(x).$$

Найдем теперь оператор  $\hat{P}^{-1}$ . Имеем

$$(\hat{P}\hat{P}^{-1}\Psi)(x) = (\hat{P}(\hat{P}^{-1}\Psi))(x) = (\hat{P}^{-1}\Psi)(-x) = \Psi(x).$$

Полагая здесь  $x = -y$ , получаем

$$(\hat{P}^{-1}\Psi)(y) = \Psi(-y) = (\hat{P}\Psi)(y).$$

Таким образом, оператор инверсии совпадает со своим обратным  $\hat{P}^{-1} = \hat{P}$ . Аналогично, оператор  $\hat{C}^{-1} = \hat{C}$ , поскольку

$$\hat{C}\hat{C}^{-1}\Psi = \hat{C}(\hat{C}^{-1}\Psi) = (\hat{C}^{-1}\Psi)^* = \Psi,$$

откуда взятием комплексного сопряжения обеих частей заключаем, что

$$\hat{C}^{-1}\Psi = \Psi^* = \hat{C}\Psi.$$

Поскольку операторы  $\hat{P}, \hat{C}$  совпадают со своими обратными, для них уравнение (7.6) является следствием (7.5) и потому удовлетворяется автоматически.

Оператор  $\hat{A}$  дает пример оператора, у которого не существует обратного. Действительно, допустим, что мы определили действие оператора  $\hat{A}^{-1}$  на произвольный вектор  $\Psi$  так, что он удовлетворяет соотношению (7.5). Тогда в соответствии с уравнением (7.6) должно быть

$$\hat{A}^{-1}\hat{A}\Psi = \hat{A}^{-1}(\hat{A}\Psi) = \hat{A}^{-1}(\Psi^2) = \Psi.$$

Поскольку вектор  $\Psi$  произволен, мы можем заменить здесь  $\Psi \rightarrow -\Psi$ , что дает

$$\hat{A}^{-1}(\Psi^2) = -\Psi.$$

Таким образом, действие оператора  $\hat{A}^{-1}$  оказывается на самом деле неоднозначным, т.е. обратный оператор для  $\hat{A}$  не определен.

Вычислим, далее, произведение операторов сдвига и инверсии:

$$(\hat{P}\hat{T}_a\Psi)(x) = (\hat{P}(\hat{T}_a\Psi))(x) = (\hat{T}_a\Psi)(-x) = \Psi(-x + a).$$

Однако действие этих операторов в обратном порядке дает иной результат

$$(\hat{T}_a\hat{P}\Psi)(x) = (\hat{T}_a(\hat{P}\Psi))(x) = (\hat{P}\Psi)(x + a) = \Psi(-x - a) = (\hat{P}\hat{T}_{-a}\Psi)(x).$$

Таким образом, операторы сдвига и инверсии не коммутативны. В силу произвольности вектора  $\Psi$  последнее соотношение можно переписать в операторном виде как

$$\hat{T}_a\hat{P} = \hat{P}\hat{T}_{-a}.$$

С другой стороны, операторы  $\hat{T}_a, \hat{P}$  коммутируют с оператором  $\hat{C}$ :

$$\begin{aligned} (\hat{C}\hat{T}_a\Psi)(x) &= (\hat{C}(\hat{T}_a\Psi))(x) = \{(\hat{T}_a\Psi)(x)\}^* = \{\Psi(x + a)\}^* = \Psi^*(x + a) \\ &= (\hat{T}_a\Psi^*)(x) = (\hat{T}_a(\hat{C}\Psi))(x) = (\hat{T}_a\hat{C}\Psi)(x), \end{aligned}$$

так что

$$[\hat{C}, \hat{T}_a] = 0.$$

Аналогично,

$$\begin{aligned} (\hat{C}\hat{P}\Psi)(x) &= (\hat{C}(\hat{P}\Psi))(x) = \{(\hat{P}\Psi)(x)\}^* = \{\Psi(-x)\}^* = \Psi^*(-x) \\ &= (\hat{P}\Psi^*)(x) = (\hat{P}(\hat{C}\Psi))(x) = (\hat{P}\hat{C}\Psi)(x), \end{aligned}$$

откуда

$$[\hat{C}, \hat{P}] = 0.$$

## §7.2. Эрмитовы операторы

## А. Скалярное произведение и пространство состояний

Возьмем два вектора  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  из  $\mathcal{M}$  и рассмотрим следующий интеграл, взятый по всему конфигурационному пространству системы,

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int d\tau \Psi_1^* \Psi_2. \quad (7.9)$$

Если этот интеграл существует, то он называется *скалярным произведением* векторов  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ . Если  $(\Psi_1, \Psi_2) = 0$ , то векторы  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  называются *ортогональными*.

Перечислим теперь основные свойства скалярного произведения, которыми мы будем часто пользоваться в дальнейшем.

**Свойства скалярного произведения**

1.  $(\Psi_1, \Psi_2) = (\Psi_2, \Psi_1)^*$ .

2. (линейность по второму аргументу)

$$(\Psi, c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2) = c_1 (\Psi, \Psi_1) + c_2 (\Psi, \Psi_2).$$

3. (антILINEЙНОСТЬ по первому аргументу)

$$(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2, \Psi) = c_1^* (\Psi_1, \Psi) + c_2^* (\Psi_2, \Psi).$$

4.  $(\Psi, \Psi) \geq 0$  для любого  $\Psi$ , причем  $(\Psi, \Psi) = 0$  тогда и только тогда, когда  $\Psi = 0$ .

Первые три свойства следуют непосредственно из определения скалярного произведения. Докажем свойство 4. Во-первых,  $(\Psi, \Psi) = \int d\tau |\Psi|^2 \geq 0$ , поскольку  $|\Psi|^2 \geq 0$ . Далее, если  $\Psi = 0$ , то и  $\int d\tau |\Psi|^2 = 0$ . Обратно, пусть  $\int d\tau |\Psi|^2 = 0$ . Поскольку функция  $|\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)|^2$  непрерывна и неотрицательна, то должно быть  $|\Psi|^2 = 0$ , и, следовательно,  $\Psi = 0$  (т.е. функция  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  равна нулю тождественно).

Выделим из множества всех функций на конфигурационном пространстве те, для которых скалярный квадрат  $(\Psi, \Psi) = \int d\tau |\Psi|^2$  существует. Поскольку функция  $|\Psi|^2$  непрерывна и неотрицательна, то интеграл от нее существует, только если она достаточно быстро убывает при стремлении аргументов  $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$  (некоторых из них или всех сразу) к бесконечности:

$$|\Psi|^2 \rightarrow 0, \quad \{\mathbf{r}_i\} \rightarrow \infty.$$

Пусть даны две функции  $\Psi_1, \Psi_2$ , удовлетворяющие этому условию, т.е. такие, что числа  $(\Psi_1, \Psi_1)$  и  $(\Psi_2, \Psi_2)$  конечны. Покажем, что и любая их линейная комбинация  $c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$  также имеет конечный скалярный квадрат. Мы имеем в силу свойств 2,3 скалярного произведения

$$(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2, c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2) = |c_1|^2 (\Psi_1, \Psi_1) + |c_2|^2 (\Psi_2, \Psi_2) + c_1^* c_2 (\Psi_1, \Psi_2) + c_1 c_2^* (\Psi_2, \Psi_1).$$

Первые два слагаемых существуют по предположению. Для того чтобы доказать конечность остальных двух скалярных произведений, рассмотрим линейную комбинацию

частного вида, а именно, положим в последней формуле  $c_1 = (\Psi_2, \Psi_2)$ ,  $c_2 = -(\Psi_2, \Psi_1)$ . Учитывая свойство 4 скалярного произведения, находим

$$|(\Psi_2, \Psi_2)|^2(\Psi_1, \Psi_1) + |(\Psi_2, \Psi_1)|^2(\Psi_2, \Psi_2) - (\Psi_2, \Psi_2)^*(\Psi_2, \Psi_1)(\Psi_1, \Psi_2) - (\Psi_2, \Psi_2)|(\Psi_2, \Psi_1)|^2 \geq 0,$$

или, учитывая свойство 1 и сокращая на  $(\Psi_2, \Psi_2) \neq 0$ ,

$$|(\Psi_1, \Psi_2)|^2 \leq (\Psi_1, \Psi_1)(\Psi_2, \Psi_2).$$

Из этого неравенства (называемого обычно *неравенством Шварца*) и следует конечность  $(\Psi_1, \Psi_2)$ , а потому и скалярного квадрата  $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$  при любых  $c_1, c_2$ . Таким образом, вместе с векторами  $\Psi_1, \Psi_2$  имеет конечный скалярный квадрат и любая их линейная комбинация, и поэтому множество таких функций само по себе образует векторное пространство (*подпространство* исходного пространства  $\mathcal{M}$ ). Обозначим это пространство через  $\mathcal{S}$  и назовем *пространством состояний* системы, а его векторы – *векторами состояния* системы. Как мы только что видели, для любой пары векторов из этого пространства существует их скалярное произведение. Однако не следует думать, что скалярные произведения существуют лишь для векторов из  $\mathcal{S}$ . Как будет показано в §7.4С, существуют и имеют важный физический смысл также и некоторые из скалярных произведений вида  $(\Psi, \Psi')$ , где вектор  $\Psi \in \mathcal{S}$ , но  $\Psi' \notin \mathcal{S}$ .

### В. Эрмитово сопряжение

Если для данного оператора  $\hat{f}$  существует такой оператор  $\hat{f}^+$ , что для любых векторов  $\Psi_1, \Psi_2$ , для которых определено скалярное произведение  $(\Psi_1, \hat{f}\Psi_2)$ , выполняется равенство

$$(\Psi_1, \hat{f}\Psi_2) = (\hat{f}^+\Psi_1, \Psi_2), \quad (7.10)$$

то оператор  $\hat{f}^+$  называют *эрмитово-сопряженным* оператору  $\hat{f}$ , а саму операцию, обозначаемую крестиком – *эрмитовым сопряжением*. Заметим, что соотношением (7.10) эрмитово-сопряженный оператор определяется не полностью, поскольку в нем  $\hat{f}^+$  действует не на произвольный вектор, а лишь на такой, для которого существует  $(\Psi_1, \hat{f}\Psi_2)$ . Для нас, однако, это обстоятельство будет несущественно. В дальнейшем соотношение (7.10) будет использоваться только в тех случаях, когда операторы действуют не на произвольные векторы, а лишь на векторы из пространства состояний, причем переводят их в векторы из того же пространства. Покажем теперь, что с таким ограничением эрмитово-сопряженный оператор определен однозначно. Предположим противное, и пусть  $\hat{f}^+, (\hat{f}^+)'$  – два оператора, удовлетворяющие определению (7.10):

$$(\Psi_1, \hat{f}\Psi_2) = (\hat{f}^+\Psi_1, \Psi_2), \quad (\Psi_1, \hat{f}\Psi_2) = ((\hat{f}^+)' \Psi_1, \Psi_2).$$

Вычитая второе уравнение из первого и используя свойство 3 скалярного произведения, получим

$$(\hat{f}^+\Psi_1 - (\hat{f}^+)' \Psi_1, \Psi_2) = 0.$$

Это равенство справедливо для любого  $\Psi_2 \in \mathcal{S}$ , и в частности, для  $\Psi_2 = \hat{f}^+\Psi_1 - (\hat{f}^+)' \Psi_1$  (по предположению все операторы оставляют  $\Psi_1$  в пространстве состояний, а потому  $\hat{f}^+\Psi_1 - (\hat{f}^+)' \Psi_1$  также принадлежит этому пространству). Итак, мы получаем, что

$$(\Psi_2, \Psi_2) = 0.$$

Ввиду свойства 4 скалярного произведения это возможно, только если  $\Psi_2 = 0$ , откуда  $\hat{f}^+\Psi_1 = (\hat{f}^+)'\Psi_1$ . Таким образом, действия операторов  $\hat{f}^+$ ,  $(\hat{f}^+)'$  на векторы из пространства состояний совпадают. Мы будем ссылаться на этот результат как на *единственность эрмитово-сопряженного оператора*, подразумевая при этом сделанную выше оговорку об области его определения.

Если для оператора  $\hat{f}$  выполняется равенство

$$(\Psi_1, \hat{f}\Psi_2) = (\hat{f}\Psi_1, \Psi_2), \quad (7.11)$$

то оператор  $\hat{f}$  называют *эрмитовым*. Из сравнения равенств (7.10), (7.11) и единственности эрмитово-сопряженного оператора следует операторное равенство

$$\hat{f}^+ = \hat{f}.$$

Выведем основные правила работы с операцией эрмитового сопряжения. Во-первых, комплексно сопрягая обе части (7.10), используя свойство 1 скалярного произведения и затем еще раз применяя определение (7.10), найдем

$$(\hat{f}\Psi_2, \Psi_1) = (\Psi_2, \hat{f}^+\Psi_1) = ((\hat{f}^+)^+\Psi_2, \Psi_1),$$

откуда ввиду единственности эрмитово-сопряженного оператора следует, что

$$(\hat{f}^+)^+ = \hat{f}.$$

Далее, рассмотрим эрмитово сопряжение суммы операторов  $\hat{f}_1 + \hat{f}_2$ . Имеем, по определению (7.10),

$$(\Psi_1, (\hat{f}_1 + \hat{f}_2)\Psi_2) = ((\hat{f}_1 + \hat{f}_2)^+\Psi_1, \Psi_2). \quad (7.12)$$

Левую часть можно преобразовать, используя определение суммы операторов, свойства 2,3 скалярного произведения и определение (7.10)

$$\begin{aligned} (\Psi_1, (\hat{f}_1 + \hat{f}_2)\Psi_2) &= (\Psi_1, \hat{f}_1\Psi_2 + \hat{f}_2\Psi_2) = (\Psi_1, \hat{f}_1\Psi_2) + (\Psi_1, \hat{f}_2\Psi_2) \\ &= (\hat{f}_1^+\Psi_1, \Psi_2) + (\hat{f}_2^+\Psi_1, \Psi_2) = (\hat{f}_1^+\Psi_1 + \hat{f}_2^+\Psi_1, \Psi_2) = ((\hat{f}_1^+ + \hat{f}_2^+)\Psi_1, \Psi_2) \end{aligned}$$

Сравнивая последнее выражение с правой частью равенства (7.12) и учитывая единственность эрмитово-сопряженного оператора, видим, что

$$(\hat{f}_1 + \hat{f}_2)^+ = \hat{f}_1^+ + \hat{f}_2^+, \quad (7.13)$$

т.е. эрмитово сопряжение суммы операторов есть сумма эрмитово-сопряженных операторов. Наконец, выведем правило эрмитова сопряжения произведения операторов  $\hat{f}_1\hat{f}_2$ . По определению,

$$(\Psi_1, (\hat{f}_1\hat{f}_2)\Psi_2) = ((\hat{f}_1\hat{f}_2)^+\Psi_1, \Psi_2). \quad (7.14)$$

Используя определение произведения операторов и определение (7.10), преобразуем левую часть следующим образом

$$(\Psi_1, (\hat{f}_1\hat{f}_2)\Psi_2) = (\Psi_1, \hat{f}_1(\hat{f}_2\Psi_2)) = (\hat{f}_1^+\Psi_1, \hat{f}_2\Psi_2) = (\hat{f}_2^+(\hat{f}_1^+\Psi_1), \Psi_2) = ((\hat{f}_2^+\hat{f}_1^+)\Psi_1, \Psi_2).$$

Сравнивая это выражение с правой частью (7.14) и учитывая единственность эрмитово-сопряженного оператора, заключаем, что

$$(\hat{f}_1 \hat{f}_2)^+ = \hat{f}_2^+ \hat{f}_1^+, \quad (7.15)$$

т.е. эрмитово сопряжение произведения операторов равно произведению их эрмитово-сопряженных операторов в обратном порядке.

Полезно также иметь в виду формулу

$$(c\hat{f})^+ = c^* \hat{f}^+, \quad (7.16)$$

где  $c$  – любое комплексное число. Она выводится из определения (7.10) и свойств 2,3 скалярного произведения с помощью следующей цепочки равенств

$$((c\hat{f})^+ \Psi_1, \Psi_2) = (\Psi_1, c\hat{f}\Psi_2) = (\Psi_1, \hat{f}\Psi_2)c = c(\hat{f}^+ \Psi_1, \Psi_2) = (c^* \hat{f}^+ \Psi_1, \Psi_2).$$

**Пример 28.** Отыскание эрмитово-сопряженных операторов. Для того чтобы из уравнения (7.10), определяющего эрмитово-сопряженный оператор, найти его явный вид, следует использовать явные определения скалярного произведения и оператора  $\hat{f}$  и преобразовать левую часть этого уравнения к такому виду, в котором вектор  $\Psi_2$  не затрагивается никаким действием. Тогда, учитывая единственность эрмитово-сопряженного оператора, можно будет уже найти явный вид  $\hat{f}^+$ . Проиллюстрируем эту процедуру на примере операторов сдвига и инверсии из примера 26. Мы имеем

$$\begin{aligned} (\Psi_1, \hat{T}_a \Psi_2) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_1^*(x) (\hat{T}_a \Psi_2)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_1^*(x) \Psi_2(x+a) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \Psi_1^*(y-a) \Psi_2(y) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left( \hat{T}_{-a} \Psi_1 \right)^*(y) \Psi_2(y), \end{aligned} \quad (7.17)$$

или

$$(\Psi_1, \hat{T}_a \Psi_2) = (\hat{T}_{-a} \Psi_1, \Psi_2).$$

Сравнивая это равенство с определением (7.10), находим

$$\hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}.$$

Аналогично вычисляется эрмитово сопряжение для оператора инверсии:

$$\begin{aligned} (\Psi_1, \hat{P} \Psi_2) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_1^*(x) (\hat{P} \Psi_2)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_1^*(x) \Psi_2(-x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \Psi_1^*(-y) \Psi_2(y) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left( \hat{P} \Psi_1 \right)^*(y) \Psi_2(y) = (\hat{P} \Psi_1, \Psi_2). \end{aligned} \quad (7.18)$$

Отсюда

$$\hat{P}^+ = \hat{P},$$

т.е. оператор инверсии является эрмитовым оператором.

### §7.3. Постулаты квантовой механики

Сформулируем теперь постулаты квантовой механики.

- I. В каждый момент времени  $t$  состояние системы описывается некоторой функцией  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ , принадлежащей пространству состояний и называемой *волновой функцией*. Квадрат ее модуля определяет плотность распределения вероятностей координат частиц. Именно, величина

$$w(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)d\tau = \frac{|\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 d\tau}{(\Psi, \Psi)} \quad (7.19)$$

есть вероятность того, что при измерении координат частиц в момент времени  $t$  координаты  $i$ -ой частицы будут лежать в интервале  $(x_i, x_i + dx_i)$ ,  $(y_i, y_i + dy_i)$ ,  $(z_i, z_i + dz_i)$  для всех  $i = 1, \dots, N$ .

- II. (*принцип суперпозиции*) Если каждая из функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  описывает возможное состояние системы, то и любая их суперпозиция, т.е., линейная комбинация вида

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 \quad (7.20)$$

с произвольными комплексными постоянными  $c_1, c_2$  также описывает некоторое возможное её состояние ( $c_1, c_2$  не равны нулю одновременно).

- III. Каждой физической величине  $f$  сопоставляется эрмитов оператор  $\hat{f}$  по следующему правилу: классическую величину  $f$  следует выразить как функцию координат  $\mathbf{r}_i$  и обобщенных декартовых импульсов  $\mathbf{p}_i$  частиц (и времени), и затем заменить аргументы  $\mathbf{p}_i$  на операторы  $\hat{\mathbf{p}}_i$  по правилам (7.2) – (7.4)

$$\hat{f} = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)|_{\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}}}.$$

При этом действие операторов обобщенных декартовых импульсов частиц на произвольный вектор  $\Psi \in \mathcal{M}$  определяется формулой

$$(\hat{\mathbf{p}}_i \Psi)(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad i = 1, \dots, N.$$

Среднее значение величины  $f$  в состоянии, описываемом волновой функцией  $\Psi$ , вычисляется по правилу

$$\bar{f} = \frac{(\Psi, \hat{f}\Psi)}{(\Psi, \Psi)}. \quad (7.21)$$

- IV. Эволюция во времени волновой функции определяется уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad (7.22)$$

в котором  $\hat{H}$  есть оператор обобщенной энергии системы.

**Пояснения и обсуждение постулатов.**

- А.** *К постулатам I-III:* Как видно из формул (7.19), (7.21), скалярный квадрат вектора  $\Psi$  должен быть не только конечен, но и отличен от нуля, т.е. вектор  $\Psi$  должен быть ненулевым. Такие векторы и соответствующие им функции называются *нормируемыми*, а интеграл  $\int d\tau |\Psi|^2$  – *нормировочным интегралом*. Функции, для которых нормировочный интеграл равен единице, называются *нормированными*.
- В.** *К постулату I:* соотношение (7.19) задает распределение вероятностей для всех возможных значений координат всех частиц. Если требуется найти распределение вероятностей для какого-либо подмножества из полного набора  $3N$  координат  $\mathbf{r}_i, i = 1, \dots, N$ , то, согласно правилам теории вероятностей, следует проинтегрировать вероятность (7.19) по всем координатам, не входящим в данное подмножество. Например, распределение вероятностей для координат первой частицы будет

$$w(\mathbf{r}_1, t) dx_1 dy_1 dz_1 = \frac{1}{(\Psi, \Psi)} dx_1 dy_1 dz_1 \int \prod_{i=2}^N dx_i dy_i dz_i |\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2. \quad (7.23)$$

Далее, распределение вероятностей для координаты  $y$  первой частицы запишется в виде

$$\begin{aligned} w(y_1, t) dy_1 &= dy_1 \int dx_1 dz_1 w(\mathbf{r}_1, t) \\ &= \frac{1}{(\Psi, \Psi)} dy_1 \int dx_1 dz_1 \prod_{i=2}^N dx_i dy_i dz_i |\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 \end{aligned} \quad (7.24)$$

и т.д.

- С.** *К постулату III:* может возникнуть вопрос, почему при построении оператора физической величины только обобщенные импульсы, но не координаты частиц, заменяются операторами. Дело просто в том, что действие оператора любой координаты сводится к умножению на эту координату. Это следует непосредственно из постулатов I и III. Возьмем, например, координату  $y_1$ . Как известно из теории вероятностей, среднее значение какой-либо величины есть сумма произведений значений, которые она может принимать, умноженных на вероятности их обнаружить. Согласно замечанию **В**, вероятность обнаружить  $y_1$  в интервале  $(y_1, y_1 + dy_1)$  дается формулой (7.24), а сумма по всем таким интервалам есть интеграл по  $dy_1$ . Поэтому

$$\begin{aligned} \bar{y}_1 &= \int dy_1 y_1 w(y_1, t) = \frac{1}{(\Psi, \Psi)} \int dy_1 y_1 \int dx_1 dz_1 \prod_{i=2}^N dx_i dy_i dz_i |\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 \\ &= \frac{1}{(\Psi, \Psi)} \int d\tau y_1 |\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 = \frac{1}{(\Psi, \Psi)} \int d\tau \Psi^* y_1 \Psi. \end{aligned} \quad (7.25)$$

С другой стороны, в соответствии с постулатом III,

$$\bar{y}_1 = \frac{1}{(\Psi, \Psi)} \int d\tau \Psi^* \hat{y}_1 \Psi.$$

Сравнивая эту формулу с последним выражением в (7.25), находим  $\hat{y}_1\Psi = y_1\Psi$ . Другими словами, действие оператора  $\hat{y}_1$  сводится просто к умножению на  $y_1$ . Аналогично, для любой из компонент  $\mathbf{r}_i$

$$\hat{\mathbf{r}}_i\Psi = \mathbf{r}_i\Psi. \quad (7.26)$$

Соответственно, действие оператора любой величины, являющейся функцией координат частиц, например, потенциальной энергии системы, сводится к умножению на эту функцию

$$(\hat{U}\Psi)(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N).$$

**Д.** *К постулату III*: В соответствии с этим постулатом каждой физической величине сопоставляется эрмитов оператор. Эрмитовость операторов обеспечивает вещественность средних значений физических величин. Действительно, поскольку величина  $(\Psi, \Psi)$  вещественна, то условие вещественности среднего значения

$$(\bar{f})^* = \bar{f}$$

с учетом свойства 1 скалярного произведения сводится к

$$(\Psi, \hat{f}\Psi) = (\hat{f}\Psi, \Psi). \quad (7.27)$$

Если  $\hat{f}$  эрмитов, то равенство (7.27) следует из определения эрмитова сопряжения (7.11), в котором надо положить  $\Psi_1 = \Psi_2 = \Psi$ . Покажем теперь, что операторы физических величин обязательно являются эрмитовыми, т.е. что эрмитовость следует из условия (7.27) вещественности средних значений. Непосредственно из этого равенства нельзя пока заключить, что  $\hat{f}$  является эрмитовым оператором, поскольку в определении (7.10) участвуют два произвольных вектора  $\Psi_1, \Psi_2$ . Однако, используя линейность оператора  $\hat{f}$ , можно получить необходимое обобщение равенства (7.27). Для этого применим условие (7.27) к вектору  $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$ , где  $\Psi_1, \Psi_2$  произвольны. Используя определение (7.1) и свойства 2,3 скалярного произведения, найдем

$$\begin{aligned} & (\Psi_1, \hat{f}\Psi_1) + (\Psi_1, \hat{f}\Psi_2) + (\Psi_2, \hat{f}\Psi_1) + (\Psi_2, \hat{f}\Psi_2) \\ &= (\hat{f}\Psi_1, \Psi_1) + (\hat{f}\Psi_1, \Psi_2) + (\hat{f}\Psi_2, \Psi_1) + (\hat{f}\Psi_2, \Psi_2), \end{aligned}$$

или, с учетом равенства (7.27) для векторов  $\Psi_1, \Psi_2$ ,

$$(\Psi_1, \hat{f}\Psi_2) + (\Psi_2, \hat{f}\Psi_1) = (\hat{f}\Psi_1, \Psi_2) + (\hat{f}\Psi_2, \Psi_1). \quad (7.28)$$

Продельвая те же самые действия с вектором  $\Psi = \Psi_1 + i\Psi_2$ , мы получили бы

$$(\Psi_1, \hat{f}\Psi_2) - (\Psi_2, \hat{f}\Psi_1) = (\hat{f}\Psi_1, \Psi_2) - (\hat{f}\Psi_2, \Psi_1). \quad (7.29)$$

Знак здесь чередуется потому, что  $i^* = -i$ , а скалярное произведение линейно по второму и антилинейно по первому аргументу. Складывая (7.28) с (7.29), приходим к равенству

$$(\Psi_1, \hat{f}\Psi_2) = (\hat{f}\Psi_1, \Psi_2). \quad (7.30)$$

Итак, в соответствии с определением (7.11) оператор  $\hat{f}$  является эрмитовым.

**Е.** *К постулату IV*: В соответствии с постулатом III, при построении оператора обобщенной энергии ее следует выразить через координаты и обобщенные импульсы частиц, т.е. построить функцию Гамильтона системы  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ . В связи с этим оператор  $\hat{H} = H(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}, t)$  называют *гамильтонианом* системы.

**Пример 29.** Функции из пространства  $\mathcal{S}$ . Рассмотрим одномерное движение частицы, и пусть  $x$  обозначает ее декартову координату,  $x \in (-\infty, +\infty)$ . Функция  $\Psi_5(x) = \sin x$  однозначна, ограничена и бесконечно-дифференцируема, поэтому  $\Psi_5 \in \mathcal{M}$ . Однако  $\Psi_5 \notin \mathcal{S}$ , поскольку

$$\int d\tau |\Psi_5|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sin^2 x = \infty.$$

Таким образом, эта функция не может представлять какое-либо состояние частицы на прямой  $x \in (-\infty, +\infty)$ . Далее, функция  $\Psi_4(x) = e^{-x^2}$  из примера 25 принадлежит пространству состояний, т.к. интеграл

$$\int d\tau |\Psi_4|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

конечен. Функция  $\Psi_6(x) = 1/\sqrt{1+x^2}$  однозначна, ограничена и дифференцируема любое число раз, а интеграл

$$\int d\tau |\Psi_6|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{1+x^2} = \pi$$

конечен, поэтому  $\Psi_6 \in \mathcal{S}$ . Функция  $\Psi_6(x)/\sqrt{\pi}$  является нормированной.

**Пример 30.** Эрмитовость операторов координат и импульсов. В соответствии с замечанием С операторы координат частиц сводятся к умножению на соответствующие переменные. Проверим, что они являются эрмитовыми. Для сокращения записи рассмотрим случай, когда имеется всего одна частица, и пусть  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  – ее радиус-вектор. Конфигурационным пространством является все трехмерное пространство. Пусть  $\Psi_1, \Psi_2$  – два произвольных вектора состояния частицы. Тогда, используя явную формулу (7.9) для скалярного произведения, формулу (7.26) и учитывая вещественность координат, найдем

$$(\Psi_1, \hat{\mathbf{r}}\Psi_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy dz \Psi_1^* \mathbf{r} \Psi_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy dz (\mathbf{r} \Psi_1)^* \Psi_2 = (\hat{\mathbf{r}}\Psi_1, \Psi_2).$$

Сравнение с определением (7.11) показывает, что оператор  $\hat{\mathbf{r}}$  – эрмитов. Проверим теперь, что оператор обобщенного импульса частицы также является эрмитовым. Здесь уже приходится действовать покомпонентно, интегрируя по частям:

$$\begin{aligned} (\Psi_1, \hat{p}_x \Psi_2) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy dz \Psi_1^* \left( -i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} \right) \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dy dz \Psi_1^* \Psi_2 \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} + i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy dz \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} \Psi_2. \end{aligned}$$

Как мы знаем, функции, описывающие возможные состояния системы, стремятся к нулю, если хотя бы один из ее аргументов стремится к бесконечности. Поэтому первый член во

второй строке равен нулю, так что мы получаем

$$\begin{aligned} (\Psi_1, \hat{p}_x \Psi_2) &= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy dz \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} \Psi_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy dz \left( -i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} \right)^* \Psi_2 \\ &= (\hat{p}_x \Psi_1, \Psi_2). \end{aligned}$$

Аналогичным образом проверяется эрмитовость двух других компонент. Таким образом,  $\hat{p}^+ = \hat{p}$ .

**Пример 31.** Коммутаторы операторов координат и импульсов. Поскольку действие операторов координат частицы сводятся к умножению на соответствующие координаты, то все они коммутируют друг с другом, например,  $(\hat{x}\hat{y})\Psi = \hat{x}(\hat{y}\Psi) = \hat{x}(y\Psi) = xy\Psi = yx\Psi = \hat{y}(x\Psi) = \hat{y}(\hat{x}\Psi) = (\hat{y}\hat{x})\Psi$ , т.е.  $(\hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x})\Psi = [\hat{x}, \hat{y}]\Psi = 0$ , или, в операторном виде,  $[\hat{x}, \hat{y}] = 0$ . Аналогично найдем для всех частиц системы

$$[\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0, \quad i, j = 1, \dots, N.$$

Коммутируют также операторы разноименных компонент радиус-векторов и обобщенных импульсов, а также операторы, относящиеся к различным частицам:

$$[\hat{x}_1, \hat{p}_{y1}]\Psi = \left\{ x_1 \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y_1} \right) - \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y_1} \right) x_1 \right\} \Psi = -i\hbar x_1 \frac{\partial \Psi}{\partial y_1} + i\hbar \frac{\partial(x_1 \Psi)}{\partial y_1} = 0,$$

поскольку  $\partial x_1 / \partial y_1 = 0$  в силу независимости  $x, y$  компонент радиус-вектора первой частицы, и

$$[\hat{x}_1, \hat{p}_{x2}]\Psi = \left\{ x_1 \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} \right) - \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} \right) x_1 \right\} \Psi = -i\hbar x_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x_2} + i\hbar \frac{\partial(x_1 \Psi)}{\partial x_2} = 0,$$

поскольку  $\partial x_1 / \partial x_2 = 0$  в силу независимости компонент радиус-векторов первой и второй частиц. Однако, операторы одноименных компонент радиус-вектора и импульса одной и той же частицы *не* коммутируют:

$$\begin{aligned} [\hat{x}_1, \hat{p}_{x1}]\Psi &= \left\{ x_1 \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \right) - \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \right) x_1 \right\} \Psi = -i\hbar x_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x_1} + i\hbar \frac{\partial(x_1 \Psi)}{\partial x_1} \\ &= -i\hbar x_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x_1} + i\hbar \Psi \frac{\partial x_1}{\partial x_1} + i\hbar x_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x_1} = i\hbar \Psi. \end{aligned} \quad (7.31)$$

В силу произвольности  $\Psi$  это важное равенство можно переписать в операторном виде, опуская для краткости индекс 1

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \quad (7.32)$$

**Пример 32.** Гамильтониан линейного гармонического осциллятора. Функция Гамильтона гармонического осциллятора имеет вид (см. 15)

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (7.33)$$

Заменяя в ней  $p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ , получаем гамильтониан осциллятора

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (7.34)$$

В соответствии с формулой (7.4) квадрат оператора импульса записан как результат повторного действия этого оператора:

$$\hat{p}^2\Psi = \hat{p}(\hat{p}\Psi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left( -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2},$$

или, в операторном виде,

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

**Пример 33.** Оператор производной по времени физической величины. Согласно постулату III, для того чтобы найти оператор  $\hat{f}$ , соответствующий полной производной  $df/dt$  от данной величины  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ , следует сначала выразить  $df/dt$  через  $\mathbf{r}_i$  и  $\mathbf{p}_i$ . Это можно сделать с помощью уравнений Гамильтона, или используя явную формулу (5.15), а затем произвести обычную замену  $\mathbf{p}_i \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_i$ . Рассмотрим эту процедуру на примере одной частицы массы  $m$ , движущейся в потенциале  $U(\mathbf{r})$ . Функция Гамильтона частицы  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/(2m) + U(\mathbf{r})$ . Найдем  $\hat{\mathbf{r}}$ . Согласно уравнениям Гамильтона

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{m}.$$

Поэтому  $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{p}}/m = -i\hbar m^{-1}\partial/\partial \mathbf{r}$ . Аналогично, для производной обобщенного импульса имеем

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}},$$

и потому  $\hat{\mathbf{p}} = -\partial U/\partial \mathbf{r}$ . Наконец, ускорение частицы  $\ddot{\mathbf{r}} = \dot{\mathbf{p}}/m = -m^{-1}\partial U/\partial \mathbf{r}$ , откуда следуют “квантовые уравнения Ньютона”

$$m\hat{\mathbf{r}} = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}.$$

#### §7.4. Вычисление распределений вероятностей физических величин

В этом параграфе будет получено важное следствие постулата III, а именно, правило вычисления распределений вероятностей физических величин. Все рассмотрение относится к некоторому фиксированному моменту времени, и аргумент  $t$  у волновых функций будет для краткости опускаться.

##### *A. Собственные функции и собственные значения операторов. Теорема о разложении*

Рассмотрим  $n$ -мерное вещественное евклидово пространство, т.е. пространство векторов  $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_n)$  с вещественными компонентами, в котором для любой пары векторов

$\mathbf{a}, \mathbf{b}$  определено скалярное произведение  $(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^n a_i b_i$ . Если задана вещественная квадратная матрица  $M_{ik}$   $i, k = 1, \dots, n$ , то говорят, что вектор  $\mathbf{a}^{(m)} \neq 0$  является собственным для этой матрицы, если он удовлетворяет уравнению

$$\sum_{k=1}^n M_{ik} a_k^{(m)} = m a_i^{(m)}, \quad i = 1, \dots, n,$$

где  $m$  – некоторое комплексное число, называемое ее собственным значением. Как известно из курса линейной алгебры, если матрица  $M_{ik}$  симметрична, т.е.  $M_{ik} = M_{ki}$  для всех  $i, k = 1, \dots, n$ , то существует ровно  $n$  линейно-независимых собственных векторов этой матрицы, причем ее собственные значения вещественны, а собственные векторы, соответствующие различным собственным значениям, ортогональны (их скалярные произведения равны нулю). Поскольку  $n$  линейно-независимых векторов образуют базис в  $n$ -мерном пространстве, то любой вектор  $\mathbf{a}$  можно представить в виде линейной комбинации собственных векторов матрицы  $M$ , или, как говорят, разложить  $\mathbf{a}$  по  $\mathbf{a}^{(m)}$ :

$$\mathbf{a} = \sum c_m \mathbf{a}^{(m)},$$

где  $\{c_m\}$  есть набор из  $n$  вещественных чисел.

Вводимое в этом пункте понятие о собственных функциях и собственных значениях операторов является прямым обобщением соответствующих понятий линейной алгебры на бесконечномерный случай, каким является векторное пространство функций. Роль матриц играют операторы, причем обобщением вещественной симметричной матрицы в вещественном евклидовом пространстве является эрмитов оператор действующий в бесконечномерном пространстве комплексных функций.

Итак, пусть задан некоторый оператор  $\hat{f}$  и некоторое комплексное число  $f$ . Если уравнение

$$\hat{f}\Psi_f = f\Psi_f \quad (7.35)$$

имеет решение  $\Psi_f \in \mathcal{M}$ , причем  $\Psi_f \neq 0$ , то говорят, что  $\Psi_f$  является *собственной функцией* (или *собственным вектором*) оператора  $\hat{f}$ , а  $f$  – его *собственным значением*. Совокупность всех собственных значений оператора называют его *спектром*. В случае, когда одному и тому же собственному значению соответствует  $r > 1$  линейно-независимых собственных функций, собственное значение называют *вырожденным*, а  $r$  – *кратностью его вырождения*. Если все собственные значения оператора можно пронумеровать, то говорят, что этот оператор имеет *дискретный спектр*. В противном случае в спектре оператора имеются значения, целиком заполняющие некоторые области, называемые областями *непрерывного спектра*. Заметим сразу же, что нет никаких физических оснований ожидать, что собственные функции операторов будут описывать возможные состояния системы и, в частности, будут нормируемыми. Напротив, как мы увидим ниже, собственные функции, соответствующие собственным значениям из непрерывного спектра, с необходимостью являются ненормируемыми, и потому сами по себе не описывают никаких состояний системы. Нормируемость собственной функции представляет собой дополнительное условие, которое выделяет из непрерывного ряда возможных собственных значений некоторые определенные, при которых интеграл  $\int d\tau |\Psi_f|^2$  оказывается сходящимся (однако дискретность спектра еще не означает нормируемости собственных функций, т.е. она является лишь необходимым, но не достаточным условием нормируемости, см. пример 34). В

связи с данным определением собственной функции оператора необходимо сделать также следующее

**Замечание:** в случае оператора координаты условие  $\Psi_f \in \mathcal{M}$  является чересчур жестким. Действительно, поскольку оператор координаты  $\hat{q}$  есть умножение на  $q$ , то из уравнения

$$\hat{q}\Psi_{q_0} = q_0\Psi_{q_0}$$

следует, что собственная функция  $\Psi_{q_0}(q)$ , соответствующая собственному значению  $q_0$ , равна нулю при всех  $q \neq q_0$ , а ее значение при  $q = q_0$  не определено. Таким образом,  $\Psi_{q_0}(q) \notin \mathcal{M}$ . Оказывается, что собственные функции координат принадлежат более широкому классу, называемому в математике классом *обобщенных функций* ( $\Psi_{q_0}(q)$  есть так называемая  $\delta$ -функция Дирака). Указанное усложнение является по большей части формальным и несущественным с практической точки зрения, поскольку наиболее интересными в физических применениях являются собственные функции операторов величин, которые в тех или иных условиях сохраняются (энергия, импульс и т.д.). Для таких функций достаточно данного выше определения. Собственные же функции координат нам в дальнейшем не понадобятся.

Покажем, что собственные векторы  $\Psi_f$ , соответствующие различным собственным значениям  $f$ , линейно-независимы. Действительно, предположим противное, и пусть для каких-либо двух  $\Psi_f, \Psi_{f'}$  существует соотношение

$$c\Psi_f + c'\Psi_{f'} = 0 \tag{7.36}$$

с не равными нулю числами  $c, c'$ . Тогда, действуя на это соотношение оператором  $\hat{f}$ , мы получаем

$$\hat{f}(c\Psi_f + c'\Psi_{f'}) = c\hat{f}\Psi_f + c'\hat{f}\Psi_{f'} = cf\Psi_f + c'f'\Psi_{f'} = 0.$$

Умножая уравнение (7.36) на  $f'$  и вычитая его из последнего соотношения, находим

$$cf'\Psi_f - cf\Psi_f = 0.$$

Ввиду условий  $c \neq 0, f \neq f'$  отсюда следует  $\Psi_f = 0$ , в противоречии с определением собственного вектора.

Пусть теперь оператор  $\hat{f}$  является эрмитовым и  $\{\Psi_f\}$  есть совокупность всех его собственных функций. Имеет место следующая фундаментальная *теорема о разложении*, которая играет важнейшую роль в квантовой механике: *любой вектор состояния  $\Psi$  может быть линейно разложен по собственным векторам оператора  $\hat{f}$ , т.е. представлен в виде ряда по значениям дискретного спектра и интеграла по значениям непрерывного спектра от  $\{\Psi_f\}$ :*

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n + \int df c_f \Psi_f, \tag{7.37}$$

где  $c_n, c_f$  – комплексные коэффициенты, причем функция  $c(f) = c_f$ , стоящая в подынтегральном выражении, является непрерывной функцией переменной  $f$ . Если среди собственных значений имеются вырожденные, то соответствующие им собственные функции входят в правую часть (7.37) независимо друг от друга, т.е. каждая со своим собственным коэффициентом. Теорема о разложении является обобщением указанного выше результата линейной алгебры и доказывается в курсе функционального анализа.

Систему функций, по которым можно разложить произвольный вектор состояния, называют *полной системой функций*. Итак, теорема о разложении утверждает, что система собственных функций эрмитова оператора является полной.

**Пример 34.** Собственные функции оператора инверсии. Согласно определению оператора инверсии, данному в примере 26, его собственные функции удовлетворяют уравнению

$$\Psi_P(-x) = P\Psi_P(x). \quad (7.38)$$

Как мы знаем из примера 28, оператор инверсии является эрмитовым, поэтому по его собственным функциям можно разложить любой вектор состояния. Проверим это. Заменяя в уравнении (7.38)  $x \rightarrow -x$  и используя это уравнение еще раз, найдем

$$\Psi_P(x) = P\Psi_P(-x) = PP\Psi_P(x),$$

откуда следует, что  $P^2 = 1$ , т.е.  $P = \pm 1$ . Таким образом, спектр оператора инверсии является дискретным и состоит всего из двух чисел:  $+1$  и  $-1$ . Если  $P = 1$ , то соответствующие собственные функции удовлетворяют уравнению

$$\Psi_{+1}(-x) = \Psi_{+1}(x),$$

т.е. являются четными функциями переменной  $x$ . Если же  $P = -1$ , то собственные функции удовлетворяют

$$\Psi_{-1}(-x) = -\Psi_{-1}(x),$$

т.е. являются нечетными функциями. Поскольку существует бесконечное множество как четных, так и нечетных линейно-независимых функций, оба собственных значения оператора инверсии являются бесконечно-кратно вырожденными. Отсюда следует также, что собственные функции оператора  $\hat{P}$  не обязаны быть нормируемыми.

Наконец, нетрудно разложить произвольный вектор состояния  $\Psi$  по собственным функциям оператора инверсии. Для этого достаточно написать

$$\Psi(x) = \frac{1}{2}\{\Psi(x) + \Psi(-x)\} + \frac{1}{2}\{\Psi(x) - \Psi(-x)\}.$$

Первое слагаемое в правой части является четной функцией, а второе – нечетной функцией  $x$ , т.е. собственными функциями оператора  $\hat{P}$ .

**Пример 35.** Собственные функции оператора импульса. Найдем собственные функции операторов компонент обобщенного импульса частицы (для краткости слово “обобщенный” будет опускаться). Для компоненты  $\hat{p}_x$ , например, уравнение на собственные функции имеет вид

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi_{p_x}}{\partial x} = p_x \Psi_{p_x}. \quad (7.39)$$

Его решением является

$$\Psi_{p_x}(x, y, z) = A(y, z)e^{ip_x x/\hbar}, \quad (7.40)$$

где  $A(y, z)$  есть произвольная функция переменных  $y, z$ . Мы видим, что решение уравнения (7.39) существует при любом  $p_x$ , в том числе и комплексном. Однако при комплексном  $p_x$  решение (7.40) не является ограниченным. Именно, если  $p_x$  имеет отличную от нуля мнимую часть,  $p' = \text{Im} p_x \neq 0$ , то

$$|\Psi_{p_x}(x, y, z)|^2 = |A(y, z)|^2 e^{-2p'x/\hbar},$$

так что решение (7.40) экспоненциально возрастает либо при  $x \rightarrow -\infty$ , либо при  $x \rightarrow +\infty$ , и потому  $\Psi_{p_x} \notin \mathcal{M}$ , и в соответствии с определением, данным в §7.4А, функция  $\Psi_{p_x}(x, y, z)$  с комплексным  $p_x$  не является собственной функцией оператора  $\hat{p}_x$ . Таким образом, физически допустимыми собственными значениями операторов компонент импульса частицы являются все вещественные числа.

Можно построить функции, являющиеся одновременно собственными для всех трех компонент оператора импульса. Они удовлетворяют уравнениям

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{p} \Psi_{\mathbf{p}}, \quad (7.41)$$

или в компонентах,

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi_{\mathbf{p}}}{\partial x} = p_x \Psi_{\mathbf{p}}, \quad -i\hbar \frac{\partial \Psi_{\mathbf{p}}}{\partial y} = p_y \Psi_{\mathbf{p}}, \quad -i\hbar \frac{\partial \Psi_{\mathbf{p}}}{\partial z} = p_z \Psi_{\mathbf{p}}. \quad (7.42)$$

Здесь  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$  есть некоторый числовой (вещественный) вектор. Решение этих уравнений ищем в виде

$$\Psi_{\mathbf{p}}(x, y, z) = \Psi_{p_x}(x) \Psi_{p_y}(y) \Psi_{p_z}(z) \quad (7.43)$$

и получаем обыкновенные дифференциальные уравнения

$$-i\hbar \frac{d\Psi_{p_x}(x)}{dx} = p_x \Psi_{p_x}(x), \quad -i\hbar \frac{d\Psi_{p_y}(y)}{dy} = p_y \Psi_{p_y}(y), \quad -i\hbar \frac{d\Psi_{p_z}(z)}{dz} = p_z \Psi_{p_z}(z).$$

Интегрирование этих уравнений дает

$$\Psi_{p_x}(x) = A_1 e^{ip_x x/\hbar}, \quad \Psi_{p_y}(y) = A_2 e^{ip_y y/\hbar}, \quad \Psi_{p_z}(z) = A_3 e^{ip_z z/\hbar},$$

где  $A_1, A_2, A_3$  – произвольные постоянные. Таким образом, собственные функции вектора импульса имеют вид

$$\Psi_{\mathbf{p}}(x, y, z) = A e^{ip_x x/\hbar} e^{ip_y y/\hbar} e^{ip_z z/\hbar}, \quad A \equiv A_1 A_2 A_3 = \text{const},$$

или, короче,

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = A e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar}. \quad (7.44)$$

Постоянная  $A$  может быть выбрана различной для разных  $\mathbf{p}$ , но нам это не понадобится.

Выясним еще вопрос о том, все ли решения уравнений (7.42) мы нашли, т.е. вопрос о вырожденности собственных значений (ведь мы искали решения частного вида (7.43)). Чтобы ответить на него, преобразуем эти уравнения, введя новую неизвестную функцию  $\Psi'(x, y, z) = \Psi_{\mathbf{p}}(x, y, z) e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar}$ . Мы имеем

$$\frac{\partial \Psi'}{\partial x} = \frac{\partial \Psi_{\mathbf{p}}}{\partial x} e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar} - \Psi_{\mathbf{p}} \frac{ip_x}{\hbar} e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar} = \frac{i}{\hbar} e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar} \left( -i\hbar \frac{\partial \Psi_{\mathbf{p}}}{\partial x} - p_x \Psi_{\mathbf{p}} \right) = 0.$$

Аналогично найдем, что  $\partial \Psi'/\partial y = 0$ ,  $\partial \Psi'/\partial z = 0$ . Таким образом, новая функция  $\Psi'(x, y, z)$  не зависит от переменных  $x, y, z$ , т.е. равна некоторой постоянной:  $\Psi'(x, y, z) = A$ , и потому  $\Psi_{\mathbf{p}}(x, y, z) = A e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar}$ . Итак, собственные значения оператора импульса невырождены.

*В. Распределения вероятностей для величин с дискретным спектром*

Если собственные значения эрмитова оператора принадлежат дискретному спектру, а собственные функции являются нормируемыми, то они обладают следующими важными свойствами: собственные значения являются вещественными, а собственные функции, соответствующие различным собственным значениям, ортогональны. Доказательство. Умножим скалярно уравнение (7.35) слева на вектор  $\Psi_f$ :

$$(\Psi_f, \hat{f}\Psi_f) = (\Psi_f, f\Psi_f).$$

По свойству 2 скалярного произведения, правая часть есть  $f(\Psi_f, \Psi_f)$ . В левой же части используем эрмитовость оператора  $\hat{f}$ , затем уравнение (7.35) и свойство 3 скалярного произведения:

$$(\Psi_f, \hat{f}\Psi_f) = (\hat{f}\Psi_f, \Psi_f) = (f\Psi_f, \Psi_f) = f^*(\Psi_f, \Psi_f).$$

Таким образом, уравнение (7.35) дает

$$f(\Psi_f, \Psi_f) = f^*(\Psi_f, \Psi_f),$$

или

$$(f - f^*)(\Psi_f, \Psi_f) = 0.$$

Поскольку по определению собственной функции  $\Psi_f \neq 0$ , то  $(\Psi_f, \Psi_f) \neq 0$  и поэтому из последнего равенства следует, что  $f = f^*$ . Пусть теперь имеются два собственных вектора  $\Psi_f$  и  $\Psi_{f'}$ , соответствующие собственным значениям  $f$  и  $f'$ :

$$\begin{aligned} \hat{f}\Psi_f &= f\Psi_f, \\ \hat{f}\Psi_{f'} &= f'\Psi_{f'} \end{aligned} \tag{7.45}$$

Умножив скалярно первое уравнение слева на  $\Psi_{f'}$ , а второе – справа на  $\Psi_f$ , и взяв разность результатов, получим

$$(\Psi_{f'}, \hat{f}\Psi_f) - (\hat{f}\Psi_{f'}, \Psi_f) = (f - f')(\Psi_{f'}, \Psi_f).$$

Левая часть этого равенства равна нулю, поскольку оператор  $\hat{f}$  эрмитов. Таким образом, если  $f \neq f'$ , то необходимо  $(\Psi_{f'}, \Psi_f) = 0$ , т.е. собственные векторы, соответствующие различным собственным значениям, ортогональны.

Если же собственные функции  $\Psi_f^{(1)}, \Psi_f^{(2)}$  соответствуют одному и тому же вырожденному собственному значению  $f$ , то, вообще говоря,  $(\Psi_f^{(1)}, \Psi_f^{(2)}) \neq 0$ . Однако в этом случае функции  $\Psi_f^{(1)}, \Psi_f^{(2)}$  можно заменить их линейными комбинациями так, чтобы новые функции стали ортогональными друг другу. Действительно, любая линейная комбинация  $c_1\Psi_f^{(1)} + c_2\Psi_f^{(2)}$  также будет собственной функцией оператора  $\hat{f}$ , соответствующей тому же самому собственному значению  $f$ , поскольку

$$\hat{f}(c_1\Psi_f^{(1)} + c_2\Psi_f^{(2)}) = c_1\hat{f}\Psi_f^{(1)} + c_2\hat{f}\Psi_f^{(2)} = c_1f\Psi_f^{(1)} + c_2f\Psi_f^{(2)} = f(c_1\Psi_f^{(1)} + c_2\Psi_f^{(2)}).$$

Если  $(\Psi_f^{(1)}, \Psi_f^{(2)}) \neq 0$ , то пару функций  $\{\Psi_f^{(1)}, \Psi_f^{(2)}\}$  заменим парой  $\{\Psi_f^{(1)}, \tilde{\Psi}_f^{(2)}\}$ , где

$$\tilde{\Psi}_f^{(2)} = \Psi_f^{(2)} - \frac{(\Psi_f^{(1)}, \Psi_f^{(2)})}{(\Psi_f^{(1)}, \Psi_f^{(1)})} \Psi_f^{(1)}.$$

Учитывая свойство 2 скалярного произведения, легко проверить, что теперь  $(\Psi_f^{(1)}, \tilde{\Psi}_f^{(2)}) = 0$ , причем векторы  $\{\Psi_f^{(1)}, \tilde{\Psi}_f^{(2)}\}$  линейно-независимы. Если имеется третий собственный вектор  $\Psi_f^{(3)}$ , соответствующий тому же собственному значению  $f$ , то мы заменим его вектором

$$\tilde{\Psi}_f^{(3)} = \Psi_f^{(3)} - \frac{(\Psi_f^{(1)}, \Psi_f^{(3)})}{(\Psi_f^{(1)}, \Psi_f^{(1)})} \Psi_f^{(1)} - \frac{(\tilde{\Psi}_f^{(2)}, \Psi_f^{(3)})}{(\tilde{\Psi}_f^{(2)}, \tilde{\Psi}_f^{(2)})} \tilde{\Psi}_f^{(2)}.$$

Тогда по построению  $(\Psi_f^{(1)}, \tilde{\Psi}_f^{(3)}) = (\tilde{\Psi}_f^{(2)}, \tilde{\Psi}_f^{(3)}) = 0$ , так что тройка  $\{\Psi_f^{(1)}, \tilde{\Psi}_f^{(2)}, \tilde{\Psi}_f^{(3)}\}$  представляет собой набор взаимно-ортогональных собственных векторов. Таким образом можно ортогонализировать любой набор векторов, что мы и будем всегда предполагать выполненным. Заметим, что описанную процедуру можно провести множеством способов. Например, можно было бы просто поменять местами исходные векторы  $\Psi^{(1)}, \Psi^{(2)}$ . Другими словами, в случае оператора с вырожденным спектром выбор полной ортогональной системы собственных векторов неоднозначен.

Перейдем теперь к выяснению физического смысла коэффициентов  $c_n$  в формуле (7.37). В рассматриваемом случае теорема о разложении гласит

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n, \quad (7.46)$$

где сумма берется по всем значениям индекса  $n$ , который нумерует собственные функции оператора  $\hat{f}$ . Пусть вектор состояния  $\Psi$  является нормированным, т.е.  $(\Psi, \Psi) = 1$ . Тогда согласно постулату III среднее значение величины  $f$  в состоянии  $\Psi$  равно

$$\bar{f} = (\Psi, \hat{f}\Psi).$$

Подставляя в эту формулу  $\Psi$  в виде (7.46), учитывая линейность оператора  $\hat{f}$  и используя свойства 2,3 скалярного произведения, получаем:

$$\bar{f} = \left( \sum_n c_n \Psi_n, \hat{f} \sum_m c_m \Psi_m \right) = \sum_{n,m} c_n^* c_m (\Psi_n, \hat{f}\Psi_m). \quad (7.47)$$

По предположению функции  $\Psi_n$  являются нормируемыми, и мы будем считать, что они, так же как и  $\Psi$ , нормированы,  $(\Psi_n, \Psi_n) = 1$ . Эти условия вместе со свойством ортогональности различных  $\Psi_n$  можно записать в виде единого условия *ортонормированности*

$$(\Psi_n, \Psi_m) = \delta_{nm}. \quad (7.48)$$

Тогда, учитывая, что  $\Psi_n$  являются собственными функциями оператора  $\hat{f}$ , получим  $(\Psi_n, \hat{f}\Psi_m) = (\Psi_n, f_m \Psi_m) = f_m (\Psi_n, \Psi_m) = f_m \delta_{nm}$ . Подставляя это в (7.47), приходим к следующей важной формуле

$$\bar{f} = \sum_n f_n |c_n|^2. \quad (7.49)$$

С другой стороны, согласно правилам теории вероятностей, среднее значение любой величины  $f$ , которая может принимать значения  $f_n$  с вероятностями  $w(f_n)$ , дается выражением

$$\bar{f} = \sum_{f_n} f_n w(f_n), \quad (7.50)$$

где суммирование производится по всем возможным значениям величины  $f$ . Сравнение последних двух формул приводит к следующей интерпретации величин  $f_n, c_n$ : каждая физическая величина  $f$  может принимать лишь значения, принадлежащие спектру  $\{f_n\}$  сопоставленного ей оператора  $\hat{f}$ , причем при измерении величины  $f$  в состоянии, описываемом вектором  $\Psi$ , вероятность обнаружить данное значение  $f_n$  определяется коэффициентами  $c_n$  разложения  $\Psi$  по собственным функциям оператора  $\hat{f}$ . А именно, если спектр оператора  $\hat{f}$  невырожден, то

$$w(f_n) = |c_n|^2. \quad (7.51)$$

Если же оператор  $\hat{f}$  имеет вырожденный спектр, то одному и тому же вырожденному собственному значению  $f_n$  соответствует несколько членов в сумме (7.49). Поэтому для того чтобы сравнить эту формулу с (7.50), перепишем ее в следующем виде

$$\bar{f} = \sum_{f_n} f_n \sum_{m: f_m=f_n} |c_m|^2.$$

Здесь сначала берется сумма по всем  $m$ , для которых  $f_m$  равны данному  $f_n$ , а затем уже берется сумма по всем различным  $f_n$ . Сравнение этого выражения с формулой (7.50) дает

$$w(f_n) = \sum_{m: f_m=f_n} |c_m|^2. \quad (7.52)$$

Используя ортонормированность собственных функций, нетрудно получить явную формулу для нахождения коэффициентов  $c_n$ . Для этого умножаем скалярно равенство (7.46) слева на  $\Psi_m$ , учитывая свойство 2 скалярного произведения и формулу (7.48)

$$(\Psi_m, \Psi) = \left( \Psi_m, \sum_n c_n \Psi_n \right) = \sum_n c_n (\Psi_m, \Psi_n) = \sum_n c_n \delta_{mn},$$

откуда

$$c_n = (\Psi_n, \Psi). \quad (7.53)$$

Таким образом, формулу (7.51), например, можно записать в виде

$$w(f_n) = |(\Psi_n, \Psi)|^2. \quad (7.54)$$

Напомним, что в этой формуле вектор  $\Psi$  предполагается нормированным. Для такого вектора сумма вероятностей  $w_n$  автоматически равна единице. Действительно, подставляя разложение (7.46) в равенство  $(\Psi, \Psi) = 1$ , найдем

$$\left( \sum_n c_n \Psi_n, \sum_m c_m \Psi_m \right) = \sum_{n,m} c_n^* c_m (\Psi_n, \Psi_m) = \sum_{n,m} c_n^* c_m \delta_{nm} = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n w_n = 1.$$

На практике иногда бывает удобно работать с ненормированным  $\Psi$ , а в конце вычислений нормировать само распределение  $\{w_n\}$ . Тогда формула (7.54) перепишется как

$$w(f_n) = \frac{|(\Psi_n, \Psi)|^2}{\sum_m |(\Psi_m, \Psi)|^2}. \quad (7.55)$$

Рассмотрим отдельно важный частный случай, когда все  $c_n$ , кроме одного  $c_{n_0}$ , равны нулю. Если вектор состояния нормирован, то сумма всех  $|c_n|^2$  равняется единице, и поэтому должно быть  $|c_{n_0}|^2 = 1$ , т.е. вероятность значения  $f_{n_0}$  равна единице. Другими словами, в состоянии  $\Psi = \Psi_{n_0}$  величина  $f$  имеет определенное значение  $f_{n_0}$ .

*С. Распределение вероятностей обобщенного импульса*

Вопрос о нормировке собственных функций операторов с непрерывным спектром и об интерпретации коэффициентов разложения по ним векторов состояния является математически более сложным, чем в случае дискретного спектра, однако окончательные формулы в обоих случаях практически идентичны. Мы разберем этот вопрос на конкретном примере оператора импульса.

Начнем с нормировки собственных функций оператора импульса. Будем для простоты рассматривать одномерный случай. Используя выражение (7.44), находим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi_p^*(x)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |A|^2 = \infty.$$

Таким образом, собственные функции оператора импульса являются ненормируемыми. Это означает, что *не существует состояний, в которых импульс имеет точно определенное значение*. Другими словами, в любом состоянии системы импульс “размазан” по некоторой области собственных значений.

Скалярные произведения собственных функций, соответствующих различным  $p$ , также не существуют, поскольку интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} e^{ip'x/\hbar} = |A|^2 \hbar \left. \frac{e^{i(p'-p)x/\hbar}}{i(p'-p)} \right|_{-\infty}^{+\infty}$$

не определен (при  $x \rightarrow \pm\infty$  выражение  $e^{i(p'-p)x}$  не стремится ни к какому числу). С другой стороны, в соответствии с теоремой о разложении (7.37), любой вектор состояния  $\Psi$  может быть разложен по  $\Psi_p$  :

$$\Psi = \int_{-\infty}^{+\infty} dp c_p \Psi_p, \tag{7.56}$$

и по аналогии с дискретным случаем естественно ожидать, что коэффициенты  $c_p$  в этом разложении должны быть как-то связаны с распределением вероятностей различных значений импульса. Для выяснения этой связи поступим так же как и в случае дискретного спектра, а именно, рассмотрим среднее значение импульса в состоянии  $\Psi$ .

Пусть вектор  $\Psi$  нормирован. Подставим разложение (7.56) в формулу  $\bar{p} = (\Psi, \hat{p}\Psi)$ . Рассматривая интеграл как сумму большого числа членов, мы можем использовать свойства 2,3 скалярного произведения для того, чтобы переписать скалярное произведение интегралов как интеграл от скалярных произведений. Однако как мы только что выяснили, скалярные произведения собственных функций не существуют. Для того чтобы все-таки можно было явно выразить величину  $(\Psi, \hat{p}\Psi)$  через собственные функции, представим скалярное произведение векторов как предел последовательности интегралов, взятых по расширяющимся областям конфигурационного пространства (именно так и определяются несобственные интегралы, т.е. интегралы, взятые по бесконечным областям). Пусть, например, каждая такая область определяется условием  $|x| \leq R$ , где  $R$  есть большое, но

конечное число. Таким образом,

$$(\Psi, \Psi') = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^{+R} dx \Psi^*(x) \Psi'(x) \equiv \lim_{R \rightarrow \infty} (\Psi, \Psi')_R.$$

Теперь величины  $(\Psi_p, \Psi_{p'})_R$  имеют вполне определенные конечные значения при любых  $p, p'$ , так что мы получаем для среднего значения импульса

$$\begin{aligned} \bar{p} &= \lim_{R \rightarrow \infty} (\Psi, \hat{p}\Psi)_R = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} dp' c_p^* c_{p'} (\Psi_p, \hat{p}\Psi_{p'})_R \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp c_p^* \int_{-\infty}^{+\infty} dp' c_{p'} p' (\Psi_p, \Psi_{p'})_R. \end{aligned} \quad (7.57)$$

Для входящих сюда “скалярных произведений”  $(\Psi_p, \Psi_{p'})_R$  имеем, подставляя  $\Psi_p(x) = A_1 e^{ipx/\hbar}$ ,

$$(\Psi_p, \Psi_{p'})_R = |A_1|^2 \int_{-R}^{+R} dx e^{-ipx/\hbar} e^{ip'x/\hbar} = |A_1|^2 \hbar \left. \frac{e^{i(p'-p)x/\hbar}}{i(p'-p)} \right|_{-R}^{+R} = |A_1|^2 2\hbar \frac{\sin\{(p'-p)R/\hbar\}}{(p'-p)}.$$

Величина  $\sin\{(p'-p)R/\hbar\}/(p'-p)$ , рассматриваемая как функция переменной  $(p'-p)/\hbar \equiv u$ , имеет при больших  $R$  следующее интересное свойство – интеграл от произведения этой функции с любой непрерывной функцией, взятый по любой области значений  $u$ , не содержащей точки  $u = 0$ , стремится к нулю при  $R \rightarrow \infty$ . Так происходит потому, что чем больше  $R$ , тем быстрее функция  $\sin(uR)$  осциллирует вокруг нуля, так что вклады от близлежащих участков интегрирования сокращают друг друга. Формально это можно показать следующим образом. Пусть  $f(u)$  – непрерывная функция. Рассмотрим интеграл

$$I = \int_a^b du f(u) \frac{\sin(uR)}{u},$$

причем  $0 \notin [a, b]$ . Разобьем отрезок  $[a, b]$  на  $N$  отрезков  $[u_n, u_{n+1}]$ ,  $n = 1, \dots, N$ , на каждом из которых функцию  $f(u)/u$  можно приближенно считать постоянной. Тогда можно написать

$$I = \sum_{n=1}^N \int_{u_n}^{u_{n+1}} du f(u) \frac{\sin(uR)}{u} \approx \sum_{n=1}^N \frac{f(u_n)}{u_n} \int_{u_n}^{u_{n+1}} du \sin(uR) = -\frac{1}{R} \sum_{n=1}^N \frac{f(u_n)}{u_n} \cos(uR) \Big|_{u_n}^{u_{n+1}}.$$

Каково бы ни было  $N$ , последнее выражение можно сделать сколь угодно малым, выбрав достаточно большое  $R$ . Таким образом, в интеграле по  $p'$  в правой части уравнения (7.57) ненулевой вклад может дать лишь малая область вокруг значения  $p' = p$ , поэтому мы можем написать

$$\bar{p} = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp c_p^* \int_{p-a}^{p+a} dp' c_{p'} p' (\Psi_p, \Psi_{p'})_R, \quad (7.58)$$

где  $a > 0$  – любое число. Выберем это число настолько малым, чтобы функцию  $c_{p'}p'$  можно было приближенно считать постоянной на отрезке  $[p - a, p + a]$ . Тогда интеграл по  $p'$  можно переписать так:

$$\begin{aligned} \int_{p-a}^{p+a} dp' c_{p'} p' (\Psi_p, \Psi_{p'})_R &= |A_1|^2 2\hbar \int_{p-a}^{p+a} dp' c_{p'} p' \frac{\sin\{(p' - p)R/\hbar\}}{(p' - p)} \\ &\approx |A_1|^2 2\hbar c_p p \int_{p-a}^{p+a} dp' \frac{\sin\{(p' - p)R/\hbar\}}{(p' - p)} = |A_1|^2 2\hbar c_p p \int_{-aR/\hbar}^{+aR/\hbar} dv \frac{\sin v}{v}. \end{aligned}$$

В пределе  $R \rightarrow \infty$  все приближенные равенства в написанных выше формулах становятся точными. Поэтому, подставляя полученное выражение в формулу (7.58) и учитывая, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{\sin v}{v} = \pi,$$

получаем точное равенство

$$\bar{p} = |A_1|^2 2\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dp p |c_p|^2 \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-aR/\hbar}^{+aR/\hbar} dv \frac{\sin v}{v} = |A_1|^2 2\pi\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dp p |c_p|^2.$$

Положим теперь постоянную  $A_1$  равной  $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ . Тогда формула для среднего значения импульса примет вид

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} dp p |c_p|^2. \quad (7.59)$$

Сравним ее с соответствующей формулой теории вероятностей:

$$\bar{f} = \int df f w(f).$$

Функцию  $w(f)$  называют плотностью распределения вероятности для величины  $f$ , в том смысле, что произведение  $w(f)df$  есть вероятность обнаружить  $f$  в интервале  $(f, f + df)$ . Таким образом, мы приходим к следующему важному выводу: *при измерении импульса в состоянии, описываемом вектором  $\Psi$ , вероятность обнаружить его в интервале  $(p, p + dp)$  равна  $|c_p|^2 dp$ , где  $c_p$  определяется из разложения функции  $\Psi(x)$  по функциям  $\Psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$ .*

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp c_p e^{ipx/\hbar}. \quad (7.60)$$

Формула (7.60) является не чем иным, как разложением функции  $\Psi(x)$  в интеграл Фурье. Таким образом, теорема о разложении в рассматриваемом случае является известной теоремой Фурье.

Как мы знаем, собственные функции оператора импульса ненормируемы. Тем не менее, функции  $\Psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$  называют обычно *нормированными собственными функциями оператора  $\hat{p}_x$* , с целью подчеркнуть определенный выбор постоянной  $A_1$ .

Нетрудно проверить, что сумма всех вероятностей импульса частицы, как и должно быть, равна единице. Для этого надо проделать ту же выкладку, что привела к формуле (7.60), заменив оператор  $\hat{p}$  единичным оператором. Тогда мы получили бы равенство

$$(\Psi, \Psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp |c_p|^2,$$

откуда и следует сделанное утверждение, поскольку вектор  $\Psi$  предполагался нормированным. Если же коэффициенты  $c_p$  вычисляются по ненормированному вектору, то распределение  $|c_p|^2$  должно быть еще нормировано в конце вычислений. В этом случае плотность распределения вероятности имеет вид

$$w(p) = \frac{|c_p|^2}{\int_{-\infty}^{+\infty} dp |c_p|^2}. \quad (7.61)$$

Найдем теперь явное выражение для коэффициентов  $c_p$ . Для этого перепишем формулу (7.60) в виде

$$\Psi = \int_{-\infty}^{+\infty} dp c_p \Psi_p$$

и умножим ее слева скалярно на вектор  $\Psi_{p'}$ . Представляя, как и ранее, скалярное произведение как предел интегралов по областям  $|x| \leq R$ , получим

$$(\Psi_{p'}, \Psi) = \left( \Psi_{p'}, \int_{-\infty}^{+\infty} dp c_p \Psi_p \right) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp c_p (\Psi_{p'}, \Psi_p)_R.$$

Интеграл по  $p$ , стоящий в правой части, имеет ту же структуру, что и интеграл по  $p'$  в формуле (7.57) и вычисляется точно так же:

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp c_p (\Psi_{p'}, \Psi_p)_R &= \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{p'-a}^{p'+a} dp c_p (\Psi_{p'}, \Psi_p)_R \\ &= c_{p'} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{p'-a}^{p'+a} dp |A_1|^2 2\hbar \frac{\sin\{(p-p')R/\hbar\}}{(p-p')} = |A_1|^2 2\hbar c_{p'} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-aR/\hbar}^{+aR/\hbar} dv \frac{\sin v}{v} = |A_1|^2 2\pi\hbar c_{p'}. \end{aligned}$$

Таким образом,  $c_p = (\Psi_p, \Psi)$ . Эта формула в точности повторяет формулу (7.53) дискретного случая. Расписывая скалярное произведение, получаем явное выражение для коэффициентов  $c_p$

$$c_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \Psi(x). \quad (7.62)$$

В случае произвольного эрмитова оператора  $\hat{f}$  с непрерывным спектром и произвольном числе измерений конфигурационного пространства аналогичные вычисления приводят в точности к тем же формулам (7.59), (7.61), в которых следует лишь переобозначить  $p \rightarrow f$ . В частности, при трехмерном движении частицы ее волновую функцию следует разлагать по собственным функциям оператора вектора импульса  $\hat{\mathbf{p}}$ , которые согласно формуле (7.44) имеют вид

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar}.$$

В этом случае формулы (7.60) и (7.62) запишутся в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{+\infty} d^3\mathbf{p} c_{\mathbf{p}} e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar}, \quad (7.63)$$

и

$$c_{\mathbf{p}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{+\infty} d^3\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar} \Psi(\mathbf{r}), \quad (7.64)$$

соответственно.

## §7.5. Совместная измеримость физических величин

### А. Коммутативность и совместимость

Как и при всяком физическом измерении, результаты измерений величин, характеризующих квантовую систему, являются в той или иной степени неточными. Одним из источников неточности является несовершенство измерительной техники. Как и в классической механике, эта неточность является несущественной в том смысле, что она не ставит какого-либо предела точности измерений, так что хотя каждое отдельное измерение и является неточным, но ничто, в принципе, не мешает сделать его сколь угодно точным. В квантовой механике такое же положение имеет место по отношению к индивидуальным измерениям величин, т.е. когда каждое измерение состоит в определении значения какой-либо одной величины. По отношению же к совместным (т.е. одновременным) измерениям различных величин в квантовой механике имеется еще и другой источник неточности, который в отличие от первого является принципиально неустранимым. Мы увидим ниже, что чем точнее измеряется какая-либо одна величина, тем бóльшие неточности возникают в значениях других величин, измеряемых одновременно с первой. Это не исключает вовсе возможности совместных измерений, но сильно ограничивает набор величин, которые могут быть сколь угодно точно измерены одновременно. С математической точки зрения это ограничение связано с коммутационными свойствами операторов измеряемых величин, а не со свойствами измерительного прибора или его взаимодействия с измеряемой системой. Поэтому для его изучения не требуется рассматривать динамику процесса измерения, а достаточно уже результатов, полученных в предыдущем параграфе. Как мы там выяснили, коэффициенты разложения волновой функции  $\Psi$  данного состояния по собственным функциям  $\Psi_f$  оператора измеряемой величины  $f$  определяют распределение вероятностей различных ее значений. Пусть для определенности оператор  $\hat{f}$  имеет

дискретный спектр. Результатом каждого измерения  $f$  является одно из чисел  $f_n$ . Это означает, что в момент фиксации измерительным прибором некоторого значения  $f_n$  система переходит из исходного состояния  $\Psi$  в состояние  $\Psi_n$ , соответствующее данному значению  $f_n$ , т.е. в собственную функцию оператора  $\hat{f}$  (в последующие моменты времени система эволюционирует согласно уравнению Шредингера и, вообще говоря, “уходит” из состояния  $\Psi_n$ ). Взятое само по себе, любое такое измерение возможно всегда (как уже было сказано ранее, чисто приборная погрешность является несущественной с принципиальной точки зрения, поэтому, пренебрегая ею, мы можем считать, что величина  $f$  точно равна  $f_n$ ). Предположим теперь, что одновременно с величиной  $f$  измеряется некоторая другая величина  $f'$ , причем эти два измерения “не мешают” друг другу, т.е. в результате такого совместного измерения система переходит в состояние  $\Psi_{nm}$ , в котором обе величины  $f, f'$  одновременно получают определенные значения  $f_n, f'_m$ , т.е.

$$\hat{f}\Psi_{nm} = f_n\Psi_{nm}, \quad \hat{f}'\Psi_{nm} = f'_m\Psi_{nm}. \quad (7.65)$$

Следствием этих равенств является следующая цепочка равенств

$$\begin{aligned} (\hat{f}'\hat{f})\Psi_{nm} &= \hat{f}'(\hat{f}\Psi_{nm}) = \hat{f}'f_n\Psi_{nm} = f_n\hat{f}'\Psi_{nm} = f_n f'_m\Psi_{nm} = f'_m f_n\Psi_{nm} = f'_m\hat{f}\Psi_{nm} \\ &= \hat{f}f'_m\Psi_{nm} = \hat{f}(\hat{f}'\Psi_{nm}) = (\hat{f}\hat{f}')\Psi_{nm}, \end{aligned}$$

откуда

$$[\hat{f}', \hat{f}]\Psi_{nm} = 0.$$

Мы видим, что для того чтобы величины  $f, f'$  могли одновременно иметь значения  $f_n, f'_m$ , необходимо, чтобы коммутатор их операторов обращал состояние  $\Psi_{nm}$  в нуль. Если это имеет место для всех  $n$  и  $m$ , т.е. величины  $f, f'$  могут одновременно иметь определенные значения из соответствующих наборов  $\{f_n\}, \{f'_m\}$  в любой комбинации, то в силу линейности оператора  $[\hat{f}', \hat{f}]$  равенство  $[\hat{f}', \hat{f}]\Psi = 0$  должно выполняться для любого вектора  $\Psi$ , поскольку совокупность векторов  $\{\Psi_{nm}\}$  образует полную систему функций, и поэтому  $\Psi$  может быть представлен в виде суперпозиции векторов из  $\{\Psi_{nm}\}$ . Другими словами, в этом случае должно выполняться операторное равенство

$$[\hat{f}', \hat{f}] = 0. \quad (7.66)$$

Покажем теперь, что условие (7.66) является также достаточным для того, чтобы величины  $f, f'$  всегда могли быть точно измерены одновременно, т.е. могли иметь одновременно любые значения из соответствующих наборов  $\{f_n\}, \{f'_m\}$ .

*Теорема: при выполнении условия (7.66) у операторов  $\hat{f}, \hat{f}'$  существует полная система совместных собственных векторов, т.е. система  $\{\Psi_{nm}\}$ , удовлетворяющая уравнениям (7.65) для всех  $n, m$ . Доказательство.* Возьмем любой собственный вектор  $\Psi_n$  оператора  $\hat{f}$  и разложим его по собственным векторам  $\Psi'_k$  оператора  $\hat{f}'$ :

$$\Psi_n = \sum_k a_{kn} \Psi'_k, \quad a_{kn} = \text{const}.$$

В этой сумме индекс  $k$  нумерует как всегда все собственные векторы оператора  $\hat{f}'$ . Напомним, что некоторые из этих векторов могут соответствовать одному и тому же собственному значению, т.е.  $f'_k$  могут быть вырожденными. Ввиду этого нам будет удобно

объединить эти векторы, образовав для каждого  $f'_m$  сумму

$$\sum_{\substack{k: \\ f'_k=f'_m}} a_{kn} \Psi'_k \equiv \Psi_{nm}$$

(в случае невырожденного  $f'_m$  сумма в левой части сводится к одному члену). По построению,  $\Psi_{nm}$  является собственным вектором оператора  $\hat{f}'$ , соответствующим собственному значению  $f'_m$ :

$$\hat{f}' \Psi_{nm} = f'_m \Psi_{nm}. \quad (7.67)$$

Тогда разложение вектора  $\Psi_n$  переписется в виде

$$\Psi_n = \sum_m \Psi_{nm},$$

где  $m$  теперь нумерует все *различные* собственные значения оператора  $\hat{f}'$ . Покажем, что  $\Psi_{nm}$  и будут совместными собственными функциями операторов  $\hat{f}, \hat{f}'$ . Для этого подействуем на последнее равенство оператором  $(\hat{f} - f_n)$ . Поскольку  $\Psi_n$  есть собственный вектор оператора  $\hat{f}$ , соответствующий собственному значению  $f_n$ , получаем

$$0 = \sum_m (\hat{f} - f_n) \Psi_{nm}. \quad (7.68)$$

Заметим теперь, что вектор  $\hat{f}' \Psi_{nm}$ , а потому и вектор  $(\hat{f} - f_n) \Psi_{nm}$ , является собственным для оператора  $\hat{f}'$ , соответствующим собственному значению  $f'_m$ . Действительно, используя равенства (7.66), (7.67), а также определение произведения операторов и линейность оператора  $\hat{f}$ , находим

$$\hat{f}'(\hat{f} \Psi_{nm}) = (\hat{f}' \hat{f}) \Psi_{nm} = (\hat{f} \hat{f}') \Psi_{nm} = \hat{f}(\hat{f}' \Psi_{nm}) = \hat{f} f'_m \Psi_{nm},$$

или

$$\hat{f}'(\hat{f} \Psi_{nm}) = f'_m (\hat{f} \Psi_{nm}).$$

Таким образом, в правой части равенства (7.68) стоит сумма собственных векторов оператора  $\hat{f}'$ , причем все они соответствуют различным собственным значениям  $f'_m$ . Поэтому в силу линейной независимости собственных векторов, соответствующих различным собственным значениям (см. §7.4А) все члены этой суммы должны обращаться в нуль:  $(\hat{f} - f_n) \Psi_{nm} = 0$ , или

$$\hat{f} \Psi_{nm} = f_n \Psi_{nm},$$

откуда следует, что вектор  $\Psi_{nm}$  является также собственным вектором оператора  $\hat{f}$ , соответствующим собственному значению  $f_n$ . Поскольку это справедливо для всех  $n$ , то мы видим, что уравнения (7.65) выполняются для всех  $n$  и для всех  $m$ . Наконец, поскольку система векторов  $\{\Psi_n\}$  является полной, а каждый вектор  $\Psi_n$  линейно выражается через векторы  $\Psi_{nm}$ , то любой вектор  $\Psi \in \mathcal{S}$  может быть линейно разложен по векторам  $\Psi_{nm}$ , т.е. система  $\{\Psi_{nm}\}$  является полной. Теорема доказана.

Существование системы совместных собственных функций и является выражением совместной измеримости величин  $f, f'$ : в любом состоянии  $\Psi_{nm}$  эти величины имеют

определенные значения  $f_n, f'_m$ , и наоборот, одновременное измерение этих величин в произвольном состоянии  $\Psi$  переводит это состояние в один из векторов  $\Psi_{nm}$ . Формально такое двойное измерение можно рассматривать как одинарное измерение двухкомпонентной величины  $(f, f')$ , что как раз соответствует нумерации состояний двойным индексом  $(n, m)$ . Поэтому к нему применимы все полученные в предыдущих параграфах формулы. В частности, вероятность найти значения  $f_n, f'_m$  при измерении в состоянии, описываемом нормированным вектором  $\Psi$ , дается выражением

$$w(f_n, f'_m) = |c_{nm}|^2,$$

где коэффициенты  $c_{nm}$  определяются из разложения

$$\Psi = \sum_{nm} c_{nm} \Psi_{nm},$$

причем  $\Psi_{nm}$  также должны быть нормированы:  $(\Psi_{nm}, \Psi_{nm}) = 1$ .

Полученные результаты непосредственно обобщаются на случай трех и большего числа коммутирующих операторов. Именно, если помимо рассмотренных операторов  $\hat{f}, \hat{f}'$  имеется еще один коммутирующий с ними эрмитов оператор  $\hat{f}''$ , то для этих трех операторов существует система совместных собственных векторов  $\{\Psi_{nml}\}$ , которая может быть получена разложением всех векторов системы  $\{\Psi_{nm}\}$  по собственным векторам  $\Psi_l''$  оператора  $\hat{f}''$ . В случае операторов с непрерывным спектром приведенное выше рассуждение приводит к тому же самому выводу с одной лишь оговоркой: поскольку не существует состояний системы, в которых непрерывная величина имеет строго определенное значение, слово “точно” следует заменить на “с заданной точностью.”

### В. Принцип неопределенности

Получим теперь количественную характеристику неточности измерений, связанной с некоммутативностью операторов измеряемых величин. Возьмем два эрмитова оператора  $\hat{f}, \hat{f}'$  и пусть

$$[\hat{f}, \hat{f}'] = i\hat{g}, \quad (7.69)$$

где  $\hat{g} \neq 0$ . Рассмотрим произвольное состояние  $\Psi$  и пусть  $\bar{f}, \bar{f}'$  – средние значения величин  $f, f'$  в этом состоянии. Введем новые операторы  $\hat{F} = \hat{f} - \bar{f}$ ,  $\hat{F}' = \hat{f}' - \bar{f}'$ . Поскольку средние значения  $\bar{f}, \bar{f}'$  вещественны, новые операторы эрмитовы. Заметим, что оператор  $\hat{g}$  также эрмитов. Действительно, вычисляя эрмитово сопряжение левой части уравнения (7.69) по правилам, выведенным в §7.2В и учитывая эрмитовость  $\hat{f}, \hat{f}'$ , получим

$$[\hat{f}, \hat{f}']^+ = (\hat{f}\hat{f}')^+ - (\hat{f}'\hat{f})^+ = \hat{f}'^+\hat{f}^+ - \hat{f}^+\hat{f}'^+ = \hat{f}'\hat{f} - \hat{f}\hat{f}' = -[\hat{f}, \hat{f}'] = -i\hat{g}. \quad (7.70)$$

С другой стороны, эрмитово сопряжение правой части (7.69) дает

$$(i\hat{g})^+ = -i\hat{g}^+.$$

Сравнение полученных выражений показывает, что  $\hat{g}^+ = \hat{g}$ . Вычислим еще коммутатор операторов  $\hat{F}, \hat{F}'$ :

$$[\hat{F}, \hat{F}'] = [(\hat{f} - \bar{f}), (\hat{f}' - \bar{f}')] = [\hat{f}, \hat{f}'] - [\bar{f}, \hat{f}'] - [\hat{f}, \bar{f}'] + [\bar{f}, \bar{f}'] = [\hat{f}, \hat{f}'] = i\hat{g}, \quad (7.71)$$

поскольку любой линейный оператор коммутирует с числами.

Рассмотрим теперь вектор  $(\hat{F} + i\alpha\hat{F}')\Psi$ , где  $\alpha$  – произвольное вещественное число. Мы имеем

$$\left( (\hat{F} + i\alpha\hat{F}')\Psi, (\hat{F} + i\alpha\hat{F}')\Psi \right) \geq 0,$$

в силу свойства 4 скалярного произведения. Применяя определение эрмитова сопряжения, учитывая эрмитовость операторов  $\hat{F}, \hat{F}'$ , равенство (7.71) и определение среднего значения, левую часть можно преобразовать так

$$\begin{aligned} & \left( (\hat{F} + i\alpha\hat{F}')\Psi, (\hat{F} + i\alpha\hat{F}')\Psi \right) = \left( \Psi, (\hat{F} + i\alpha\hat{F}')^+ (\hat{F} + i\alpha\hat{F}')\Psi \right) \\ & = \left( \Psi, (\hat{F} - i\alpha\hat{F}')(\hat{F} + i\alpha\hat{F}')\Psi \right) = \left( \Psi, (\hat{F}\hat{F} + i\alpha\hat{F}\hat{F}' - i\alpha\hat{F}'\hat{F} + \alpha^2\hat{F}'\hat{F}')\Psi \right) \\ & = \left( \Psi, (\hat{F}^2 + i\alpha[\hat{F}, \hat{F}'] + \alpha^2\hat{F}'^2)\Psi \right) = \overline{F^2} - \alpha\bar{g} + \alpha^2\overline{F'^2}. \end{aligned} \quad (7.72)$$

Таким образом, мы имеем

$$\overline{F^2} - \alpha\bar{g} + \alpha^2\overline{F'^2} \geq 0.$$

Для того чтобы это неравенство выполнялось для всех  $\alpha$ , должно быть

$$\bar{g}^2 - 4\overline{F^2}\overline{F'^2} \leq 0,$$

или

$$\sqrt{\overline{F^2}}\sqrt{\overline{F'^2}} \geq \frac{|\bar{g}|}{2}. \quad (7.73)$$

В теории вероятностей число  $\sqrt{\overline{F^2}} = \sqrt{(f - \bar{f})^2} \equiv D_f$  называется *дисперсией* величины  $f$ . Она характеризует разброс, который будет наблюдаться в значениях величины  $f$  при многократном ее измерении в состоянии  $\Psi$ , т.е. *неопределенность* в ее значении. Таким образом, мы получили следующий результат: *произведение дисперсий двух физических величин в данном состоянии системы не меньше, чем половина среднего их коммутатора в этом состоянии*. Подчеркнем, что хотя этот результат и означает, что в состоянии с  $\bar{g} \neq 0$  величины  $f, f'$  не имеют определенных значений, он еще не означает, что эти величины не могут быть одновременно измерены в этом состоянии точно, поскольку в процессе измерения система может перейти из данного состояния в такое, в котором  $f, f'$  имеют определенные значения, т.е. в их совместную собственную функцию. С другой стороны, может оказаться и так, что  $D_f D_{f'} > 0$ , несмотря на то что  $\bar{g} = 0$  в данном состоянии, т.е. величины  $f, f'$  все же не имеют определенных значений в этом состоянии (см. пример 41).

Применим соотношение (7.73) к случаю  $f = x, f' = p_x$ . Используя формулу (7.32), получаем

$$D_x D_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (7.74)$$

Мы видим, что правая часть этого неравенства есть постоянная, не зависящая от состояния системы, т.е. для данной пары величин вообще не существует состояний, в которых дисперсии  $x$  и  $p_x$  были бы одновременно произвольно малы. Это приводит нас к *принципу неопределенности Гейзенберга: произведение неопределенностей в значениях одноименных компонент координат и импульсов частиц в любом состоянии не может быть меньше  $\hbar/2$ , так что ни при каких условиях они не могут быть измерены одновременно сколь угодно точно*.

## Глава 8. ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

### §8.1. Стационарное уравнение Шредингера

Мы переходим к применению общей схемы, изложенной в предыдущей главе, к решению конкретных квантовомеханических задач. Так же как и в классической механике, основной проблемой квантовой механики является решение уравнений движения – в данном случае уравнения Шредингера (7.22). В этой и следующих двух главах мы будем рассматривать системы, гамильтонианы которых не зависят от времени. В этом случае задача решения уравнения Шредингера может быть существенно упрощена – она сводится к задаче решения более простого уравнения, в котором неизвестная функция не зависит от времени. Этому посвящен настоящий параграф.

Поскольку по определению гамильтониан  $\hat{H}$  строится по функции Гамильтона  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ , а операторы  $\hat{p}_i$  не зависят от времени, то условие независимости  $\hat{H}$  от времени означает, что функция  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  не должна явно зависеть от времени. Как мы знаем из §5.1, следствием этого является закон сохранения обобщенной энергии  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = E = \text{const}$ . В отличие от классической механики, энергия в квантовой механике не обязана иметь определенное значение, и поэтому не имеет смысла говорить о ее сохранении. Однако общая задача может быть сведена к тому частному случаю, когда неизвестная функция  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$  в уравнении Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (8.1)$$

является собственной функцией оператора  $\hat{H}$ , т.е. в состоянии  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$  энергия имеет определенное значение. Это делается следующим образом. Согласно теореме о разложении, в каждый момент времени  $t$  волновая функция системы  $\Psi$  может быть разложена по собственным функциям оператора  $\hat{H}$ . До сих пор мы рассматривали собственные функции операторов в некоторый фиксированный момент времени. Если оператор зависит от времени, то и его собственные функции тоже будут зависеть от времени. Но поскольку оператор  $\hat{H}$  по предположению от времени не зависит, мы договоримся выбирать его собственные функции также независимыми от времени и обозначать их малыми буквами  $\psi$ :

$$\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n. \quad (8.2)$$

Тогда теорема о разложении гласит, что

$$\Psi = \sum_n c_n(t) \psi_n,$$

где  $c_n(t)$  – некоторые коэффициенты, зависящие от времени. Подставим это разложение в уравнение (8.1). В силу линейности оператора  $\hat{H}$  и операции дифференцирования по времени можем написать

$$\sum_n i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} \psi_n = \sum_n c_n(t) \hat{H} \psi_n = \sum_n c_n(t) E_n \psi_n,$$

или

$$\sum_n \left( i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} - E_n c_n(t) \right) \psi_n = 0.$$

Поскольку собственные функции линейно-независимы, последнее равенство может выполняться, только если все коэффициенты при  $\psi_n$  обращаются в нуль:

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} - E_n c_n(t) = 0.$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$c_n(t) = c_n e^{-iE_n t/\hbar},$$

где  $c_n \equiv c_n(0)$ . Таким образом, искомая волновая функция представляется в виде

$$\Psi = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n.$$

В соответствии с интерпретацией коэффициентов разложения  $c_n(t)$ , данной в §7.4, квадраты их модулей определяют вероятности различных значений энергии. Поскольку

$$|c_n(t)|^2 = |c_n|^2 |e^{-iE_n t/\hbar}|^2 = |c_n|^2,$$

то мы видим, что в случае независящего от времени гамильтониана распределение вероятностей для энергии также не зависит от времени. Этот результат заменяет в квантовой механике закон сохранения энергии классической механики.

Итак, задача решения уравнения Шредингера (8.1) сведена к задаче решения уравнения (8.2). Последнее называют обычно *стационарным уравнением Шредингера*. Случай, когда  $\hat{H}$  имеет непрерывный спектр, отличается только тем, что решения соответствующего стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E \tag{8.3}$$

не принадлежат пространству состояний системы, т.е. сами по себе не описывают никаких возможных состояний системы. Последние обязательно размазаны по конечным областям значений  $E$ :

$$\Psi = \int dE c_E e^{-iEt/\hbar} \psi_E. \tag{8.4}$$

### §8.2. Качественное исследование уравнения Шредингера. Типы энергетических спектров

Как и в классической механике, простейшим типом квантового движения является движение частицы по прямой. Этот случай позволяет изучить основные свойства решений уравнения Шредингера и дать классификацию типов энергетических спектров. Как мы увидим в дальнейшем, исследование многих важных многомерных систем может быть сведено к задаче решения одномерного уравнения Шредингера для частицы, движущейся в некотором эффективном потенциале, что позволяет применять к таким системам результаты настоящего параграфа.

Установим сначала вид гамильтониана для одномерного движения частицы. Пусть  $x$  – ее декартова координата на прямой  $(-\infty, +\infty)$ , а  $U(x)$  – потенциальная энергия в постоянном внешнем поле. Следуя постулату III, заменяем в функции Гамильтона частицы

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

переменную  $p$  оператором  $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$  и получаем

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x).$$

Поэтому стационарное уравнение Шредингера одномерного движения имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi \quad (8.5)$$

(поскольку по определению функции  $\psi$  зависят лишь от координаты  $x$ , но не от времени, можно писать полные производные по  $x$ ; нижний индекс у  $\psi$ , указывающий к какому уровню энергии она относится, для краткости опущен). Заметим, что поскольку все коэффициенты в уравнении (8.5) вещественны, то если  $\psi(x)$  удовлетворяет этому уравнению, то ее вещественная и мнимая части также ему удовлетворяют, и поэтому все независимые решения (8.5) можно выбрать вещественными.

Отыскание решений стационарного уравнения Шредингера (8.5) – трудная задача, и уже для сравнительно простых потенциалов решение не может быть выписано явно. Однако оказывается, что общие свойства решений и энергетических спектров можно очень просто выяснить, анализируя лишь структуру самого уравнения Шредингера, не зная явного вида решений. Этому посвящен настоящий параграф. Мы будем предполагать, что все независимые решения уравнения (8.5) выбраны вещественными. Кроме того, мы будем рассматривать только такие потенциалы  $U(x)$ , которые в каждом из пределов  $x \rightarrow \pm\infty$  либо имеют конечный предел, либо монотонно стремятся к плюс или минус бесконечности, а в остальном произвольные. Потенциалы, не удовлетворяющие этому условию, осциллируют на бесконечности. Важным примером такого потенциала является поле бесконечной кристаллической решетки. Этот случай будет рассмотрен отдельно в §8.6.

Поскольку уравнение (8.5) является обыкновенным дифференциальным уравнением второго порядка, то при любом вещественном значении  $E$  оно имеет два линейно-независимых решения. В соответствии с определением, данным в §7.4А, эти решения являются собственными функциями гамильтониана при условии, что они ограничены. Поскольку функция  $\psi(x)$  непрерывна при всех  $x$ , то неограниченной она может оказаться лишь при  $|x| \rightarrow \infty$ .

Выясним свойства ограниченности решения в зависимости от значения энергии  $E$ . Для этого перепишем уравнение (8.5) в виде

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E]\psi, \quad (8.6)$$

где штрих обозначает дифференцирование по  $x$ , а домножив его на  $\psi'$ , еще и в другом виде

$$\frac{d\psi'^2}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E] \frac{d\psi^2}{dx}. \quad (8.7)$$

Будем теперь перебирать все значения параметра  $E$  от  $-\infty$  до  $+\infty$  и следить за поведением функции  $\psi(x)$  при  $x \rightarrow \infty$ . Начнем со случая, когда при данном значении  $E$  выполняется неравенство  $E > U(x)$  при всех  $x \geq a$  для некоторого  $a$  (см. Рис. 12). Предположим, что  $d\psi^2/dx > 0$  в некоторой точке  $x_1 \geq a$ , т.е. функция  $\psi(x)$  растет по абсолютной величине. Тогда правая часть уравнения (8.7) отрицательна в точке  $x_1$ , и поэтому  $d\psi'^2/dx < 0$

т.е.  $\psi'$  убывает по абсолютной величине. Другими словами, если в данной точке  $\psi$  положительна и растет, то ее рост замедляется, а если  $\psi$  отрицательна и убывает, то замедляется ее убывание. Если мы будем двигаться вправо от  $x_1$ , то в некоторой точке  $x_2$  производная  $\psi'$  обратится в нуль. При этом  $\psi(x_2) \neq 0$ , поскольку  $\psi(x_1) \neq 0$ , а  $|\psi|$  растет на отрезке  $[x_1, x_2]$ . Тогда из уравнения (8.6) следует, что если  $\psi(x_2) > 0$ , то  $\psi''(x_2) < 0$ , т.е.  $\psi(x)$  имеет максимум в  $x_2$ , а если  $\psi(x_2) < 0$ , то  $\psi''(x_2) > 0$  и  $\psi(x)$  имеет минимум. Поэтому при прохождении точки  $x_2$  функция  $d\psi^2/dx$  меняет знак и становится отрицательной, т.е. при движении вправо от  $x_2$  функция  $\psi(x)$  уменьшается по абсолютной величине и в некоторой точке  $x_3$  должна обратиться в нуль. Действительно,  $\psi'$  не может обратиться в нуль раньше (или одновременно с)  $\psi$ , поскольку  $\psi'(x_2) = 0$ , а  $\psi''$  сохраняет постоянный знак до тех пор, пока  $\psi$  не обратится в нуль [см. (8.6)]. Таким образом, в точке  $x_3$  функция  $d\psi^2/dx$  опять меняет знак, т.е. становится положительной. Поэтому, выбрав вблизи от  $x_3$  некоторый  $\tilde{x}_1 > x_3$  за новую исходную точку, мы можем повторить приведенные рассуждения и получить тот же результат. Это означает, что при  $x \geq a$  функция  $\psi(x)$  осциллирует. Покажем, что  $\psi(x)$  остается при этом ограниченной. Для этого перепишем уравнение (8.7) в виде

$$\frac{d\psi^2}{dx} = \frac{\hbar^2}{2m[U(x) - E]} \frac{d\psi'^2}{dx}$$

и проинтегрируем его между любыми двумя точками  $x_2$  и  $\tilde{x}_2$ , в которых функция  $\psi$  имеет экстремум (точки типа  $x_2$  на Рис. 12). Интегрируя справа по частям и учитывая, что  $\psi'(x_2) = \psi'(\tilde{x}_2) = 0$ , получаем

$$\psi^2(\tilde{x}_2) - \psi^2(x_2) = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_2}^{\tilde{x}_2} \frac{dx \psi'^2 U'(x)}{[U(x) - E]^2}. \quad (8.8)$$

Предположение о монотонности функции  $U(x)$  при  $x \rightarrow \infty$  и условие  $U(x) < E$  означают, что  $x_2$  может быть выбрано так, что  $U'(x) \leq 0$  при всех  $x \geq x_2$ . Тогда правая часть равенства (8.8) не положительна, т.е.  $\psi^2(\tilde{x}_2) \leq \psi^2(x_2)$  во всех экстремальных точках справа от  $x_2$ . Другими словами, амплитуда осцилляций функции  $\psi(x)$  уменьшается при  $x \rightarrow +\infty$  (она остается постоянной лишь в случае  $U(x) = \text{const}$ ). Аналогично рассматривается случай  $E > U(x)$  при  $x \leq a$ . Итак, мы доказали следующее

**Утверждение  $\alpha$ :** *Если при данном значении  $E$  выполняется неравенство  $E > U(x)$  в области  $x \geq a$  ( $x \leq a$ ), то решение уравнения Шредингера является ограниченной осциллирующей функцией в этой области.*

Перейдем теперь к случаю, когда при данном значении  $E$  выполняется неравенство  $E < U(x)$  при всех  $x \geq a$ . Предположим, что  $d\psi^2/dx > 0$  в точке  $a$ , так что  $\psi(x)$  растет по абсолютной величине. Тогда левая часть уравнения (8.7) положительна в точке  $a$ , т.е.  $\psi'$  также растет по абсолютной величине. Очевидно, что то же самое имеет место в любой точке  $x > a$ , т.е. функция  $\psi(x)$  не ограничена при  $x \rightarrow \infty$ , причем  $|\psi(x)|$  растет быстрее, чем первая степень  $x$  (т.к.  $|\psi'|$  тоже растет). Если же  $d\psi^2/dx < 0$  в точке  $a$ , то при движении вправо от  $a$  функции  $\psi(x)$  и  $\psi'(x)$  одновременно убывают по абсолютной величине. При этом возможны следующие варианты (см. Рис. 13): 1) ни одна из функций  $\psi(x), \psi'(x)$  не обращается в нуль ни при каком  $x > a$ , и тогда они асимптотически приближаются к нулю при  $x \rightarrow \infty$ ; 2) одна из функций  $\psi(x), \psi'(x)$  обращается в нуль в некоторой точке  $x_1 > a$ . Тогда в этой точке функция  $d\psi^2/dx$  меняет знак на положительный, и мы

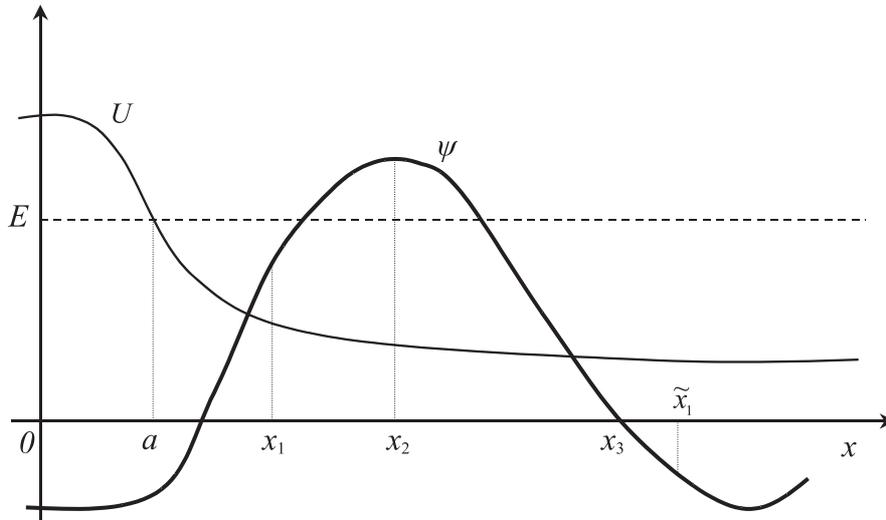


Рис. 12: Поведение решения уравнения Шредингера в случае  $U(x) < E$ .

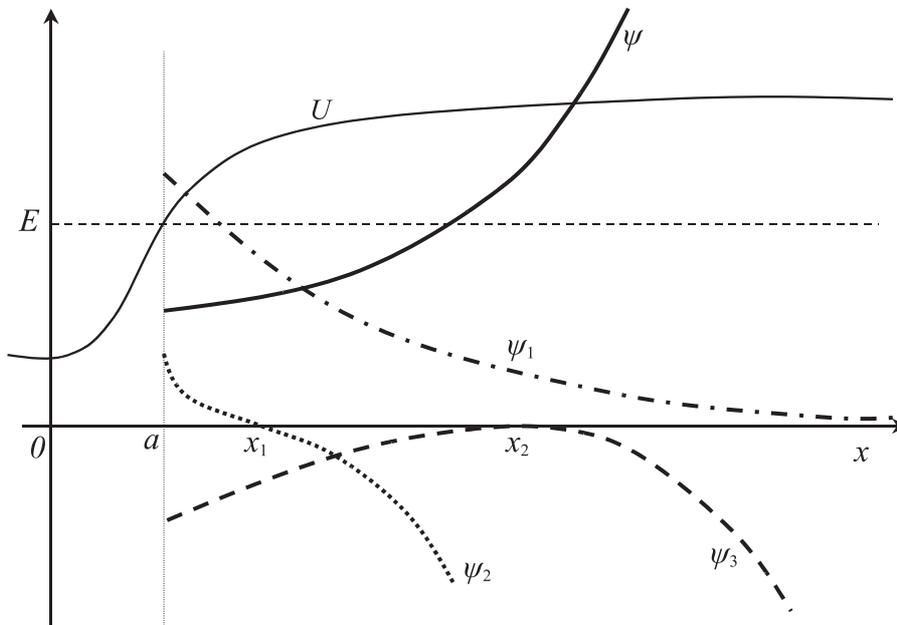


Рис. 13: Варианты поведения решения уравнения Шредингера в случае  $U(x) > E$ . Кривая  $\psi$  имеет  $(\psi^2)'(a) > 0$ ; кривые  $\psi_{1,2,3}$  имеют  $(\psi^2)'(a) < 0$  и иллюстрируют случаи 1), 2), 3) в тексте.

возвращаемся к уже рассмотренной ситуации – функция  $\psi(x)$  неограниченно растет по абсолютной величине при  $x \rightarrow \infty$ ; 3) обе функции  $\psi(x), \psi'(x)$  одновременно обращаются в нуль в некоторой точке  $x_2 > a$ . Тогда по выходе из этой точки к значениям  $x > x_2$  функции  $\psi(x), \psi'(x)$  имеют одинаковый знак, так что  $d\psi^2/dx > 0$  и функция  $\psi(x)$  опять оказывается неограниченной при  $x \rightarrow \infty$ . Итак, мы приходим к выводу, что в рассматриваемом случае решение уравнения Шредингера либо неограничено при  $x \rightarrow +\infty$ , либо стремится к нулю в этом пределе. Покажем, что на самом деле в каждом из пределов  $x \rightarrow \pm\infty$  ровно одно из решений с данным  $E$  стремится к нулю, а другое неограниченно растет, так что справедливо

**Утверждение  $\beta$ :** Если при данном значении  $E$  выполняется неравенство  $E < U(x)$  в области  $x \geq a$  ( $x \leq a$ ), то одно из решений уравнения Шредингера стремится к нулю, а другое неограниченно растет в пределе  $x \rightarrow +\infty$  ( $x \rightarrow -\infty$ ).

Докажем сначала, что в каждом из пределов  $x \rightarrow \pm\infty$  по крайней мере одно из решений должно быть неограничено. Для этого обозначим линейно-независимые решения через  $\psi(x)$ ,  $\tilde{\psi}(x)$  и преобразуем уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U(x)\psi = E\psi, \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\tilde{\psi}'' + U(x)\tilde{\psi} = E\tilde{\psi}$$

следующим образом: умножим первое из них на  $\tilde{\psi}$ , а второе – на  $\psi$  и возьмем их разность. Это дает

$$\tilde{\psi}\psi'' - \psi\tilde{\psi}'' = 0,$$

или

$$\frac{d}{dx}(\tilde{\psi}\psi' - \psi\tilde{\psi}') = 0,$$

откуда

$$\tilde{\psi}\psi' - \psi\tilde{\psi}' = C, \tag{8.9}$$

где  $C$  – некоторая константа. Предположим, что оба решения стремятся к нулю при  $x \rightarrow +\infty$ . Тогда, переходя к пределу  $x \rightarrow +\infty$  в уравнении (8.9), получим  $C = 0$ , после чего уравнение (8.9) легко интегрируется методом разделения дифференциалов, и приводит к следующему соотношению:  $\psi(x) = C_1\tilde{\psi}(x)$ , где  $C_1$  – некоторая новая постоянная. Но это равенство противоречит предположению о линейной независимости  $\psi$ ,  $\tilde{\psi}$ . Таким образом, одно из решений, например,  $\psi(x)$  должно быть неограничено при  $x \rightarrow \infty$ . Тогда, как мы выяснили выше, начиная с некоторого  $x_1 > a$ ,  $\psi(x)$  монотонно растет по абсолютной величине. Используя это обстоятельство, мы можем выразить второе линейно-независимое решение в области  $x > x_1$  через  $\psi(x)$ , а именно, проверим, что функция

$$\tilde{\psi}(x) = \psi(x) \int_x^{+\infty} \frac{dy}{\psi^2(y)} \tag{8.10}$$

удовлетворяет уравнению (8.5) [это не противоречит линейной независимости решений, ведь (8.10) есть *нелинейное интегральное* соотношение между функциями  $\psi(x)$ ,  $\tilde{\psi}(x)$ ]. Во-первых,  $\tilde{\psi}(x)$  корректно определена при  $x > x_1$ , поскольку  $\psi$  не обращается в нуль в этой области, а интеграл сходится на верхнем пределе, т.к.  $\psi^2(y)$  растет быстрее, чем  $y^2$ , как мы видели выше. Во-вторых, мы имеем по формуле Ньютона-Лейбница

$$\tilde{\psi}'(x) = \psi'(x) \int_x^{+\infty} \frac{dy}{\psi^2(y)} - \frac{1}{\psi(x)}$$

и затем

$$\tilde{\psi}''(x) = \psi''(x) \int_x^{+\infty} \frac{dy}{\psi^2(y)} - \frac{\psi'(x)}{\psi^2(x)} + \frac{\psi'(x)}{\psi^2(x)} = \psi''(x) \int_x^{+\infty} \frac{dy}{\psi^2(y)}.$$

Учитывая эту формулу, определение (8.10) и домножая уравнение (8.5) на  $\int_x^{+\infty} dy \psi^{-2}(y)$ , видим, что  $\tilde{\psi}$  действительно удовлетворяет уравнению Шредингера. Оценим абсолютную величину правой части (8.10):

$$|\tilde{\psi}(x)| = |\psi(x)| \int_x^{+\infty} \frac{dy}{\psi^2(y)} \leq |\psi(x)| \int_x^{+\infty} \frac{dy}{|\psi(x)||\psi(y)|} = \int_x^{+\infty} \frac{dy}{|\psi(y)|}.$$

Поскольку  $|\psi(y)|$  растет быстрее, чем  $y^1$ , интеграл в правой части этого неравенства существует и стремится к нулю при  $x \rightarrow \infty$ . Таким образом,  $\tilde{\psi}(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \infty$ . Предел  $x \rightarrow -\infty$  рассматривается аналогично. Итак, утверждение  $\beta$  полностью доказано.

Исследуем, далее, вопрос о нормируемости решений уравнения Шредингера. Что касается решений, осциллирующих или неограниченных хотя бы в одном из пределов  $x \rightarrow \pm\infty$ , то они, очевидно, являются ненормируемыми. Следовательно, нормируемые решения могут существовать лишь в таких потенциалах, в которых неравенство  $E < U(x)$  выполняется одновременно в обоих пределах  $x \rightarrow \pm\infty$  хотя бы при некоторых значениях  $E$ . Как мы выяснили выше, при таких  $E$  в каждом из пределов  $x \rightarrow \pm\infty$  одно из решений обязательно стремится к нулю. Поэтому при рассмотрении поведения решений сразу в обоих пределах имеется две возможности. Если решение  $\psi(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow +\infty$ , но неограничено при  $x \rightarrow -\infty$ , то тогда по доказанному второе независимое решение должно вести себя наоборот, а именно, стремиться к нулю при  $x \rightarrow -\infty$ , но быть неограниченным при  $x \rightarrow +\infty$ . Оба эти решения будут ненормируемы. Но может оказаться и так, что одно и то же решение стремится к нулю и при  $x \rightarrow -\infty$ , и при  $x \rightarrow +\infty$ . Докажем, что такое решение будет нормируемым. По предположению, в пределе  $|x| \rightarrow \infty$  выполняется неравенство  $E < U(x)$ , поэтому можно найти такие положительные числа  $a$  и  $\Delta$ , что при всех  $|x| > a$  будет выполняться неравенство  $U(x) - E \geq \Delta$ . Умножим уравнение (8.6) на  $\psi(x)$  и проинтегрируем его по  $x$  на отрезке  $[a, A]$ , где  $A$  некоторое большое, но конечное число:

$$\int_a^A dx \psi''(x) \psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_a^A dx [U(x) - E] \psi^2(x). \quad (8.11)$$

Интеграл в правой части этого равенства можно оценить снизу так

$$\int_a^A dx [U(x) - E] \psi^2(x) \geq \Delta \int_a^A dx \psi^2(x).$$

Подставляя это в (8.11) и интегрируя по частям левую часть, получим

$$\frac{\hbar^2}{2m\Delta} \left( \psi'(x)\psi(x)|_a^A - \int_a^A dx \psi'^2(x) \right) \geq \int_a^A dx \psi^2(x) \quad (8.12)$$

Перейдем теперь к пределу  $A \rightarrow \infty$  в этом неравенстве. Краевой член в левой части остается при этом конечным, поскольку  $\psi(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \infty$ . Так как справа стоит положительная величина, то положительно определенный интеграл  $\int_a^A dx \psi'^2$  в левой части

должен иметь конечный предел при  $A \rightarrow \infty$ , поскольку он входит со знаком минус, а тогда и сам интеграл  $\int_a^A dx \psi^2$  должен иметь конечный предел. Аналогично показывается, что существует интеграл  $\int_{-\infty}^{-a} dx \psi^2$ . Поэтому существует и нормировочный интеграл  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^2$ , поскольку интеграл  $\int_{-a}^{+a} dx \psi^2$  заведомо конечен как интеграл от непрерывной функции, взятый по конечному отрезку. Суммируя полученные результаты, мы формулируем

**Утверждение  $\gamma$ :** *Нормируемые решения уравнения Шредингера могут существовать лишь при таких значениях  $E$ , при которых неравенство  $E < U(x)$  выполняется одновременно в обоих пределах  $x \rightarrow \pm\infty$ , причем если такое решение при данном  $E$  существует, то оно единственно.*

Используя утверждения  $\alpha, \beta, \gamma$ , мы можем теперь описать возможные типы энергетических спектров одномерного движения:

- Тип I.** Если  $U(x) \rightarrow +\infty$  в обоих пределах  $x \rightarrow \pm\infty$ , то из утверждения  $\beta$  следует, что любое решение уравнения (8.5) либо стремится к нулю в обоих пределах  $x \rightarrow \pm\infty$  и тогда оно нормируемо в силу утверждения  $\gamma$ , либо это решение неограничено по крайней мере в одном из них. В первом случае решение является собственной функцией гамильтониана, а соответствующее значение  $E$  – его собственным значением, причем из утверждения  $\gamma$  следует, что это собственное значение невырождено. Если же при данном  $E$  оба решения неограничены, то это  $E$  не является собственным значением гамильтониана. Как мы знаем из §7.4С, нормируемыми могут быть лишь собственные функции, соответствующие дискретным собственным значениям. Таким образом, в рассматриваемом случае спектр гамильтониана является дискретным. При этом имеется бесконечное число собственных значений, поскольку по теореме о разложении по собственным функциям гамильтониана должно быть возможно разложить любую функцию из  $\mathcal{S}$ .
- Тип II.** Если  $U(x)$  стремится к конечному пределу  $U(+\infty)$  при  $x \rightarrow \infty$ , а в пределе  $x \rightarrow -\infty$   $U(x) \rightarrow +\infty$ , то в соответствии с утверждением  $\alpha$  при каждом  $E > U(+\infty)$  все решения будут осциллирующими при  $x \rightarrow +\infty$ , причем согласно утверждению  $\beta$  в пределе  $x \rightarrow -\infty$  одно из решений неограничено, а другое стремится к нулю, и потому, будучи ограниченным при всех  $x$ , является собственной функцией гамильтониана. Таким образом, все значения  $E > U(+\infty)$  являются невырожденными собственными значениями гамильтониана, образуя непрерывную часть спектра. При  $E < U(+\infty)$  мы имеем ситуацию типа I, но с тем отличием, что теперь число дискретных собственных значений не обязано быть бесконечным. То же положение имеет место в случае, когда  $U(x)$  стремится к конечному пределу при  $x \rightarrow -\infty$  и к  $+\infty$  при  $x \rightarrow +\infty$ .
- Тип III.** Если  $U(x)$  стремится к конечным значениям  $U(\pm\infty)$  в обоих пределах  $x \rightarrow \pm\infty$ , причем  $U(+\infty) \geq U(-\infty)$ , то при любом  $E > U(+\infty)$  оба решения уравнения Шредингера ограничены, т.к. согласно утверждению  $\alpha$  они осциллируют в обоих пределах  $x \rightarrow \pm\infty$ . Поэтому значения  $E > U(+\infty)$  являются двукратно вырожденными собственными значениями гамильтониана. Далее, при  $U(-\infty) < E < U(+\infty)$  оба решения осциллируют при  $x \rightarrow -\infty$ , тогда как при  $x \rightarrow \infty$  одно неограничено, а другое стремится к нулю и является собственной функцией гамильтониана. Поэтому все значения  $U(-\infty) < E < U(+\infty)$  являются невырожденными собственными значениями гамильтониана. Таким образом, область  $E > U(-\infty)$  является областью

непрерывного спектра. Наконец, при  $E < U(-\infty)$  снова возможны лишь дискретные собственные значения. Аналогично разбирается случай  $U(+\infty) < U(-\infty)$ .

**Тип IV.** Если  $U(x) \rightarrow -\infty$  хотя бы в одном из пределов  $x \rightarrow \pm\infty$ , то собственными значениями гамильтониана являются все  $E \in (-\infty, +\infty)$ , поскольку при любом  $E$  уравнение Шредингера имеет ограниченное решение. Степень вырождения собственных значений зависит от поведения  $U(x)$  в другом из пределов. В частности, если в этом пределе  $U(x)$  стремится к  $+\infty$  или  $-\infty$ , то все собственные значения являются, соответственно, невырожденными и двукратно вырожденными.

Отметим следующие общие свойства всех четырех типов спектров: **а)** дискретная часть спектра всегда расположена ниже непрерывной; **б)** дискретные собственные значения являются невырожденными; **в)** собственные функции, соответствующие дискретным уровням энергии, являются нормируемыми. Напомним, что дискретность собственных значений является необходимым, но не достаточным условием нормируемости собственных функций (см. пример 34). В данном же случае дискретность, или как говорят, *квантование* энергии в области  $E < U(\pm\infty)$  возникает как результат отбрасывания неограниченных решений, причем согласно утверждению  $\gamma$  остающиеся решения автоматически оказываются нормируемыми. Это соответствие между дискретностью уровней энергии и нормируемостью собственных функций гамильтониана имеет место и в общем случае произвольного (многомерного) движения.

Наконец, есть еще одно важное общее свойство энергетических спектров. Предположим, что потенциал  $U(x)$  ограничен снизу, и пусть  $U_{\min}$  – его значение в точке абсолютного минимума (этот случай может встретиться в любом из типов, кроме типа IV). Покажем, что тогда *собственные значения гамильтониана удовлетворяют неравенству*

$$E > U_{\min}. \quad (8.13)$$

Что касается непрерывной части спектра, то она имеется в типах II, III и лежит выше минимального из значений  $U(\pm\infty)$ , а потому и выше  $U_{\min}$ . Рассмотрим теперь дискретные уровни. Для того чтобы доказать неравенство  $E > U_{\min}$  в этом случае, умножим уравнение (8.5) на  $\psi(x)$  и проинтегрируем его по всем  $x$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi \psi'' + \int_{-\infty}^{+\infty} dx U(x) \psi^2 = E \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^2. \quad (8.14)$$

Все интегралы в этом уравнении существуют. Действительно, интеграл в правой части конечен в силу утверждения  $\gamma$ . Далее, первый интеграл в левой части можно преобразовать с помощью интегрирования по частям:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi \psi'' = \psi \psi' \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi'^2.$$

Краевые члены здесь равны нулю, а интеграл от  $\psi'^2$  сходится, как мы видели при доказательстве утверждения  $\gamma$  (см. рассуждение после неравенства (8.12)). Итак, первый интеграл в левой части уравнения (8.14) сходится, а потому должен сходиться и интеграл

от  $U\psi^2$ . Этот интеграл можно оценить снизу как

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx U(x)\psi^2 \geq U_{\min} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^2.$$

Таким образом, уравнение (8.14) приводит к искомой оценке снизу для  $E$  :

$$E \geq \frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^2} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi'^2 + U_{\min} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^2 \right) > U_{\min}.$$

**Пример 36.** Сравнение классических и квантовых типов движения. Рассмотрим движение в поле изображенного на Рис. 3 вида. Согласно данной выше классификации, энергетический спектр в квантовом случае принадлежит типу II. При  $E < 0$  возможны лишь дискретные уровни энергии. Поскольку соответствующие им собственные функции нормируемы, они описывают возможные состояния частицы. В классической механике каждому такому состоянию соответствует финитное движение частицы. Однако в то время как в классической задаче частица может иметь любое значение энергии  $E = E_3$ , энергия частицы в квантовом случае может принимать лишь некоторые выделенные значения. Далее, при  $E > 0$  лежит область невырожденного непрерывного спектра. Соответствующие собственные функции ненормируемы, и потому сами по себе не описывают возможных состояний частицы (возможные состояния строятся по этим функциям по формуле (8.4)). Другими словами, в данной квантовой задаче не существует стационарных состояний частицы с положительной энергией. Но в классическом случае имеется область положительных значений энергии ( $E = E_2$ ), при которых частица все еще может совершать финитное движение, а именно, движение в области слева от локального максимума потенциала. При этом движение с той же энергией справа от локального максимума является инфинитным. В квантовом же случае такое разделение конфигурационного пространства не имеет смысла, поскольку состояние частицы описывается единой волновой функцией, которая ни в одной из областей не обязана обращаться тождественно в нуль.

### §8.3. Свойства гладкости волновой функции. Условия сшивания

Волновая функция является решением уравнения Шредингера, и поэтому свойства гладкости этой функции (т.е. существования и непрерывности производных различных порядков) определяются свойствами гладкости потенциалов, описывающих взаимодействия частиц и входящих в гамильтониан, а в случае одномерного движения одной частицы – свойствами внешнего поля  $U(x)$ . Согласно постулату I, волновая функция должна иметь производные любого порядка. Это требование оправдывается тем, что в реальности этим свойством обладают потенциалы всех фундаментальных взаимодействий. Однако реальные взаимодействия довольно сложны, а потому сложны и соответствующие им функции  $U(x)$ . Поэтому на практике при решении уравнения Шредингера эти функции часто приходится заменять более грубыми функциями, а затем учитывать их отличие от реальных путем введения поправок к полученным простым решениям. В результате свойства гладкости функции  $U(x)$ , а потому и функции  $\psi(x)$ , ухудшаются (к чему это может привести – см. пример 37). Простейший способ огрубления функции  $U(x)$  – это аппроксимация ее прямоугольниками. Пусть, например, имеется  $K + 1$  прямоугольных участков, разделенных  $K$  точками разрыва потенциала. Координаты точек разрыва обозначим через  $a_i$ ,  $i = 1, \dots, K$ . При этом крайние левый и правый участки простираются соответственно до  $x = -\infty$  и  $x = +\infty$ . На каждом из горизонтальных отрезков уравнение Шредингера решается просто, а затем полученные решения “сшиваются” друг с другом в точках разрыва потенциала. Вообще говоря, условия сшивания зависят от типа разрыва потенциала и его вида по обе стороны от точки разрыва. Однако в наиболее важном случае, когда потенциал является ограниченной функцией, условия сшивания имеют универсальный вид, а именно, в точке разрыва потенциала должны быть непрерывны функция  $\psi(x)$  и ее первая производная  $\psi'(x)$ . Действительно, если бы мы допустили разрыв у функции  $\psi'(x)$  в некоторой точке  $a$ , то вторая производная  $\psi''(x)$  обратилась бы в этой точке в бесконечность. В этом можно убедиться графически (см. Рис. 14), представляя функцию  $\psi'(x)$  как предел последовательности гладких функций, каждая из которых совпадает с  $\psi'$  везде, исключая малую окрестность точки  $a$ , где она плавно изменяется от значения  $\psi'(a-0)$  до  $\psi'(a+0)$  [ $\psi'(a\pm 0)$  обозначают правый и левый пределы функции  $\psi'(x)$  в точке  $a$ ]. Тогда при уменьшении этой окрестности скорость изменения в ней функции  $\psi'(x)$  неограниченно растет, т.е.  $\psi''$  растет по абсолютной величине, и поэтому в пределе  $\psi''(a)$  оказывается бесконечной. Поскольку  $\psi(x)$  удовлетворяет уравнению Шредингера (8.5), то этот бесконечный разрыв функции  $\psi''(x)$  должен компенсироваться таким же разрывом в члене  $U(x)\psi(x)$ , что, однако, невозможно, поскольку функция  $\psi(x)$  непрерывна, а потенциал  $U(x)$  ограничен по предположению. Таким образом, функция  $\psi'(x)$ , а потому и  $\psi(x)$  должны быть непрерывны везде. С другой стороны, этих двух условий достаточно для однозначного определения полного решения при заданных граничных условиях. Действительно, добавление одной новой точки разрыва (с целью улучшения аппроксимации исходного потенциала) увеличивает число сшиваемых функций на две – число линейно-независимых решений уравнения (8.5) на новом горизонтальном участке, и соответственно добавляются два условия сшивания. Эти рассуждения применимы и к любой кусочно-непрерывной аппроксимации потенциала (например, с помощью кусков парабол). Итак, в случае кусочно-непрерывной аппроксимации потенциала условия сшивания решений имеют вид

$$\psi_i(a_i) = \psi_{i+1}(a_i), \quad \frac{d\psi_i}{dx}(a_i) = \frac{d\psi_{i+1}}{dx}(a_i), \quad i = 1, \dots, K, \quad (8.15)$$

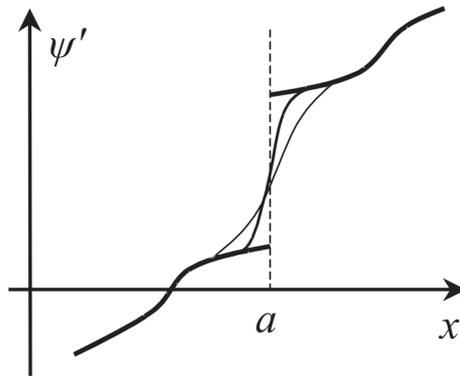


Рис. 14: Сглаживание конечного разрыва функции  $\psi'(x)$ .

где  $\psi_i(x), \psi_{i+1}(x)$  – решения уравнения (8.5) слева и справа от  $i$ -ой точки разрыва потенциала. Другой тип сшивания (случай бесконечного разрыва потенциала) мы рассмотрим в примере 37 и в §8.6В. Перейдем теперь к примерам.

*А. Прямоугольный потенциальный барьер. Коэффициенты отражения и прохождения*

Рассмотрим движение в потенциале вида

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0, & x \geq 0, \end{cases}$$

где  $U_0$  – положительная постоянная. В соответствии с классификацией, данной в §8.2, спектр энергии в этой задаче относится к типу III; дискретные уровни отсутствуют. Непрерывный спектр простирается от  $E = 0$  до  $E = +\infty$ , причем значения  $0 < E < U_0$  невырождены, а  $E > U_0$  – двукратно вырождены.

**Собственные функции гамильтониана.**

**Случай  $0 < E < U_0$ .** В области  $x < 0$  уравнение (8.5) имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1'' = E\psi_1,$$

где в соответствии с обозначениями, введенными при записи условий (8.15), неизвестная функция обозначена через  $\psi_1(x)$ . Общее решение этого уравнения удобно записать в комплексном виде:

$$\psi_1(x) = Ae^{+ikx} + \tilde{A}e^{-ikx}, \quad k = +\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (8.16)$$

где  $A, \tilde{A}$  – произвольные постоянные. В согласии с утверждением  $\alpha$ , оба линейно-независимых решения ограничены при  $x \rightarrow -\infty$ . В области  $x \geq 0$  имеем уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2'' + U_0\psi_2 = E\psi_2,$$

или

$$\psi_2'' = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \psi_2.$$

Его общее решение есть

$$\psi_2(x) = B e^{-\varkappa x} + \tilde{B} e^{\varkappa x}, \quad \varkappa = + \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar},$$

где  $B, \tilde{B}$  – новые произвольные постоянные. В согласии с утверждением  $\beta$  одно из линейно-независимых решений стремится к нулю при  $x \rightarrow +\infty$ , а другое неограниченно растет и поэтому должно быть отброшено, т.е. следует положить  $\tilde{B} = 0$ . Три коэффициента  $A, \tilde{A}, B$  связаны двумя условиями сшивания (8.15) в точке разрыва потенциала  $x = a_1 = 0$ :

$$A + \tilde{A} = B, \quad ikA - ik\tilde{A} = -\varkappa B.$$

С помощью этих уравнений любые два коэффициента можно выразить через третий, например, через  $A$ :

$$\tilde{A} = \frac{ik + \varkappa}{ik - \varkappa} A, \quad B = \frac{2ik}{ik - \varkappa} A. \quad (8.17)$$

Таким образом, для любого  $E \in (0, U_0)$  собственная функция гамильтониана имеет вид

$$\psi_E(x) = A \times \begin{cases} e^{+ikx} + \frac{ik + \varkappa}{ik - \varkappa} e^{-ikx}, & x < 0, \\ \frac{2ik}{ik - \varkappa} e^{-\varkappa x}, & x \geq 0. \end{cases} \quad (8.18)$$

Общий множитель  $A$  остается произвольным.

**Случай  $E > U_0$ .** В области  $x < 0$  решение  $\psi_1(x)$  имеет прежний вид (8.16). Решение  $\psi_2(x)$  также становится волнообразным, поскольку разность  $(U_0 - E)$  меняет знак:

$$\psi_2(x) = B e^{+i\bar{\varkappa}x} + \tilde{B} e^{-i\bar{\varkappa}x}, \quad \bar{\varkappa} = + \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}.$$

Теперь оба линейно-независимых решения при  $x \rightarrow +\infty$  ограничены, так что в общем случае обе постоянные  $B, \tilde{B}$  отличны от нуля. Они связаны с  $A, \tilde{A}$  условиями сшивания

$$A + \tilde{A} = B + \tilde{B}, \quad k(A - \tilde{A}) = \bar{\varkappa}(B - \tilde{B}).$$

На этот раз имеется два однородных уравнения для четырех неизвестных, и поэтому эти уравнения имеют два линейно-независимых решения, в качестве которых удобно выбрать

$$A = \frac{B}{2} \left(1 + \frac{\bar{\varkappa}}{k}\right), \quad \tilde{A} = \frac{B}{2} \left(1 - \frac{\bar{\varkappa}}{k}\right), \quad \tilde{B} = 0 \quad (8.19)$$

и

$$A = 0, \quad B = \frac{\tilde{A}}{2} \left(1 - \frac{k}{\bar{\varkappa}}\right), \quad \tilde{B} = \frac{\tilde{A}}{2} \left(1 + \frac{k}{\bar{\varkappa}}\right). \quad (8.20)$$

Таким образом, для каждого  $E > U_0$  гамильтониан имеет две линейно-независимые собственные функции

$$\psi_E^{(1)}(x) = B \times \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\bar{\kappa}}{k}\right) e^{+ikx} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\bar{\kappa}}{k}\right) e^{-ikx}, & x < 0, \\ e^{i\bar{\kappa}x}, & x \geq 0 \end{cases} \quad (8.21)$$

и

$$\psi_E^{(2)}(x) = \tilde{A} \times \begin{cases} e^{-ikx}, & x < 0, \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k}{\bar{\kappa}}\right) e^{+i\bar{\kappa}x} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k}{\bar{\kappa}}\right) e^{-i\bar{\kappa}x}, & x \geq 0. \end{cases} \quad (8.22)$$

Как и должно было быть, каждое  $E > U_0$  двукратно вырождено. Так же как и постоянная  $A$  в решении (8.18), общие множители  $B, \tilde{A}$  остаются произвольными.

**Случаи  $E = 0$  и  $E = U_0$ .** В случае  $E = 0$  уравнения для  $\psi_1, \psi_2$  имеют вид

$$\psi_1'' = 0, \quad \psi_2'' = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \psi_2,$$

ограниченные решения которых

$$\psi_1(x) = A, \quad \psi_2(x) = B e^{-qx}, \quad q = +\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}, \quad A, B = \text{const}.$$

Условия сшивания (8.15) требуют  $A = B, 0 = -qB$ , откуда  $A = B = 0$ , т.е.  $E = 0$  не является собственным значением гамильтониана. Далее, при  $E = U_0$  уравнения для  $\psi_1, \psi_2$  имеют вид

$$\psi_1'' = -\frac{2mU_0}{\hbar^2} \psi_1, \quad \psi_2'' = 0.$$

Единственное их ограниченное решение, удовлетворяющее условиям сшивания, есть

$$\psi_{U_0} = B \times \begin{cases} \cos(qx), & x < 0, \\ 1, & x \geq 0. \end{cases}$$

Таким образом,  $E = U_0$  является невырожденным собственным значением гамильтониана. Очевидно, что то же самое выражение для  $\psi_{U_0}(x)$  получается переходом  $E \rightarrow U_0$  в решениях (8.18) или (8.21).

#### Коэффициенты отражения и прохождения.

Напомним, что в случае величин с непрерывным спектром нормировочный коэффициент собственной функции не может быть найден из условия  $(\psi, \psi) = 1$ , поскольку в этом случае функции  $\psi(x)$  ненормируемы и поэтому сами по себе не являются векторами состояния, но по ним можно разложить любой вектор состояния. В случае оператора энергии это разложение имеет вид (8.4). Поскольку зависимость от времени в этом выражении не отделяется в виде фазового множителя,  $|\Psi(x, t)|^2$  в каждой точке пространства зависит от времени, т.е.  $\Psi(x, t)$  описывает нестационарное движение.

Хотя сами по себе найденные решения (8.18), (8.21) (8.22) не описывают возможные состояния системы, отношения коэффициентов при  $e^{\pm ikx}, e^{\pm i\bar{\kappa}x}$  в выражениях (8.18) – (8.22) имеют важный физический смысл. Для того чтобы его выяснить, рассмотрим движение

частицы, описываемое вектором состояния вида (8.4), в котором коэффициенты  $c_E$  вещественны и отличны от нуля лишь в малой окрестности  $\Delta E$  вокруг некоторого значения  $E_0$  (энергия “размазана” по интервалу  $\Delta E$ ). Малость  $\Delta E$  означает, что  $\Delta E \ll E_0$ . Определим вид функции  $\Psi(x, t)$  при  $|t| = T$ , где  $T$  есть некоторое большое, но конечное число, а именно,  $T \gg \hbar/\Delta E$ .

**Случай  $0 < E < U_0$ .** Рассмотрим сначала область  $x < 0$ . Решение (8.18) имеет в этой области вид  $\psi_1(x) = Ae^{ikx} + \tilde{A}e^{-ikx}$ , где  $A, \tilde{A}$  связаны соотношением (8.17), поэтому

$$\Psi(x, t) = \int_{\Delta E} dE c_E e^{-iEt/\hbar} (Ae^{i\sqrt{2mE}x/\hbar} + \tilde{A}e^{-i\sqrt{2mE}x/\hbar}) \quad (8.23)$$

(предполагается, что весь интервал энергии, в котором  $c_E$  отлично от нуля, содержится в области  $(0, U_0)$ ). При увеличении  $|t|$  экспоненты  $e^{-iEt/\hbar \pm i\sqrt{2mE}x/\hbar}$ , рассматриваемые как функции переменной  $E$ , все быстрее и быстрее осциллируют. При выполнении условия  $|t| \gg \hbar/\Delta E$  эти экспоненты успевают проосциллировать большое число раз, пока переменная  $E$  пробегает отрезок интегрирования. Поэтому, за одним-единственным исключением, интеграл (8.23) будет практически равен нулю независимо от вида функции  $c_E$ . Исключением будет тот случай, когда в интервал интегрирования попадает точка экстремума показателя одной из экспонент. Похожая ситуация уже разбиралась подробно в §6.3В и §7.4С. В окрестности экстремума показатель меняется относительно медленно, и поэтому вклады от соседних с экстремумом точек складываются практически в одной фазе. Положения экстремумов определяются уравнениями

$$\frac{\partial}{\partial E}(-Et \pm \sqrt{2mE}x) = 0,$$

откуда

$$x = \pm \sqrt{\frac{2E}{m}} t. \quad (8.24)$$

Верхний (нижний) знак в этих формулах соответствует первому (второму) слагаемому в подынтегральном выражении в (8.23). Поскольку  $E$  принадлежит узкому интервалу  $\Delta E$  вокруг значения  $E_0$ , то из (8.24) следует, что в каждый момент времени  $t$  функция  $\Psi(x, t)$  заметно отлична от нуля лишь в интервале

$$\Delta x = \frac{t}{\sqrt{2mE_0}} \Delta E \quad (8.25)$$

вокруг значения

$$x_0 = \pm \sqrt{\frac{2E_0}{m}} t. \quad (8.26)$$

Сравним соотношение (8.26) с законом равномерного движения частицы в классической механике:  $x = x_0 + v(t - t_0)$ . При больших  $|x|, |t|$  он переходит в  $x = vt$ . Мы видим, что в отдаленном прошлом (будущем) область значений  $x$ , в которой волновая функция  $\Psi(x, t)$  заметно отлична от нуля, равномерно перемещается в пространстве со скоростью  $v = \sqrt{2E_0/m}$  ( $v = -\sqrt{2E_0/m}$ ). Такие состояния называют *волновыми пакетами*, а скорость  $v$  — *групповой скоростью* волнового пакета. Итак, при  $t \rightarrow -\infty$  функция  $\Psi(x, t)$

описывает волновой пакет, налетающий на потенциальный барьер слева с групповой скоростью  $v = \sqrt{2E_0/m}$ , а при  $t \rightarrow +\infty$  – пакет, улетающий влево от барьера со скоростью  $v = -\sqrt{2E_0/m}$ . При этом соотношение между скоростью пакета и энергией  $E_0$  такое же, как и в классической механике между скоростью и энергией частицы, поскольку при  $x < 0$  имеем  $U = 0$ , и энергия  $E_0$  равна кинетической энергии частицы  $mv^2/2$ .

Таким образом, в моменты времени  $t = -T$  и  $t = +T$  выражение (8.23) для волновой функции сводится, соответственно, к

$$\Psi(x, -T) = A(E_0) \int_{\Delta E} dE c_E e^{iET/\hbar} e^{i\sqrt{2mE}x/\hbar} \quad (8.27)$$

и

$$\Psi(x, +T) = \tilde{A}(E_0) \int_{\Delta E} dE c_E e^{-iET/\hbar} e^{-i\sqrt{2mE}x/\hbar}. \quad (8.28)$$

Здесь коэффициенты  $A, \tilde{A}$  заменены их значениями при  $E = E_0$  и вынесены за знак интеграла. Это допустимо, поскольку по предположению  $\Delta E \ll E_0$ , и поэтому коэффициенты  $A, \tilde{A}$  мало меняются на отрезке интегрирования, в отличие от  $c_E$ . Комплексно сопрягая равенство (8.27) с учетом вещественности  $c_E$  и сравнивая его с (8.28), находим следующую связь

$$\Psi(x, +T) = \frac{\tilde{A}(E_0)}{A^*(E_0)} \Psi^*(x, -T), \quad x < 0. \quad (8.29)$$

Рассмотрим теперь область  $x \geq 0$ . Здесь функция  $\Psi(x, t)$  имеет вид

$$\Psi(x, t) = \int_{\Delta E} dE c_E B e^{-iEt/\hbar - \sqrt{2m(U_0 - E)}x/\hbar}.$$

Она осциллирует по  $t$ , но не по  $x$ , поэтому показатель экспоненты не имеет экстремума в области интегрирования, так что с ростом  $|t|$  волновая функция очень быстро обращается в нуль:

$$\Psi(x, \pm T) \approx 0, \quad x \geq 0.$$

Таким образом, при  $E \in (0, U_0)$  вероятность нахождения частицы в области  $x > 0$  заметно отлична от нуля лишь в течение конечного промежутка времени, причем быстро затухает с ростом  $x$ . Другими словами, в рассматриваемом случае происходит *полное отражение частицы от потенциального барьера*. При этом соотношение (8.29) гарантирует, что если в начале процесса, ( $t = -T$ ) сумма вероятностей всех значений  $x$  равнялась единице, то и в конце процесса ( $t = +T$ ) она также будет равна единице. Действительно, как мы выяснили выше, при  $|t| = T$  эта вероятность заметно отлична от нуля лишь в окрестности (8.25) вокруг значения (8.26), поэтому

$$\int_{\Delta x} dx |\Psi(x, -T)|^2 = 1.$$

Выражая здесь  $\Psi(x, -T)$  через  $\Psi(x, +T)$  с помощью (8.29), находим

$$\left| \frac{A^*(E_0)}{\tilde{A}(E_0)} \right|^2 \int_{\Delta x} dx |\Psi(x, +T)|^2 = 1.$$

Но согласно соотношению (8.17)

$$\left| \frac{A^*(E_0)}{\tilde{A}(E_0)} \right|^2 = \frac{|A(E_0)|^2}{|\tilde{A}(E_0)|^2} = \left| \frac{ik - \varkappa}{ik + \varkappa} \right|^2 = 1,$$

и потому

$$\int_{\Delta x} dx |\Psi(x, +T)|^2 = 1.$$

Рассмотрим теперь

**Случай  $E > U_0$ .** Рассмотрим эволюцию волновой функции

$$\Psi(x, t) = \int_{\Delta E} dE c_E e^{-iEt/\hbar} \psi_E^{(1)}(x), \quad (8.30)$$

составленной из собственных функций (8.21), причем коэффициенты  $c_E$  снова вещественны и отличны от нуля лишь в малой окрестности  $\Delta E$  вокруг некоторого значения  $E_0 > U_0$ . В области  $x < 0$  эта волновая функция имеет тот же вид, что и (8.23), где коэффициенты  $A, \tilde{A}$  связаны теперь соотношениями (8.19). Поэтому, повторяя дословно все рассуждения, проведенные выше для случая  $E_0 < U_0$ , приходим к тем же соотношениям (8.24) – (8.29). В области же  $x \geq 0$  волновая функция имеет вид

$$\Psi(x, t) = \int_{\Delta E} dE c_E B e^{-iEt/\hbar + i\sqrt{2m(E-U_0)} x/\hbar}. \quad (8.31)$$

Условие экстремума показателя экспоненты

$$\frac{\partial}{\partial E} (-Et + \sqrt{2m(E-U_0)} x) = 0,$$

дает

$$x = \sqrt{\frac{2(E-U_0)}{m}} t. \quad (8.32)$$

В области  $x \geq 0$  это соотношение удовлетворяется лишь при  $t > 0$  и означает, что при достаточно больших  $t$  функция  $\Psi(x, t)$  заметно отлична от нуля лишь в интервале

$$\tilde{\Delta}x = \frac{t}{\sqrt{2m(E_0-U_0)}} \Delta E$$

вокруг значения

$$\tilde{x}_0 = \sqrt{\frac{2(E_0-U_0)}{m}} t.$$

Мы видим, что в отдаленном будущем область значений  $x > 0$ , в которой волновая функция  $\Psi(x, t)$  заметно отлична от нуля, равномерно перемещается в пространстве со скоростью  $\tilde{v} = \sqrt{2(E_0-U_0)/m}$ . Собирая полученные результаты, мы приходим к выводу, что

волновая функция (8.30) описывает процесс, в котором волновой пакет налетает на потенциальный барьер слева со скоростью  $+\sqrt{2E_0/m}$ , в результате чего он разделяется на два волновых пакета, один из которых движется от барьера влево со скоростью  $-\sqrt{2E_0/m}$ , а другой – вправо со скоростью  $+\sqrt{2(E_0 - U_0)/m}$ .

Подсчитаем теперь суммы вероятностей всех значений координат в удаленном прошлом и в удаленном будущем. Обе суммы должны быть равны единице:

$$\int_{\Delta x} dx |\Psi(x, -T)|^2 = \int_{\Delta x} dx |\Psi(x, +T)|^2 + \int_{\tilde{\Delta} x} dx |\Psi(x, +T)|^2 = 1.$$

С другой стороны, в области  $x < 0$  функции  $\Psi(x, -T)$ ,  $\Psi(x, +T)$  связаны уравнением (8.29), из которого следует

$$\int_{\Delta x} dx |\Psi(x, -T)|^2 = \left| \frac{A^*(E_0)}{\tilde{A}(E_0)} \right|^2 \int_{\Delta x} dx |\Psi(x, +T)|^2.$$

Величина  $R \equiv \int_{\Delta x} dx |\Psi(x, +T)|^2$  есть вероятность найти частицу при  $t = +T$  в области слева от барьера, т.е. вероятность ее отражения от барьера. Величина же  $D \equiv \int_{\tilde{\Delta} x} dx |\Psi(x, +T)|^2$  есть вероятность найти частицу при  $t = +T$  в области справа от барьера, т.е. вероятность ее прохождения над барьером. Величины  $R$  и  $D$  называют *коэффициентами отражения и прохождения*, соответственно. Они являются функциями энергии. Из написанных выше соотношений следует, что

$$R(E_0) = \left| \frac{\tilde{A}(E_0)}{A^*(E_0)} \right|^2, \quad D = 1 - R. \quad (8.33)$$

Подставляя для  $A, \tilde{A}$  их выражения из (8.19), находим, опуская для краткости индекс 0 у энергии,

$$R(E) = \left| \frac{k - \tilde{\kappa}}{k + \tilde{\kappa}} \right|^2 = \left( \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}} \right)^2.$$

Мы видим, что в то время как при  $E < U_0$  отражение частицы от барьера происходит с вероятностью единица (как и в классической механике), в случае  $E > U_0$  возможно и отражение, и прохождение частицы. Вероятность прохождения близка к единице лишь при  $E_0 \gg U_0$ .

Наконец, для того чтобы выяснить смысл второго линейно-независимого решения (8.22), надо рассмотреть эволюцию волновой функции вида

$$\Psi(x, t) = \int_{\Delta E} dE c_E e^{-iEt/\hbar} \psi_E^{(2)}(x). \quad (8.34)$$

Этот случай отличается от только что рассмотренного формальной заменой  $x \rightarrow -x$ ,  $k \leftrightarrow \tilde{\kappa}$ , поэтому функция (8.34) описывает движение волнового пакета, налетающего на барьер справа со скоростью  $-\sqrt{2(E_0 - U_0)/m}$  и затем разделяющегося на два, один из которых улетает от барьера вправо со скоростью  $+\sqrt{2(E_0 - U_0)/m}$ , а второй – влево со скоростью  $-\sqrt{2E_0/m}$ . Интересно отметить, что при этом вероятности отражения и прохождения оказываются теми же, что и ранее.

*В. Симметричная прямоугольная потенциальная яма*

Рассмотрим движение частицы в потенциале

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & x \in [-a, +a], \\ 0, & x \notin [-a, +a], \end{cases}$$

где  $U_0$  – положительная постоянная. Энергетический спектр в этой задаче относится к типу III. При  $E > 0$  имеется непрерывный спектр, причем каждое значение двукратно вырождено. В этом случае решение задачи и смысл линейно-независимых решений получаются аналогично рассмотренному в предыдущем пункте. Поэтому мы подробно рассмотрим случай  $E < 0$ , где возможны лишь дискретные уровни энергии. Обозначая решение уравнения (8.5) в области  $x \leq -a$  через  $\psi_1(x)$ , имеем для нее следующее уравнение

$$\psi_1'' = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \psi_1.$$

Общее решение этого уравнения есть

$$\psi_1(x) = Ae^{+\kappa x} + \tilde{A}e^{-\kappa x}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar},$$

где  $A, \tilde{A}$  – произвольные постоянные. Условие ограниченности решения требует  $\tilde{A} = 0$ , поскольку  $e^{-\kappa x} \rightarrow \infty$  при  $x \rightarrow -\infty$ . Аналогично, в области  $x \geq +a$  волновая функция удовлетворяет уравнению

$$\psi_3'' = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \psi_3,$$

общее решение которого имеет вид

$$\psi_3(x) = Ce^{-\kappa x} + \tilde{C}e^{+\kappa x}$$

с тем же значением  $\kappa$ , но теперь неограниченным оказывается решение  $e^{+\kappa x}$ , и потому должно быть  $\tilde{C} = 0$ . Наконец, в области  $-a \leq x \leq +a$  волновая функция удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_2'' - U_0 \psi_2 = E \psi_2,$$

или

$$\psi_2'' = -k^2 \psi_2, \quad k = +\frac{\sqrt{2m(U_0 - |E|)}}{\hbar}.$$

Как мы знаем, в любом поле возможны лишь уровни, удовлетворяющие  $E > U_{\min}$ . В данном случае это условие дает  $E > -U_0$ , или  $|E| < U_0$ . Поэтому параметр  $k$  является вещественным, а общим решением является линейная комбинация тригонометрических (а не экспоненциальных) функций:

$$\psi_2(x) = B \sin(kx) + \tilde{B} \cos(kx).$$

Это решение ограничено при любых  $B, \tilde{B}$ . Значения постоянных  $A, B, \tilde{B}, C$  определяются условиями сшивания и условием нормировки. Условия сшивания имеют вид

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a), \quad \psi_1'(-a) = \psi_2'(-a), \quad \psi_2(+a) = \psi_3(+a), \quad \psi_2'(a) = \psi_3'(a)$$

и после подстановки в них найденных решений дают

$$Ae^{-\varkappa a} = -B \sin(ka) + \tilde{B} \cos(ka), \quad (8.35)$$

$$A\varkappa e^{-\varkappa a} = k(B \cos(ka) + \tilde{B} \sin(ka)), \quad (8.36)$$

$$Ce^{-\varkappa a} = B \sin(ka) + \tilde{B} \cos(ka), \quad (8.37)$$

$$C\varkappa e^{-\varkappa a} = k(-B \cos(ka) + \tilde{B} \sin(ka)). \quad (8.38)$$

Эти уравнения представляют собой систему четырех линейных однородных уравнений относительно четырех неизвестных постоянных  $A, B, \tilde{B}, C$ . Условием совместности этой системы является обращение в нуль ее определителя:

$$\begin{vmatrix} e^{-\varkappa a}, & \sin(ka), & -\cos(ka), & 0 \\ \varkappa e^{-\varkappa a}, & -k \cos(ka), & -k \sin(ka), & 0 \\ 0, & -\sin(ka), & -\cos(ka), & e^{-\varkappa a} \\ 0, & k \cos(ka), & -\sin(ka), & \varkappa e^{-\varkappa a} \end{vmatrix} = 0.$$

Несложное, но несколько громоздкое разложение определителя приводит к следующему простому уравнению

$$\{\varkappa \cos(ka) - k \sin(ka)\} \{k \cos(ka) + \varkappa \sin(ka)\} = 0.$$

Таким образом, энергия  $E$ , функциями которой являются  $k$  и  $\varkappa$ , должна удовлетворять одному из двух уравнений: либо  $\varkappa \cos(ka) - k \sin(ka) = 0$ , либо  $k \cos(ka) + \varkappa \sin(ka) = 0$ . В первом случае уравнения (8.35) – (8.38) дают  $A = C = \tilde{B} e^{\varkappa a} \cos(ka)$ ,  $B = 0$ , а во втором  $A = -C = -B e^{\varkappa a} \sin(ka)$ ,  $\tilde{B} = 0$ . Итак, при  $E < 0$  гамильтониан имеет собственные функции двух типов:

$$E : \varkappa \cos(ka) - k \sin(ka) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi^{(+)}(x) = \tilde{B} \times \begin{cases} \cos(ka)e^{\varkappa(x+a)}, & x \leq -a, \\ \cos(kx), & -a \leq x \leq +a, \\ \cos(ka)e^{\varkappa(-x+a)}, & x \geq +a \end{cases}$$

и

$$E : k \cos(ka) + \varkappa \sin(ka) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi^{(-)}(x) = B \times \begin{cases} -\sin(ka)e^{\varkappa(x+a)}, & x \leq -a, \\ \sin(kx), & -a \leq x \leq +a, \\ \sin(ka)e^{\varkappa(-x+a)}, & x \geq +a. \end{cases}$$

Из этих выражений видно, что  $\psi^{(+)}(-x) = \psi^{(+)}(x)$ ,  $\psi^{(-)}(-x) = -\psi^{(-)}(x)$ , чем и объясняется смысл верхнего индекса в обозначении этих функций. Состояния, описываемые функциями  $\psi^{(+)}$  ( $\psi^{(-)}$ ), а также соответствующие уровни энергии, называют четными (нечетными). В обоих случаях собственные значения энергии являются решениями трансцендентных уравнений. Эти решения удобно искать графически. Для этого заметим, что уравнение  $\varkappa \cos(ka) = k \sin(ka)$  эквивалентно двум уравнениям  $\cos(ka) = \pm \alpha(k a)$ , где  $\alpha = \hbar / (a \sqrt{2mU_0})$ , причем из решений этих последних следует брать лишь те, для которых аргумент косинуса ( $ka$ ) принадлежит либо первой, либо третьей четверти (поскольку из исходного уравнения следует, что синус и косинус имеют одинаковые знаки). Эквивалентность проверяется возведением обоих уравнений в квадрат с учетом соотношения  $(a\alpha)^2(\varkappa^2 + k^2) = 1$ , которое следует из определений параметров  $k, \varkappa, \alpha$ . Аналогично, уравнение  $k \cos(ka) = -\varkappa \sin(ka)$  эквивалентно двум уравнениям  $\sin(ka) = \pm \alpha(k a)$ , причем

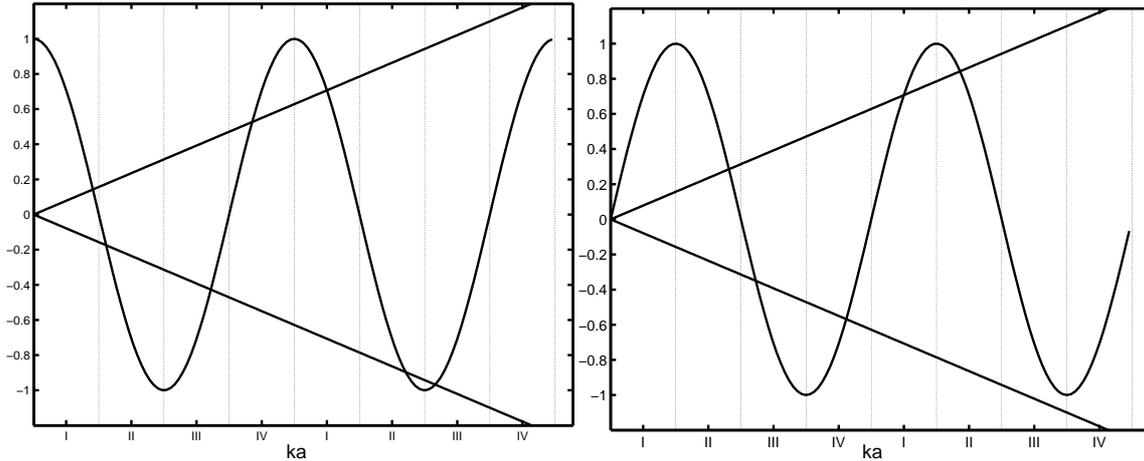


Рис. 15: Графическое определение четных и нечетных уровней энергии в симметричной потенциальной яме.

аргумент синуса должен лежать либо во второй, либо в четвертой четверти. Полученные уравнения решены графически на Рис. 15 для случая  $\alpha = 0, 1$ . В этом случае имеется четыре четных уровня (по два в первой и третьей четверти) и три нечетных (два во второй четверти и один в четвертой), т.е. всего семь уровней энергии. Из построения очевидно, что при любом значении  $\alpha \neq 0$  имеется конечное число уровней. При увеличении  $\alpha$  (т.е. при уменьшении  $U_0$  или  $a$ ) число уровней сокращается, но при любом  $\alpha$  имеется по крайней мере одно четное решение. Нечетные же уровни существуют лишь при достаточно малых  $\alpha$ , а именно, момент исчезновения последнего нечетного уровня соответствует моменту, когда точка пересечения верхней прямой с синусом переходит из второго квадранта в первый, проходя крайний левый максимум синуса, т.е. когда  $ka = \pi/2$ . При этом  $\alpha\pi/2 = 1$ , или  $a\sqrt{2mU_0}/\hbar = \pi/2$ .

Наконец, нормируем полученные решения. Для четных решений условие нормировки  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^2 = 1$  дает

$$\int_{-\infty}^{-a} dx \tilde{B}^2 \cos^2(ka) e^{2\kappa(x+a)} + \int_{-a}^{+a} dx \tilde{B}^2 \cos^2(kx) + \int_{+a}^{+\infty} dx \tilde{B}^2 \cos^2(ka) e^{2\kappa(-x+a)} = 1.$$

Вычисление интегралов приводит к условию  $\tilde{B}^2(a + 1/\kappa) = 1$ . Для нечетных решений получается тот же результат (с заменой  $\tilde{B} \rightarrow B$ ), поэтому, полагая

$$\tilde{B} = B = \left( a + \frac{1}{\kappa} \right)^{-1/2},$$

мы получаем нормированные функции  $\psi^{(\pm)}(x)$ .

**Пример 37. Бесконечно глубокая яма.** Полученные выражения сильно упрощаются в случае больших  $U_0$ , а именно, если  $U_0 \gg \hbar^2/(ma^2)$ , или  $\alpha \ll 1$ . Величина  $\hbar^2/(ma^2)$  имеет простой физический смысл: по порядку величины это есть минимальная средняя кинетическая энергия, которую имеет частица массы  $m$ , если ее движение ограничено отрезком длины  $a$ . Действительно, если известно, что частица находится на этом отрезке, то

неопределенность ее координаты заведомо меньше  $a$ . Следовательно, согласно соотношению неопределенности (7.74) неопределенность ее импульса будет больше  $\hbar/(2a)$ , т.е. при многократном измерении импульса частицы будут получаться в среднем значения порядка  $\hbar/a$  или выше, а для ее кинетической энергии  $p^2/(2m)$  – соответственно значения порядка  $(\hbar/a)^2/m$  или выше. Если интересоваться лишь нормальным состоянием и несколькими первыми возбужденными, то удобнее отсчитывать энергию частицы от дна ямы, т.е. рассматривать разность  $\mathcal{E} = E - (-U_0) = U_0 - |E| > 0$ . Для таких уровней будет выполняться неравенство  $\mathcal{E} \ll U_0$ , а потому и  $\kappa a = \sqrt{2m|E|} a/\hbar \approx \sqrt{2mU_0} a/\hbar \gg 1$ . В силу последнего неравенства собственные функции будут очень быстро убывать вне интервала  $[-a, +a]$ , поскольку в этих областях  $\psi^{(\pm)}(x) \sim e^{-\kappa(|x|-a)}$ . Если формально устремить  $U_0 \rightarrow +\infty$  ( $\alpha \rightarrow 0$ ), то мы получим  $\psi^{(\pm)}(x) = 0$  для любого  $x \notin [-a, +a]$  и любого  $\mathcal{E}$  (бесконечно глубокая яма). В этом пределе уравнения  $\cos(ka) = \pm\alpha(ka)$ ,  $\sin(ka) = \pm\alpha(ka)$  сводятся к  $\cos(\sqrt{2m\mathcal{E}} a/\hbar) = 0$  и  $\sin(\sqrt{2m\mathcal{E}} a/\hbar) = 0$ , из которых следуют выражения

$$\mathcal{E}_n^{(+)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 (n + 1/2)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.39)$$

$$\mathcal{E}_n^{(-)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 n^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8.40)$$

для четных и нечетных уровней энергии, а соответствующие им собственные функции внутри интервала  $(-a, +a)$  принимают вид

$$\psi_n^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi(n + 1/2)x}{a}\right), \quad \psi_n^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right). \quad (8.41)$$

Рассчитаем с помощью этих выражений основные характеристики стационарного движения частицы. Плотности распределения вероятностей координат в четных и нечетных состояниях даются выражениями  $w_n^{(\pm)}(x) = |\psi_n^{(\pm)}(x)|^2$ . Среднее значение координаты в четном состоянии есть

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |\psi_n^{(+)}(x)|^2 = \int_{-a}^{+a} dx \frac{x}{a} \cos^2\left(\frac{\pi(n + 1/2)x}{a}\right) = 0$$

в силу антисимметрии интеграла относительно замены переменной интегрирования  $x \rightarrow -x$ . Тот же результат получается и в нечетных состояниях. Далее, квадрат дисперсии координаты в четных состояниях

$$\begin{aligned} [D_x^{(+)}]^2 &= \overline{(x - \bar{x})^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 |\psi_n^{(+)}(x)|^2 = \int_{-a}^{+a} dx \frac{x^2}{a} \cos^2\left(\frac{\pi(n + 1/2)x}{a}\right) \\ &= 2a^2 \int_0^1 dy y^2 \frac{1 + \cos(\pi(2n + 1)y)}{2}. \end{aligned} \quad (8.42)$$

Интегрируя  $y^2 \cos(\pi(2n + 1)y)$  два раза по частям, находим

$$D_x^{(+)} = a \left( \frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2(2n + 1)^2} \right)^{1/2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

В нечетных же состояниях аналогично получается

$$D_x^{(-)} = a \left( \frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2(2n)^2} \right)^{1/2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Мы видим, что в обоих случаях с ростом  $n$  дисперсия координаты быстро приближается к  $a/\sqrt{3}$ . Найдем теперь распределение вероятностей импульса частицы. Например, для нечетных состояний по формуле (7.62) находим, применяя формулу Эйлера,

$$\begin{aligned} c_p^{(-)} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-a}^{+a} dx e^{-ipx/\hbar} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right) = \sqrt{\frac{a}{2\pi\hbar}} \int_{-1}^{+1} dy e^{-ipay/\hbar} \frac{e^{i\pi n y} - e^{-i\pi n y}}{2i} \\ &= \frac{1}{i} \sqrt{\frac{a}{2\pi\hbar}} \left( \frac{\sin(\pi n - pa/\hbar)}{\pi n - pa/\hbar} - \frac{\sin(\pi n + pa/\hbar)}{\pi n + pa/\hbar} \right) = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{2\pi a}{\hbar}} \frac{n(-1)^n \sin(pa/\hbar)}{(\pi n)^2 - (pa/\hbar)^2}. \end{aligned}$$

Таким образом, плотность распределения вероятностей импульса (которая является автоматически нормированной, поскольку таковы функции (8.41)) в нечетных состояниях имеет вид

$$w_n^{(-)}(p) = \frac{a}{\hbar} \frac{2\pi n^2 \sin^2(pa/\hbar)}{[(\pi n)^2 - (pa/\hbar)^2]^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Аналогичное вычисление для четных состояний дает

$$w_n^{(+)}(p) = \frac{a}{\hbar} \frac{2\pi(n+1/2)^2 \cos^2(pa/\hbar)}{[\pi^2(n+1/2)^2 - (pa/\hbar)^2]^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Из этих формул видно, что естественной единицей для измерения импульса в данной задаче является  $\hbar/a$ , а для плотности его вероятности –  $a/\hbar$ . Каждая функция  $w_n^{(+)}(p)$ ,  $n = 1, 2, \dots$  описывает пару четко выраженных пиков, расположенных симметрично относительно нуля с максимумами в точках  $p = \pm \hbar\pi(n+1/2)/a$ , а функция  $w_n^{(-)}(p)$ ,  $n = 1, 2, \dots$  – такие же пики с максимумами в  $p = \pm \hbar\pi n/a$ . Мы видим, что в каждом состоянии  $\psi_n^{(\pm)}$  с  $n = 1, 2, \dots$  импульс частицы размазан в окрестностях тех двух значений, которые может иметь классическая частица при движении в яме с кинетической энергией  $\mathcal{E}_n^{(\pm)}$ . Все пики имеют одинаковую высоту  $a/(2\pi\hbar)$  и ширину  $2\pi\hbar/a$  у основания. Функция же  $w_0^{(+)}$ , описывающая распределение вероятностей импульса в нормальном состоянии, имеет один более высокий и широкий пик с максимумом в нуле. На Рис. 16 показаны графики функций  $w_2^{(\pm)}(p)$ .

Все функции  $w^{(\pm)}(p)$  являются четными функциями импульса, и поэтому  $\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} dp p w_n^{(\pm)}(p) = 0$ , что естественно, поскольку в стационарном состоянии частица в среднем покоится. С помощью  $w(p)$  можно рассчитать среднее любой функции импульса, например,  $D_p^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dp p^2 w(p)$ . Однако дисперсию проще найти, заметив, что  $\overline{p^2} = \overline{2mT} = 2m\bar{T}$ , где  $T$  есть кинетическая энергия частицы. С другой стороны,  $\bar{T} = \bar{E} - \bar{U} = E + U_0 = \mathcal{E}$ , поскольку по определению в любом стационарном состоянии энергия имеет определенное значение, а средняя потенциальная энергия частицы равна  $-U_0$  (т.к. частица все время находится внутри ямы, где  $U = -U_0$ ). Итак,

$$D_p^{(+)} = \frac{\hbar\pi}{a}(n+1/2), \quad D_p^{(-)} = \frac{\hbar\pi}{a}n.$$

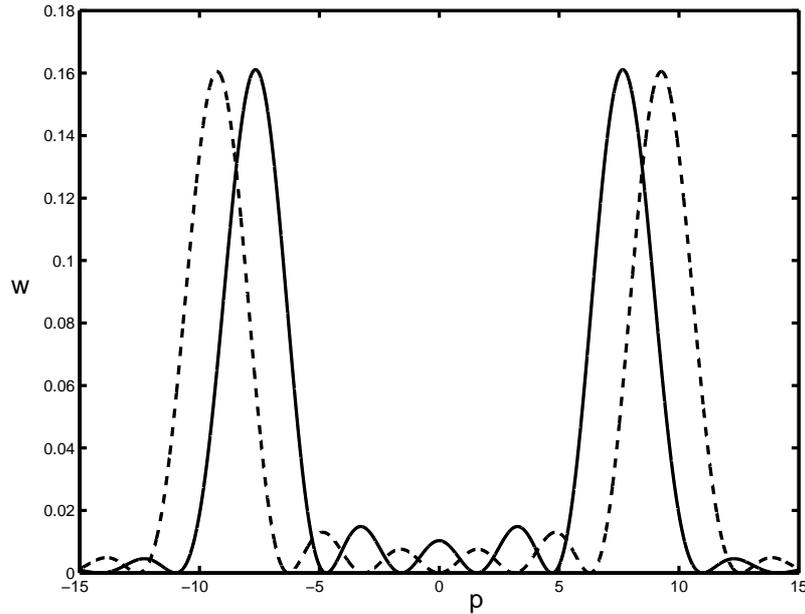


Рис. 16: Плотности распределения вероятностей импульса частицы в состояниях  $\psi_2^{(+)}$  (сплошная линия) и  $\psi_3^{(-)}$  (штриховая линия) в бесконечно глубокой яме. Импульс измеряется в единицах  $\hbar/a$ , а плотность вероятности – в единицах  $a/\hbar$ .

Дисперсия импульса растет с увеличением номера состояния, что в данном случае связано просто с удалением пиков друг от друга.

Как уже было указано в начале §8.3, в результате огрубления потенциала свойства гладкости волновой функции ухудшаются. Если в точках конечного разрыва потенциала разрыв терпит вторая производная функции  $\psi(x)$ , то в случае бесконечного разрыва потенциала разрывной является уже ее первая производная. В рассматриваемом примере бесконечно-глубокой ямы вне отрезка  $[-a, +a]$  имеем  $\psi = 0$ , поэтому также и  $\psi' = 0$ . Но значения  $\psi'(\pm a)$ , вычисленные внутри ямы, не равны нулю. Например, в нормальном состоянии

$$\frac{d\psi_0^{(+)}}{dx}(a-0) = -\frac{\pi}{2a^{3/2}}.$$

Из-за наличия таких разрывов некоторые характеристики движения частицы могут вообще потерять смысл. Попробуем найти, например, среднее значение квадрата кинетической энергии частицы в нормальном состоянии:

$$\overline{T^2} = \frac{\overline{p^4}}{4m^2} = \frac{1}{4m^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dp p^4 \frac{\pi/2a \cos^2(pa/\hbar)}{\hbar[(\pi/2)^2 - (pa/\hbar)^2]^2}$$

Легко видеть, что этот интеграл расходится при больших  $p$ . Действительно, при  $p \rightarrow \infty$  подынтегральное выражение ведет себя как  $\cos^2(pa/\hbar)$ , т.е. положительно и не стремится к нулю. Таким образом, мы получаем физически бессмысленный результат  $\overline{T^2} = \infty$ . На самом деле указанная расходимость означает, что значение величины  $\overline{T^2}$  определяется в основном мелкомасштабной структурой потенциала, и потому на него сильно влияют нарушения гладкости потенциала и, как следствие, нарушения гладкости волновой

функции. Это естественно, поскольку  $\hat{T}^2$  является оператором довольно высокого дифференциального порядка:  $\hat{T}^2 = (\hbar^2/2m)^2 d^4/dx^4$ . Другими словами, если потенциал типа бесконечно-глубокая яма получен огрублением какого-либо более гладкого потенциала, то эта грубая модель будет применима для вычисления лишь таких характеристик системы, которые определяются поведением функций  $w^{(\pm)}(p)$  при малых  $p$ .

**Пример 38. Мелкая яма.** Точные выражения для уровней энергии в яме упрощаются также в противоположном случае малых  $U_0$ , а именно, при выполнении условия  $U_0 \ll \hbar^2/(ma^2)$ , т.е.  $\alpha \gg 1$ . Поскольку  $|E| < U_0$ , то одновременно выполняется и неравенство  $(U_0 - |E|) \ll \hbar^2/(ma^2)$ , откуда  $ka \ll 1$ ,  $\varkappa a \ll 1$ . При этом имеется единственный – четный – уровень энергии, удовлетворяющий уравнению  $\varkappa \cos(ka) = k \sin(ka)$ . Поскольку  $\cos(ka) \approx 1$ ,  $\sin(ka) \approx ka$  при  $ka \ll 1$ , то имеем приближенно  $\varkappa = k(ka)$ , или

$$\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} = \frac{2ma(U_0 - |E|)}{\hbar^2}.$$

Возводя это равенство в квадрат и учитывая, что  $ma^2(U_0 - |E|)/\hbar^2 \ll 1$ , находим

$$|E| = \frac{2ma^2(U_0 - |E|)^2}{\hbar^2} \ll (U_0 - |E|),$$

откуда следует, что  $|E| \ll U_0$ , и поэтому, окончательно,

$$|E| = \frac{2ma^2U_0^2}{\hbar^2}.$$

С той же точностью собственная функция сводится к

$$\psi(x) = \varkappa^{1/2} \times \begin{cases} e^{\varkappa x}, & x \leq -a, \\ 1, & -a \leq x \leq +a, \\ e^{-\varkappa x}, & x \geq +a \end{cases}$$

где теперь  $\varkappa = 2maU_0/\hbar^2 = 1/(\alpha^2 a)$ . Как и раньше, средние значения координаты и импульса равны нулю. Вычислим дисперсию координаты. Снова пренебрегая малой величиной  $\varkappa a$ , находим

$$D_x^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \psi^2(x) = \varkappa \int_{-\infty}^{-a} dx x^2 e^{2\varkappa x} + \varkappa \int_{-a}^{+a} dx x^2 + \varkappa \int_{+a}^{+\infty} dx x^2 e^{-2\varkappa x} = \frac{1}{2\varkappa^2},$$

или

$$D_x = \frac{\alpha^2 a}{\sqrt{2}} = \frac{\hbar^2}{2\sqrt{2}maU_0}.$$

Поскольку  $\alpha \gg 1$ , то отсюда следует, что большую часть времени частица проводит вне ямы. Далее, для расчета плотности вероятности импульса пишем

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) &= \varkappa^{1/2} \int_{-\infty}^{-a} dx e^{-ipx/\hbar} e^{\varkappa x} + \varkappa^{1/2} \int_{-a}^{+a} dx e^{-ipx/\hbar} + \varkappa^{1/2} \int_{+a}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} e^{-\varkappa x} \\ &= \frac{\varkappa^{1/2} e^{ipa/\hbar}}{\varkappa - ip/\hbar} + \frac{2\hbar \varkappa^{1/2} \sin(pa/\hbar)}{p} + \frac{\varkappa^{1/2} e^{-ipa/\hbar}}{\varkappa + ip/\hbar} = 2\varkappa^{3/2} \frac{p \cos(pa/\hbar) + \hbar \varkappa \sin(pa/\hbar)}{p(\varkappa^2 + (p/\hbar)^2)} \end{aligned}$$

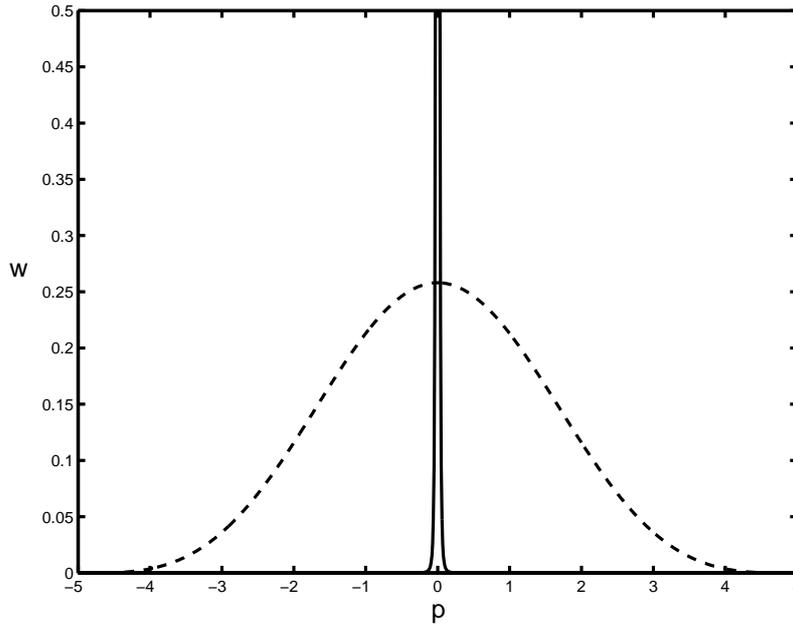


Рис. 17: Плотности распределения вероятностей импульса частицы в мелкой яме при  $\alpha = 10$  (сплошная линия) и в нормальном состоянии в бесконечно глубокой яме (штриховая линия). Импульс измеряется в единицах  $\hbar/a$ , а плотность его вероятности – в единицах  $a/\hbar$ . Высота острого пика  $\approx 64$ .

и по формуле (7.62) находим

$$w(p) = \frac{a}{\hbar} \frac{2(\kappa a)^3}{\pi} \left\{ \frac{(pa/\hbar) \cos(pa/\hbar) + (\kappa a) \sin(pa/\hbar)}{(pa/\hbar)[(\kappa a)^2 + (pa/\hbar)^2]} \right\}^2. \quad (8.43)$$

Как и в предыдущем примере, дисперсию импульса находим как

$$D_p^2 = 2m\bar{T} = 2m(E - \bar{U}) = -\frac{4m^2 a^2 U_0^2}{\hbar^2} - 2m \int_{-a}^{+a} dx \kappa(-U_0) = \frac{4m^2 a^2 U_0^2}{\hbar^2},$$

откуда

$$D_p = \frac{2maU_0}{\hbar} = \frac{\hbar}{\alpha^2 a}.$$

Заметим, что  $D_x D_p = \hbar/\sqrt{2}$ . Распределение (8.43) имеет форму очень острого пика при  $p = 0$ . Если измерять импульс в единицах  $\hbar/a$ , а плотность вероятности в единицах  $a/\hbar$ , то из формулы (8.43) находим, что высота пика  $= 2\alpha^2/\pi \gg 1$ , а из выражения для  $D_p$  следует, что его ширина  $= 1/\alpha^2 \ll 1$ . На Рис. 17 сравниваются графики функции  $w(p)$  в мелкой и бесконечно глубокой ямах.

**Пример 39.** Сила, действующая на стенку ямы. Определим среднюю силу  $F_R$ , с которой частица действует на правую стенку ямы конечной глубины. Эта сила равна взятой со знаком минус средней силе, действующей на частицу со стороны поля, когда частица находится вблизи стенки. Для того чтобы найти последнюю, надо вспомнить, что разрыв потенциала  $U(x)$  в точке  $a$  представляет собой огрубление некоторой гладкой функции

$\tilde{U}(x)$ , которая быстро возрастает от значения  $-U_0$  до нуля в малой окрестности  $(a-\epsilon, a+\epsilon)$  точки  $x = a$  и постоянна вне этой окрестности. Малость окрестности означает, что  $\epsilon \ll a$ . Сила, с которой такое гладкое поле действует на частицу в точке  $x$ , дается обычной формулой  $F = -d\tilde{U}/dx$ , а средняя сила по правилам теории вероятностей равна сумме (интегралу) произведений всех значений силы на соответствующие вероятности:

$$\bar{F} = \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx \left( -\frac{d\tilde{U}}{dx} \right) |\psi^{(\pm)}(x)|^2.$$

Поскольку функции  $\psi^{(\pm)}(x)$  мало меняются на отрезке интегрирования, их можно вынести за знак интеграла, заменив значениями в точке  $x = a$ :

$$\bar{F} \approx -|\psi^{(\pm)}(a)|^2 \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx \frac{d\tilde{U}}{dx} = -|\psi^{(\pm)}(a)|^2 \tilde{U}(x) \Big|_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} = -|\psi^{(\pm)}(a)|^2 U_0.$$

Этот результат является точным в пределе  $\epsilon \rightarrow 0$ . Подставляя значения  $\psi^{(\pm)}(a)$ , находим, что в четных и нечетных состояниях искомая сила дается одним и тем же выражением

$$F_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m \left( a + \frac{1}{\varkappa} \right)}.$$

Эта сила, естественно, положительна. Аналогичное вычисление силы  $F_L$ , с которой частица действует на левую стенку, дает  $F_L = -F_R$ , так что полная сила равна нулю. В случае бесконечно глубокой ямы явные выражения для силы в четных и нечетных состояниях имеют вид

$$F_R^{(+)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^3} (n + 1/2)^2, \quad F_R^{(-)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^3} n^2.$$

В случае же мелкой ямы получается

$$F_R = \frac{2maU_0^2}{\hbar^2}.$$

#### §8.4. Четность состояния

Как мы видели в §8.3В, собственные векторы гамильтониана, соответствующие дискретным уровням энергии в симметричной прямоугольной потенциальной яме, являются либо четными, либо нечетными функциями координаты  $x$ . Это свойство не случайно. Покажем, что оно является следствием четности потенциала и невырожденности состояний дискретного спектра. Для этого вычислим коммутатор гамильтониана с оператором инверсии (см. пример 26). По предположению,  $U(x) = U(-x)$ , поэтому операторы потенциальной энергии и инверсии коммутативны. Действительно, поскольку оператор потенциальной энергии есть просто умножение на функцию  $U(x)$ , то

$$\begin{aligned} (\hat{P}\hat{U}\psi)(x) &= (\hat{P}(\hat{U}\psi))(x) = (U\psi)(-x) = U(-x)\psi(-x) \\ &= U(x)(\hat{P}\psi)(x) = (\hat{U}(\hat{P}\psi))(x) = (\hat{U}\hat{P}\psi)(x), \end{aligned}$$

откуда

$$[\hat{P}, \hat{U}] = 0.$$

Найдем теперь коммутатор операторов инверсии и кинетической энергии. Поскольку  $\hat{T} = \hat{p}^2/2m$ , то надо выяснить, что получается при перемене порядка следования операторов  $\hat{P}$  и  $\hat{p}$ . Имеем

$$\begin{aligned} (\hat{P}\hat{p}\psi)(x) &= (\hat{P}(\hat{p}\psi))(x) = (\hat{p}\psi)(-x) = -i\hbar \frac{d\psi(-x)}{d(-x)} = - \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(-x) \\ &= - \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) (\hat{P}\psi)(x) = -(\hat{p}(\hat{P}\psi))(x) = -(\hat{p}\hat{P}\psi)(x). \end{aligned}$$

В силу произвольности вектора  $\psi$  полученный результат можно переписать в операторном виде

$$\hat{P}\hat{p} = -\hat{p}\hat{P}.$$

Теперь уже нетрудно найти  $[\hat{P}, \hat{T}]$ , используя определение произведения операторов,

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{T} &= \frac{1}{2m} \hat{P}(\hat{p}\hat{p}) = \frac{1}{2m} (\hat{P}\hat{p})\hat{p} = -\frac{1}{2m} (\hat{p}\hat{P})\hat{p} \\ &= -\frac{1}{2m} \hat{p}(\hat{P}\hat{p}) = \frac{1}{2m} \hat{p}(\hat{p}\hat{P}) = \frac{1}{2m} (\hat{p}\hat{p})\hat{P} = \hat{T}\hat{P}, \end{aligned} \quad (8.44)$$

т.е.,  $[\hat{P}, \hat{T}] = 0$ . Таким образом, гамильтониан частицы, движущейся в четном потенциале, оказывается коммутативным с оператором инверсии

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0. \quad (8.45)$$

Возьмем теперь собственную функцию гамильтониана  $\psi_E(x)$ , соответствующую невырожденному собственному значению  $E$ . Используя равенства (8.3), (8.45), а также линейность оператора инверсии (см. пример 26), находим

$$\hat{H}(\hat{P}\psi_E) = (\hat{H}\hat{P})\psi_E = (\hat{P}\hat{H})\psi_E = \hat{P}(\hat{H}\psi_E) = \hat{P}E\psi_E = E(\hat{P}\psi_E).$$

Итак, мы получили, что  $\hat{H}(\hat{P}\psi_E) = E(\hat{P}\psi_E)$ . Сравнивая это равенство с (8.3), заключаем, что вектор  $\hat{P}\psi_E$  является собственным вектором гамильтониана, соответствующим собственному значению  $E$ . Но по предположению значение  $E$  невырождено, и потому векторы  $\psi_E, \hat{P}\psi_E$  должны быть линейно-зависимы:

$$c_1\psi_E + c_2\hat{P}\psi_E = 0,$$

где  $c_1, c_2$  не равны нулю. Отсюда следует, что  $\hat{P}\psi_E = c\psi_E, c = -c_1/c_2$ . Другими словами, вектор  $\psi_E$  является также собственным вектором оператора инверсии. Учитывая, что собственными значениями этого оператора являются  $\pm 1$  (см. пример 34), мы приходим к выводу, что функция  $\psi_E(x)$  должна удовлетворять одному из двух равенств – либо  $\psi_E(-x) = +\psi_E(x)$ , либо  $\psi_E(-x) = -\psi_E(x)$ , т.е., иметь определенную четность.

Как мы знаем из §8.2, дискретные уровни энергии при одномерном движении всегда невырождены, и потому, по доказанному, соответствующие им собственные функции имеют определенную четность. Собственное значение оператора  $\hat{P}$  в этом случае называют *четностью состояния*.

## §8.5. Гармонический осциллятор

Рассмотрим движение частицы в потенциале  $U(x) = m\omega^2 x^2/2$ , где  $m$  есть масса частицы, а  $\omega$  – некоторая постоянная, имеющая размерность частоты. В классической механике этот потенциал описывает гармонический осциллятор с частотой  $\omega$ . Спектр энергии соответствующей квантовой системы относится к типу I, т.е. все уровни энергии являются дискретными и невырожденными. При этом из неравенства (8.13) следует, что все уровни положительны, поскольку  $U_{\min} = 0$ . Далее, рассматриваемый потенциал является симметричным, а потому каждая собственная функция гамильтониана является либо четной, либо нечетной функцией  $x$  (см. §8.4). Эти функции удовлетворяют уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi = E\psi.$$

Прежде чем решать это уравнение, опишем прием, который позволяет упростить его коэффициенты и который неоднократно будет применяться в дальнейшем. Примем, во-первых, массу частицы  $m$  за единицу измерения массы, а величину  $1/\omega$  – за единицу времени, т.е. положим  $m = 1$ ,  $\omega = 1$ . После этого выберем единицу измерения длины так, чтобы постоянная Планка также численно обратилась в единицу:  $\hbar = 1$ . Этого всегда можно добиться, поскольку  $\hbar$  имеет размерность *масса·длина<sup>2</sup>/время*. Тогда уравнение Шредингера примет вид

$$\psi'' + (2E - x^2)\psi = 0. \quad (8.46)$$

Поскольку коэффициенты этого уравнения являются целыми степенями  $x$ , его решение естественно искать также в виде разложения по целым степеням  $x$ . Для этого удобно сперва перейти к новой неизвестной функции  $p(x)$  согласно

$$\psi(x) = p(x)e^{-x^2/2}.$$

Имеем

$$\psi'' = (p'' - 2xp' - p + x^2p)e^{-x^2/2},$$

и поэтому после сокращения на  $e^{-x^2/2}$  уравнение (8.46) принимает вид

$$p'' - 2xp' + (2E - 1)p = 0.$$

Подставляя в это уравнение разложение

$$p(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k, \quad (8.47)$$

где  $a_k$  – неизвестные вещественные коэффициенты, получаем

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \{k(k-1)x^{k-2} - 2kx^k + (2E-1)x^k\} = 0.$$

Сдвигая в первом члене переменную суммирования  $k \rightarrow k+2$ , это уравнение можно переписать как

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{a_{k+2}(k+2)(k+1) - a_k(2k-2E+1)\}x^k = 0.$$

В силу линейной независимости различных степеней  $x$  их коэффициенты должны обращаться в нуль:

$$a_{k+2}(k+2)(k+1) - a_k(2k-2E+1) = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (8.48)$$

Как мы знаем, собственные функции гамильтониана  $\psi(x)$  должны быть либо четными, либо нечетными. То же самое относится и к функциям  $p(x)$ , т.к. они отличаются от  $\psi(x)$  четным множителем  $e^{-x^2/2}$ . Это значит, что в разложении (8.47) отличны от нуля лишь коэффициенты либо только с четными, либо только с нечетными номерами. Итак, цепочка уравнений (8.48) позволяет найти все члены ряда (8.47) по его первому члену. Первым членом четного решения является член  $a_0$ , а первым членом нечетного – член  $a_1x$ . Согласно общей теории дифференциальных уравнений, при любом значении энергии  $E$  уравнение Шредингера имеет два линейно-независимых решения, и в данном случае эти решения определяются, как мы видим, заданием коэффициентов  $a_0$  и  $a_1$ . Выясним теперь, какие из этих решений являются собственными функциями гамильтониана. Для этого надо найти те из них, которые являются ограниченными при  $|x| \rightarrow \infty$ . Хотя функции  $\psi(x)$  и содержат быстро убывающий фактор  $e^{-x^2/2}$ , так что каждый член  $e^{-x^2/2}x^k$  в отдельности стремится к нулю при  $|x| \rightarrow \infty$ , сумма ряда (8.46) может оказаться функцией, возрастающей при больших  $|x|$  быстрее  $e^{x^2/2}$ . Последнее должно иметь место на самом деле для всех  $E$  за исключением счетного числа значений, поскольку нам заранее известно, что спектр энергии в рассматриваемом случае является дискретным. Проверим это, например, в случае четного решения. Заметим, что для этого достаточно найти вид  $a_k$  при больших  $k$ . Действительно, для выяснения ограниченности решения при  $|x| \rightarrow \infty$  вид любого конечного числа первых членов ряда несуществен, поскольку произведение любого полинома по  $x$  на  $e^{-x^2/2}$  стремится к нулю в этом пределе. С другой стороны, для достаточно больших  $k$  соотношение (8.48) можно переписать так

$$a_{k+2} = \frac{2k-2E+1}{(k+2)(k+1)} a_k \approx \frac{2}{k+2} a_k$$

(2 в знаменателе сохранено здесь для удобства последующих вычислений). Хотя последнее равенство справедливо для достаточно больших  $k$ , удобно распространить его на все  $k$ , т.к., как только что было указано, вид начального отрезка ряда для нас сейчас несуществен. Тогда, полагая  $k = 2m$ ,  $m \in N$ , находим последовательно

$$a_{2m+2} = \frac{a_{2m}}{m+1} = \frac{a_{2m-2}}{(m+1)m} = \frac{a_{2m-4}}{(m+1)m(m-1)} = \dots = \frac{a_0}{(m+1)!}.$$

Поэтому поведение ряда (8.47) при больших  $|x|$  совпадает с поведением следующего ряда

$$\sum_{m=0}^{\infty} a_{2m} x^{2m} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a_0}{m!} x^{2m} = a_0 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(x^2)^m}{m!} = a_0 e^{x^2}.$$

Мы видим, таким образом, что  $\psi(x) = p(x)e^{-x^2/2} \rightarrow a_0 e^{x^2/2} \rightarrow \infty$  при  $|x| \rightarrow \infty$ , т.е. решение является неограниченным при больших  $|x|$ . Этот же результат получается и для нечетных решений [в этом случае соотношение (8.48) при больших  $n$  удобно переписать в виде  $a_{k+2} = 2a_k/(k+1)$ ].

Приведенное рассуждение, однако, не учитывает ту возможность, что коэффициенты  $a_k$  могут обратиться тождественно в нуль при  $k > n$ , где  $n$  – натуральное число (включая

нуль). Действительно, если энергия такова, что при некотором  $n$  выполняется равенство  $2n - 2E + 1 = 0$ , то из уравнений (8.48) следует, что  $a_{n+2} = 0$ , а потому также и  $a_k = 0$  для всех  $k > n$ , так что решение, соответствующее этому  $E$  оказывается ограниченным. Итак, мы приходим к следующей формуле, определяющей энергетический спектр гармонического осциллятора,

$$E_n = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.49)$$

Найдем явный вид собственных функций для нескольких низших уровней. При  $n = 0$  уравнения (8.48) дают  $a_{2m} = 0$  для всех  $m > 0$ , так что волновая функция нормального состояния осциллятора имеет вид

$$\psi_0(x) = a_0 e^{-x^2/2}. \quad (8.50)$$

Аналогично, при  $n = 1$  имеем  $a_{2m+1} = 0$  для всех  $m > 0$ , и поэтому волновая функция первого возбужденного уровня есть

$$\psi_1(x) = a_1 x e^{-x^2/2}. \quad (8.51)$$

Далее, при  $n = 2$  уравнения (8.48) дают  $a_2 = -2a_0$  и  $a_{2m} = 0$  для всех  $m > 1$ , и поэтому

$$\psi_2(x) = a_2 (x^2 - 1/2) e^{-x^2/2}. \quad (8.52)$$

Произвольные постоянные  $a_0, a_1, a_2$  в этих формулах отвечают за нормировку собственных функций. Для нахождения нормировочных интегралов требуется вычислить интегралы вида

$$I_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^{2n} e^{-x^2}, \quad n \in N.$$

Это можно сделать с помощью следующего приема. Рассмотрим вспомогательный интеграл

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2}, \quad (8.53)$$

где  $\alpha$  – произвольное положительное число. Интеграл  $I_n$  может быть выражен через  $n$ -ю производную от  $I(\alpha)$  по параметру  $\alpha$ . Действительно, дифференцируя обе части определения (8.53), имеем

$$\frac{\partial I(\alpha)}{\partial \alpha} = - \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-\alpha x^2},$$

откуда следует, что

$$I_1 = - \left. \frac{\partial I(\alpha)}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=1}.$$

Аналогично,

$$I_n = (-1)^n \left. \frac{\partial^n I(\alpha)}{\partial \alpha^n} \right|_{\alpha=1}. \quad (8.54)$$

Для того чтобы вычислить сам интеграл  $I(\alpha)$ , возведем обе части равенства (8.53) в квадрат и перепишем произведение интегралов в правой его части в виде двойного интеграла:

$$I^2(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\alpha y^2} = \iint_{-\infty}^{+\infty} dx dy e^{-\alpha(x^2+y^2)}.$$

Переходя к полярным координатам в плоскости  $(x, y)$ , т.е. совершая замену переменных  $x = r \cos \phi$ ,  $y = r \sin \phi$ , получаем

$$I^2(\alpha) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{+\infty} dr r e^{-\alpha r^2} = \pi \int_0^{+\infty} dr^2 e^{-\alpha r^2} = \frac{\pi}{\alpha}.$$

Поскольку по определению  $I(\alpha) > 0$ , мы находим отсюда, что

$$I(\alpha) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \quad (8.55)$$

С помощью формул (8.54), (8.55) имеем, например,

$$(\psi_0, \psi_0) = a_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} = a_0^2 I(1) = a_0^2 \sqrt{\pi} = 1,$$

откуда следует, что нормированная волновая функция основного состояния осциллятора может быть выбрана в виде

$$\psi_0(x) = \pi^{-1/4} e^{-x^2/2}. \quad (8.56)$$

Аналогично,

$$(\psi_1, \psi_1) = a_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-x^2} = -a_1^2 \left. \frac{\partial I(\alpha)}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=1} = a_1^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} = 1,$$

откуда

$$\psi_1(x) = \sqrt{2} \pi^{-1/4} x e^{-x^2/2}. \quad (8.57)$$

Полученные выражения записаны в специальной системе единиц, в которой параметры  $m, \hbar, \omega$  численно равны единице. Для того чтобы вернуться в исходную систему единиц, надо для каждой величины  $f$ , имеющей размерность  $[f]$ , построить такую комбинацию  $m^a \hbar^b \omega^c$ , где  $a, b, c$  – вещественные числа, что  $[m^a \hbar^b \omega^c] = [f]$ , и после этого совершить замену  $f \rightarrow f/m^a \hbar^b \omega^c$ . Например, размерностью энергии обладает комбинация  $\hbar\omega$ , поэтому, заменяя  $E \rightarrow E/\hbar\omega$  в формуле (8.49), мы получаем выражение для уровней энергии осциллятора в исходных единицах

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.58)$$

При этом, однако, возникает вопрос о единственности комбинации  $m^a \hbar^b \omega^c$ . Если бы оказалось, например, что существует какая-либо комбинация с размерностью энергии, отличная от  $\hbar\omega$ , то восстановить вид формулы для  $E_n$  в обычных единицах оказалось бы невозможно. Покажем, что такой неоднозначности в нашем случае на самом деле нет. Предположим противное, а именно что для некоторой величины  $f$  существуют две различные комбинации  $m^{a_1} \hbar^{b_1} \omega^{c_1}$  и  $m^{a_2} \hbar^{b_2} \omega^{c_2}$ , имеющие одну и ту же размерность  $[f]$ . Тогда их отношение безразмерно и равно  $m^a \hbar^b \omega^c$ , где числа  $a = a_1 - a_2$ ,  $b = b_1 - b_2$ ,  $c = c_1 - c_2$  не все равны нулю. С другой стороны, учитывая, что  $[m] = \text{г}$ ,  $[\hbar] = \text{г} \cdot \text{см}^2 / \text{с}$ ,  $[\omega] = \text{с}^{-1}$ , находим  $[m^a \hbar^b \omega^c] = \text{г}^{a+b} \text{см}^{2b} \text{с}^{-b-c}$ , и поэтому условие безразмерности величины  $m^a \hbar^b \omega^c$  имеет вид

$$\begin{cases} a + b = 0, \\ 2b = 0, \\ -b - c = 0, \end{cases}$$

откуда следует, что  $a = b = c = 0$ , в противоречии с предположением. Итак, восстановление по размерности единственно. Приведенное рассуждение дает регулярный способ отыскания комбинаций нужной размерности. Например, величина с размерностью длины получается как решение системы

$$\begin{cases} a + b = 0, \\ 2b = 1, \\ -b - c = 0, \end{cases}$$

откуда  $b = 1/2$ ,  $a = c = -1/2$ , и соответствующая комбинация есть  $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ . С ее помощью можно переписать в исходных единицах найденные выше выражения для волновых функций стационарных состояний осциллятора. Поскольку квадрат модуля волновой функции дает плотность вероятности, то в рассматриваемом случае одномерного движения он имеет размерность  $\text{см}^{-1}$ , и потому сама волновая функция имеет размерность  $\text{см}^{-1/2}$ . Таким образом, например, выражение для волновой функции нормального состояния осциллятора в обычных единицах имеет вид

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}. \quad (8.59)$$

**Пример 40.** Дисперсия координаты и импульса осциллятора. По определению дисперсии (см. §7.5В) имеем следующее выражение для дисперсии координаты осциллятора в нормальном состоянии в единицах  $\hbar = m = \omega = 1$ :

$$D_x^2 = \overline{x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_0^* x^2 \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-x^2}.$$

По формулам (8.53) – (8.55) находим

$$D_x^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( -\frac{\partial}{\partial \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \right) \Big|_{\alpha=1} = \frac{1}{2}.$$

Поскольку  $D_x$  имеет размерность длины, то в обычных единицах

$$D_x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}. \quad (8.60)$$

§8.6. Движение в периодическом поле

А. Функции Блоха

Как было указано в начале §8.2, проведенный там анализ энергетических спектров относится к полям, которые стремятся при  $|x| \rightarrow \infty$  к конечным пределам, либо к  $+\infty$  или  $-\infty$ . Важным случаем, который не удовлетворяет этому условию и будет рассмотрен в этом пункте, является периодическое поле, например, поле бесконечной кристаллической решетки.

Итак, пусть потенциальная энергия, в которой движется частица массы  $m$ , является периодическим:

$$U(x + a) = U(x),$$

где  $a$  – период поля. Покажем, прежде всего, что полное решение уравнения Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U\psi = E\psi$$

может быть представлено как суперпозиция периодических (с периодом  $a$ ) решений. Для этого вычислим коммутатор гамильтониана  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$  с оператором сдвига на расстояние  $a$  (см. пример 26). Имеем

$$\begin{aligned} (\hat{T}\hat{T}_a\psi)(x) &= (\hat{T}(\hat{T}_a\psi))(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}(\hat{T}_a\psi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x+a) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x+a)}{d(x+a)^2} = (\hat{T}\psi)(x+a) = (\hat{T}_a(\hat{T}\psi))(x) = (\hat{T}_a\hat{T}\psi)(x), \end{aligned}$$

откуда  $[\hat{T}, \hat{T}_a] = 0$ . Далее,

$$\begin{aligned} (\hat{U}\hat{T}_a\psi)(x) &= (\hat{U}(\hat{T}_a\psi))(x) = U(x)(\hat{T}_a\psi)(x) = U(x)\psi(x+a) \\ &= U(x+a)\psi(x+a) = (\hat{U}\psi)(x+a) = (\hat{T}_a(\hat{U}\psi))(x) = (\hat{T}_a\hat{U}\psi)(x), \end{aligned}$$

откуда  $[\hat{U}, \hat{T}_a] = 0$ . Таким образом, гамильтониан частицы в периодическом поле коммутирует с оператором сдвига на период поля:

$$[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0.$$

Отсюда следует, что если  $\psi(x)$  является решением уравнения Шредингера с некоторым  $E$ , то и  $(\hat{T}_a\psi)(x) = \psi(x+a)$  также является решением, соответствующим тому же значению  $E$ . Действительно,

$$\hat{H}(\hat{T}_a\psi) = (\hat{H}\hat{T}_a)\psi = (\hat{T}_a\hat{H})\psi = \hat{T}_a(\hat{H}\psi) = \hat{T}_a(E\psi),$$

т.е.

$$\hat{H}(\hat{T}_a\psi) = E(\hat{T}_a\psi).$$

Обозначим через  $\psi_1(x)$ ,  $\psi_2(x)$  два линейно-независимых решения уравнения Шредингера при данном значении  $E$ . Тогда, по доказанному, функции  $\psi_1(x+a)$ ,  $\psi_2(x+a)$  можно представить в виде линейных комбинаций функций  $\psi_1(x)$ ,  $\psi_2(x)$ :

$$\psi_1(x+a) = c_{11}\psi_1(x) + c_{12}\psi_2(x), \quad \psi_2(x+a) = c_{21}\psi_1(x) + c_{22}\psi_2(x),$$

где  $c_{ik}$ ,  $i, k = 1, 2$  – некоторые комплексные коэффициенты. Вводя матричные обозначения

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix},$$

запишем эти соотношения в виде  $\psi(x+a) = C\psi(x)$ . Заметим, что  $\det C \neq 0$ . Действительно, в противном случае существовал бы ненулевой вектор-строка  $b = (b_1, b_2)$ , такой что  $bC = 0$ , а тогда из равенства  $\psi(x+a) = C\psi(x)$  следовало бы  $b\psi(x+a) = 0$ , или  $b_1\psi_1(x+a) + b_2\psi_2(x+a) = 0$ , т.е. линейная зависимость решений  $\psi_{1,2}$ , в противоречии с предположением. Перейдем теперь к новым линейно-независимым решениям  $\tilde{\psi}_1(x), \tilde{\psi}_2(x)$ , совершив линейное преобразование  $\tilde{\psi}(x) = A\psi(x)$ , где  $\tilde{\psi}$  – столбец, построенный из новых функций, а  $A$  – некоторая постоянная невырожденная комплексная матрица. Имеем  $A\tilde{\psi}(x+a) = CA\tilde{\psi}(x)$ , или  $\tilde{\psi}(x+a) = A^{-1}CA\tilde{\psi}(x)$ . Подберем матрицу  $A$  так, чтобы матрица  $\tilde{C} = A^{-1}CA$  приняла диагональный вид

$$\tilde{C} = \begin{pmatrix} \tilde{c}_1 & 0 \\ 0 & \tilde{c}_2 \end{pmatrix}.$$

Покажем, что это возможно. Для этого распишем в компонентах матричное равенство  $CA = A\tilde{C}$ :

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{c}_1 a_{11} & \tilde{c}_2 a_{12} \\ \tilde{c}_1 a_{21} & \tilde{c}_2 a_{22} \end{pmatrix}. \quad (8.61)$$

Из этой записи видно, что столбцы матрицы  $A$  являются собственными векторами матрицы  $C$ , а числа  $\tilde{c}_{1,2}$  – соответствующими собственными значениями. Эти значения являются решениями уравнения

$$\det \begin{pmatrix} c_{11} - \tilde{c} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} - \tilde{c} \end{pmatrix} = 0, \quad (8.62)$$

представляющего условие совместности системы (8.61). Уравнение (8.62) является алгебраическим уравнением относительно  $\tilde{c}$ , и потому всегда имеет решение, а следовательно система (8.61) разрешима относительно неизвестных векторов  $(a_{11}, a_{21})$  и  $(a_{12}, a_{22})$ . Заметим, наконец, что из  $A\tilde{C} = CA$ ,  $\det A \neq 0$  следует  $\det \tilde{C} = \tilde{c}_1 \tilde{c}_2 = \det C \neq 0$ , и поэтому оба числа  $\tilde{c}_{1,2}$  отличны от нуля.

Итак, мы показали, что решения уравнения Шредингера в периодическом поле всегда можно выбрать так, чтобы они удовлетворяли условию  $\psi(x+a) = c\psi(x)$ , где  $c$  – некоторое комплексное число. Применяя это равенство  $n$  раз, получаем  $\psi(x+na) = c\psi(x+(n-1)a) = c^2\psi(x+(n-2)a) = \dots = c^n\psi(x)$ , откуда следует, что если  $|c| > 1$ , то  $|\psi(x)| \rightarrow \infty$  при  $x \rightarrow +\infty$ . С другой стороны, переписав равенство  $\psi(x+a) = c\psi(x)$  как  $\psi(x-a) = c^{-1}\psi(x)$  и применив его  $n$  раз, найдем аналогично  $\psi(x-na) = c^{-n}\psi(x)$ , откуда видно, что если  $|c| < 1$ , то  $|\psi(x)| \rightarrow \infty$  при  $x \rightarrow -\infty$ . Итак, при  $|c| \neq 1$  решение уравнения Шредингера оказывается неограниченным при  $|x| \rightarrow \infty$ , и поэтому не является собственной функцией гамильтониана. Следовательно,  $\psi(x)$  может быть собственной функцией, только если число  $c$  является фазовым множителем. Его принято записывать в виде  $c = e^{ika}$ , где  $k$  – вещественное число. Таким образом, каждая собственная функция гамильтониана удовлетворяет условию

$$\psi(x+a) = e^{ika}\psi(x) \quad (8.63)$$

с некоторым  $k$ . Введя новую функцию  $u(x)$  согласно

$$\psi(x) = e^{ikx}u(x), \quad (8.64)$$

найдем, что  $u(x)$  должна удовлетворять  $e^{ik(x+a)}u(x+a) = e^{ika}e^{ikx}u(x)$ , или  $u(x+a) = u(x)$ , т.е. должна быть периодической функцией координаты  $x$  с периодом, равным периоду поля. Функции (8.64) называют *функциями Блоха*, а величину  $p = \hbar k$  — *квазиимпульсом частицы*. Поскольку функции (8.64) ненормируемы, реальные состояния частицы являются суперпозициями функций вида (8.64) с различными  $k$ , и поэтому ее квазиимпульс обязательно “размазан” по некоторой области значений, так же как и обычный импульс.

### В. Задача Кронига-Пенни

Пусть частица движется в потенциале, представляющем собой последовательность прямоугольных пиков высоты  $U_0 > 0$  и ширины  $2b$ , (период поля по-прежнему обозначаем через  $a$ ). Особенно прост случай  $b \ll a$ ,  $E \ll U_0$ , который мы рассмотрим как формальный предел  $b \rightarrow 0$ ,  $U_0 \rightarrow \infty$ , причем будем считать, что эти пределы берутся при фиксированной площади прямоугольника:  $2bU_0 = \alpha = \text{const}$ . Тогда везде, за исключением точек  $x_n = na$ ,  $n \in Z$ , уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U(x)\psi = E\psi \quad (8.65)$$

сводится к свободному уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi,$$

и поэтому на каждом из интервалов  $(an, an + a)$  его решение имеет вид

$$\psi(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx}, \quad q = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Рассмотрим два таких интервала  $(-a, 0)$  и  $(0, +a)$ , приписывая функции  $\psi(x)$  на этих интервалах индекс 1 и 2, соответственно. Функции  $\psi_1(x)$ ,  $\psi_2(x)$  должны удовлетворять условиям сшивания. Одним из них, как всегда, является условие непрерывности решения [см. (8.15)]:  $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ . Условие же на производные от  $\psi$  теперь иное, поскольку потенциал имеет бесконечный разрыв в точке  $x = 0$ . Для того чтобы получить это условие, проинтегрируем уравнение (8.65) по отрезку  $[-b, +b]$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi' \Big|_{-b}^{+b} + \int_{-b}^{+b} dx U(x)\psi(x) = E \int_{-b}^{+b} dx \psi.$$

Поскольку  $\psi(x)$  конечна и непрерывна в нуле, в пределе  $b \rightarrow 0$  ее можно вынести за знак интеграла в левой части этого равенства, заменив значением в нуле, интеграл же в правой части обращается в нуль. Учитывая также условие  $2bU_0 = \alpha$ , находим следующее условие для скачка производной

$$\psi'_2(0) - \psi'_1(0) = \psi(0) \frac{2m\alpha}{\hbar^2}. \quad (8.66)$$

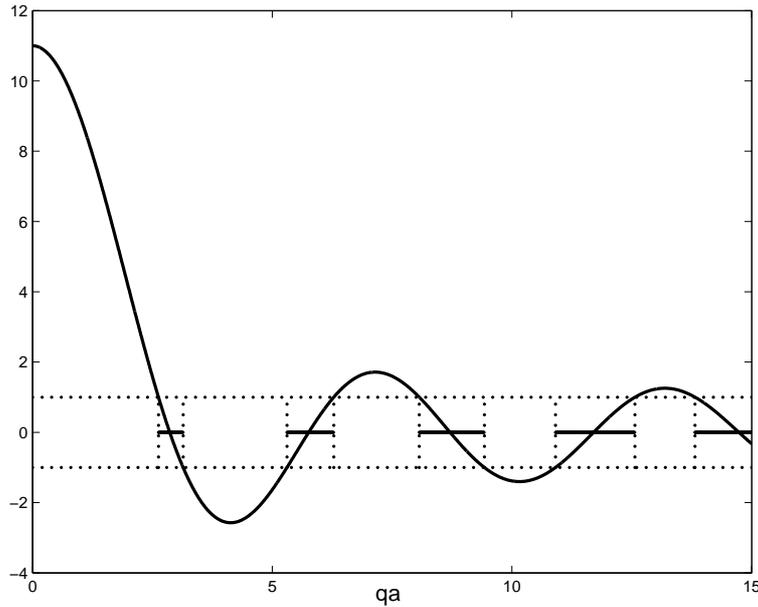


Рис. 18: Графическое решение дисперсионного соотношения (8.72). Допустимые значения ( $qa$ ) выделены жирными горизонтальными отрезками.

Наконец, условие (8.63) дает

$$\psi_2(a) = e^{ika}\psi_1(0), \quad \psi_2(0) = e^{ika}\psi_1(-a).$$

Итак, мы имеем следующую систему уравнений для определения коэффициентов в функциях  $\psi_{1,2}(x) = A_{1,2}e^{iqx} + B_{1,2}e^{-iqx}$

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \quad (8.67)$$

$$iq(A_2 - B_2) - iq(A_1 - B_1) = \frac{2\gamma}{a}(A_1 + B_1), \quad \gamma \equiv \frac{ma\alpha}{\hbar^2}, \quad (8.68)$$

$$A_2e^{iqa} + B_2e^{-iqa} = e^{ika}(A_1 + B_1), \quad (8.69)$$

$$A_2 + B_2 = e^{ika}(A_1e^{-iqa} + B_1e^{iqa}). \quad (8.70)$$

Условие совместности этой системы линейных однородных уравнений

$$\det \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 2i\gamma/qa-1 & 2i\gamma/qa+1 & 1 & -1 \\ e^{ika} & e^{ika} & -e^{iqa} & -e^{-iqa} \\ e^{-iqa} & e^{iqa} & -e^{-ika} & -e^{-ika} \end{pmatrix} = 0 \quad (8.71)$$

несложными преобразованиями приводится к виду

$$\cos(qa) + \gamma \frac{\sin(qa)}{qa} = \cos(ka). \quad (8.72)$$

На Рис. 18 изображено графическое решение этого уравнения в случае  $\gamma = 10$ . Собственные значения гамильтониана  $E = \hbar^2 q^2 / 2m$  соответствуют тем  $q$ , при которых значение левой части уравнения (8.72) принадлежит отрезку  $[-1, +1]$ . Мы видим, что спектр состоит из бесконечного числа отрезков конечной ширины, или *энергетических зон*, разделенных областями запрещенных значений энергии (*энергетические щели*). В каждой из энергетических зон квазиимпульс частицы  $k$  пробегает все значения из отрезка  $[-\pi/a, +\pi/a]$ .

## Глава 9. ТРЕХМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

## §9.1. Разделение переменных

В случае трехмерного движения частицы массы  $m$  в заданных внешних полях ее волновая функция зависит от трех координат, а стационарное уравнение Шредингера является линейным дифференциальным уравнением в частных производных. Согласно постулатам III, IV, гамильтониан системы строится по функции Гамильтона, заданной как функция декартовых компонент радиус-векторов и импульсов частиц, соответственно чему в уравнение Шредингера входят производные волновой функции по декартовым компонентам радиус-векторов частиц. Однако ничто не мешает в полученном таким образом уравнении Шредингера переходить к новым переменным, что часто позволяет существенно упростить его решение. Так же как и в классической механике, переменные надо выбирать так, чтобы по возможности максимально выявить симметрии внешних полей. Решение уравнения Шредингера часто может быть найдено методом разделения переменных, аналогичным тому, который применялся в §5.5E при решении уравнения Гамильтона-Якоби. Этот метод применим к системам с любым числом степеней свободы и состоит в следующем. Предположим, что при некотором выборе переменных (обобщенных координат)  $\{q\}$  гамильтониан системы  $\hat{H}(q)$  принимает специальный вид

$$\hat{H}(q) = \hat{H}(q_1, \hat{h}(q_2)), \quad (9.1)$$

где  $\{q_1\}$  и  $\{q_2\}$  – два непересекающихся набора переменных, на которые разбивается набор  $\{q\}$ ,  $\hat{h}$  – некоторый эрмитов оператор, а в скобках указаны переменные, на которые действует данный оператор. Такая форма оператора  $\hat{H}$  означает, что все дифференцирования по переменным из набора  $\{q_2\}$  и все функции, зависящие от этих переменных, выделяются в некоторой комбинации, обозначенной через  $\hat{h}(q_2)$ , которая не содержит переменных из набора  $\{q_1\}$ . При этом оператор  $\hat{H}$  является функцией оператора  $\hat{h}$  в смысле определений (7.2) – (7.4). Будем в этом случае искать решение стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}(q_1, \hat{h}(q_2))\psi = E\psi, \quad (9.2)$$

в виде

$$\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\psi_2(q_2), \quad (9.3)$$

где функция  $\psi_2(q_2)$  является собственной функцией оператора  $\hat{h}$ , соответствующей собственному значению  $\varepsilon$ :

$$\hat{h}(q_2)\psi_2 = \varepsilon\psi_2. \quad (9.4)$$

Поскольку от переменных  $q_2$  в произведении (9.3) зависит лишь функция  $\psi_2(q_2)$ , которая является собственной для оператора  $\hat{h}$ , то при действии гамильтониана на это произведение оператор  $\hat{h}$  просто заменяется его собственным значением, которому соответствует вектор  $\psi_2$ :

$$\hat{H}(q_1, \hat{h}(q_2))\psi = \hat{H}(q_1, \hat{h}(q_2))\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) = \hat{H}(q_1, \varepsilon)\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) = \psi_2(q_2)\hat{H}(q_1, \varepsilon)\psi_1(q_1).$$

Функция  $\psi_2(q_2)$  вынесена в конце за знак  $\hat{H}(q_1, \varepsilon)$ , поскольку этот оператор действует уже лишь на координаты  $q_1$ , так что  $\psi_2(q_2)$  играет при этом роль постоянной. Подставляя этот результат в уравнение (9.2) и сокращая на  $\psi_2$ , получаем уравнение для вектора  $\psi_1$ :

$$\hat{H}(q_1, \varepsilon)\psi_1 = E\psi_1. \quad (9.5)$$

Таким образом, мы получили два уравнения (9.4), (9.5), каждое из которых проще исходного уравнения Шредингера (9.2), поскольку содержит меньшее число переменных.

Итак, выбрав неизвестные функции в виде (9.3), мы разбили задачу отыскания собственных функций гамильтониана  $\hat{H}(q)$  на два этапа: сначала следует решить уравнение (9.4), определив, в частности, спектр собственных значений оператора  $\hat{h}$ , а затем для каждого из этих значений решить уравнение (9.5) и найти систему собственных функций и собственных значений оператора  $\hat{H}(q_1, \varepsilon)$ .

Покажем, наконец, что, действуя таким образом, мы действительно найдем все собственные функции исходного гамильтониана  $\hat{H}(q)$ . Для этого достаточно доказать, что система всех произведений (9.3) является полной. Возьмем произвольную функцию  $\psi(q) \in \mathcal{S}$  и разложим ее по собственным функциям оператора  $\hat{h}$ , т.е. по решениям уравнения (9.4) (что возможно в силу теоремы о разложении по собственным функциям эрмитова оператора)

$$\psi(q) = \sum_n c_n(q_1)\psi_{2n}(q_2)$$

(для простоты мы рассматриваем случай дискретного спектра). Коэффициенты разложения  $c_n$  зависят здесь от переменных  $q_1$  как от параметров. Теперь разложим каждый член этой суммы по собственным функциям  $\psi_{1m}(q_1, \varepsilon_n)$  оператора  $\hat{H}(q_1, \varepsilon_n)$  (т.е. по решениям уравнения (9.5) с  $\varepsilon = \varepsilon_n$ ):

$$c_n(q_1)\psi_{2n}(q_2) = \sum_m c_{nm}\psi_{1m}(q_1, \varepsilon_n)\psi_{2n}(q_2),$$

где коэффициенты  $c_{nm}$  – уже просто комплексные числа. Отсюда следует, что любая волновая функция действительно может быть представлена в виде линейной комбинации функций вида (9.3):

$$\psi(q) = \sum_{nm} c_{nm}\psi_{1m}(q_1, \varepsilon_n)\psi_{2n}(q_2).$$

Итак, система функций

$$\psi_{nm}(q) = \psi_{1m}(q_1, \varepsilon_n)\psi_{2n}(q_2) \quad (9.6)$$

со всевозможными  $n, m$  является полной системой собственных функций гамильтониана  $\hat{H}$ .

Эти результаты по индукции распространяются на случай, когда гамильтониан разбивается на большее число независимых частей – его собственные функции следует искать в виде произведения функций от соответствующих наборов координат.

## §9.2. Прямоугольный потенциальный ящик

В качестве первого примера применения метода разделения переменных рассмотрим движение частицы в поле  $U(x, y, z)$ , которое равно нулю внутри прямоугольного параллелепипеда  $x \in (0, a)$ ,  $y \in (0, b)$ ,  $z \in (0, c)$ , и обращается в  $+\infty$  вне его. Функция Гамильтона частицы  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m + U(\mathbf{r}) = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m + U(\mathbf{r})$  после замены компонент импульса операторами дает гамильтониан частицы

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z),$$

поэтому уравнение Шредингера внутри ямы ( $U = 0$ ) имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z). \quad (9.7)$$

Как видно, гамильтониан внутри ямы является суммой трех эрмитовых операторов, каждый из которых зависит от одной из координат,

$$\hat{H} = \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \hat{h}_3, \quad \hat{h}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_i^2}, \quad q_i = (x, y, z),$$

поэтому мы ищем решение в виде  $\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$  и пишем уравнения на собственные функции для операторов  $\hat{h}_2$  и  $\hat{h}_3$ :

$$\hat{h}_2\psi_2 = \varepsilon_2\psi_2, \quad \hat{h}_3\psi_3 = \varepsilon_3\psi_3.$$

Тогда уравнение (9.7) сводится к уравнению для  $\psi_1$ :

$$(\hat{h}_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3)\psi_1 = E\psi_1,$$

или

$$\hat{h}_1\psi_1 = \varepsilon_1\psi_1, \quad \varepsilon_1 = E - \varepsilon_2 - \varepsilon_3.$$

Все три уравнения для функций  $\psi_i(q_i)$  имеют один и тот же вид. Рассмотрим, например, уравнение для  $\psi_1$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x) = \varepsilon_1\psi_1(x),$$

С уравнениями такого вида мы уже имели дело в §8.3В при рассмотрении одномерных ям. В случае бесконечно глубокой ямы выражения для собственных функций и собственных значений гамильтониана могут быть найдены из формул (8.39) – (8.41) заменой  $a \rightarrow a/2$  (поскольку теперь яма имеет ширину  $a$ , а не  $2a$ ) и последующим сдвигом  $x \rightarrow x - a/2$ . Эти формулы были получены в примере 37 путем предельного перехода в решениях для ямы конечной глубины. Но их можно получить и более простым способом, решая уравнение Шредингера с граничными условиями  $\psi_1(0) = \psi_1(a) = 0$  (как мы видели в примере 37, вне бесконечно глубокой ямы волновая функция должна обращаться в нуль, а потому, по непрерывности, она равна нулю и на границе ямы). Общее решение уравнения Шредингера для функции  $\psi_1(x)$  есть

$$\psi_1(x) = A \sin(k_1 x) + B \cos(k_1 x), \quad k_1 = \frac{\sqrt{2m\varepsilon_1}}{\hbar}.$$

Условия  $\psi_1(0) = \psi_1(a) = 0$  дают

$$B = 0, \quad A \sin(k_1 a) + B \cos(k_1 a) = 0.$$

Отсюда следует, что  $k_1 a = n\pi$ ,  $n \in Z$ . Таким образом, получаем собственные функции и собственные значения гамильтониана  $\hat{H}_1$  в виде

$$\psi_{1n}(x) = \begin{cases} A_n \sin(\pi n x/a), & x \in [0, +a], \\ 0, & x \notin [0, +a], \end{cases} \quad \varepsilon_{1n} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi n}{a} \right)^2.$$

Поскольку при  $n = 0$  это решение равно нулю тождественно, а замена  $n \rightarrow -n$  при  $n \neq 0$  меняет лишь знак решения, то все линейно независимые собственные функции получаются когда  $n$  пробегает значения  $1, 2, \dots$ . Заметим, что полученные функции не являются ни четными, ни нечетными, в отличие от найденных в примере 37. Последние имели определенную четность в силу четности потенциала. В данном же случае потенциал симметричен не относительно нуля, а относительно точки  $a/2$ . Соответственно, при замене  $x \rightarrow a - x$  написанное выше выражение для  $\psi_{1n}(x)$  не меняется (меняет знак) для нечетных  $n$  (четных  $n$ ).

Условие нормировки собственных функций дает

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_{1n}(x)|^2 = |A_n|^2 \int_0^a dx \sin^2(\pi n x/a) = |A_n|^2 \int_0^a dx \frac{1 - \cos(2\pi n x/a)}{2} = \frac{a}{2} |A_n|^2 = 1.$$

Выбирая  $A_n = \sqrt{2/a}$ , получаем выражение для нормированных собственных функций гамильтониана  $\hat{H}_1$  внутри ямы

$$\psi_{1n}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right), \quad x \in [0, a]. \quad (9.8)$$

Совершенно также находятся собственные функции гамильтонианов  $\hat{h}_2, \hat{h}_3$ . Таким образом, получаем собственные функции и собственные значения гамильтониана  $\hat{H}$ :

$$\psi_{nmk}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi m y}{b}\right) \sin\left(\frac{\pi k z}{c}\right), \quad x \in [0, a], y \in [0, b], z \in [0, c],$$

$$E_{nmk} = \varepsilon_{1n} + \varepsilon_{2m} + \varepsilon_{3k} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{k^2}{c^2} \right), \quad n, m, k = 1, 2, \dots$$

### §9.3. Постоянное однородное магнитное поле

Рассмотрим движение заряженной частицы в постоянном магнитном поле. Построим гамильтониан частицы. Её функция Гамильтона имеет вид (см. пример 16)

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2,$$

где  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  – вектор-потенциал магнитного поля. Заменяя согласно постулату Ш  $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\partial/\partial\mathbf{r}$ , получаем оператор Гамильтона

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2.$$

Эта формула справедлива в любом магнитном поле. В случае однородного поля она упрощается. Выберем ось  $z$  в направлении вектора напряженности поля  $\mathbf{H}$ . Тогда вектор  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  может быть выбран в виде

$$A_x = 0, \quad A_y = Hx, \quad A_z = 0, \quad H = |\mathbf{H}|. \quad (9.9)$$

Действительно, по формулам (1.25) находим

$$H_x = \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} = -\frac{\partial(Hx)}{\partial z} = 0, \quad H_y = \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} = 0, \quad H_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = \frac{\partial(Hx)}{\partial x} = H,$$

как и должно быть. Поэтому стационарное уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{qH}{c} x \right)^2 - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (9.10)$$

Видно, что гамильтониан можно записать в виде (9.1):

$$\hat{H}(x, \hat{h}_2(y), \hat{h}_3(z)) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} \left( \hat{h}_2(y) - \frac{qH}{c} x \right)^2 + \hat{h}_3(z),$$

где эрмитовы операторы

$$\hat{h}_2(y) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{h}_3(z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Соответственно этому ищем решение уравнения Шредингера в виде  $\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$ , где  $\psi_2$  и  $\psi_3$  – собственные векторы операторов  $\hat{h}_2$  и  $\hat{h}_3$ :

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \psi_2(y) = p_2 \psi_2(y), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi_3(z) = T_3 \psi_3(z).$$

Собственные значения в этих уравнениях обозначены через  $p_2$  и  $T_3$  потому, что они являются не чем иным как собственными значениями операторов импульса и кинетической энергии одномерных движений по осям  $y$  и  $z$ , соответственно. Собственные функции этих операторов уже были найдены ранее

$$\psi_{p_2}(y) = Ae^{ip_2y/\hbar}, \quad \psi_{T_3}(z) = Be^{ikz/\hbar} + Ce^{-ikz/\hbar}, \quad k = \sqrt{2mT_3}.$$

Наконец, заменяя в гамильтониане  $\hat{H}(x, \hat{h}_2(y), \hat{h}_3(y))$  операторы  $\hat{h}_{2,3}$  их собственными значениями, приходим к уравнению для функции  $\psi_1(x)$  [см. вывод уравнения (9.5)]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{1}{2m} \left( p_2 - \frac{qH}{c} x \right)^2 \psi_1(x) = E' \psi_1(x), \quad E' \equiv E - T_3.$$

Мы получили, таким образом, обыкновенное дифференциальное уравнение для  $\psi_1(x)$ , которое имеет вид обычного одномерного уравнения Шредингера для частицы массы  $m$ , движущейся в квадратичном потенциале

$$U(x) = \frac{1}{2m} \left( p_2 - \frac{qH}{c} x \right)^2.$$

Сдвигом переменной  $x \rightarrow x + p_2 c / qH$  он приводится к виду

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad \omega = \frac{|q|H}{mc}.$$

Поэтому решение для  $\psi_1(x)$  получается из решения задачи для гармонического осциллятора, найденного в §8.5, обратным сдвигом  $x \rightarrow x - p_2 c / qH$ . Например, решению, описывающему плоское движение с наименьшей энергией, соответствует функция

$$\psi_0(x) = \left( \frac{|q|H}{\pi c \hbar} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{|q|H}{2c\hbar} \left( x - \frac{p_2 c}{qH} \right)^2 \right\},$$

а уровни энергии определяются формулой

$$E'_n = \hbar \frac{|q|H}{mc} \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9.11)$$

Эти дискретные уровни называются *уровнями Ландау*.

Итак, любое решение исходного уравнения (9.10) может быть представлено в виде суперпозиции функций

$$\psi_{np_2 T_3}(x, y, z) = e^{(ip_2 y + ikz)/\hbar} \psi_{1n}(x), \quad k = \pm \sqrt{2mT_3}. \quad (9.12)$$

При этом функция  $\psi_{np_2 T_3}(x, y, z)$  соответствует собственному значению

$$E_{np_2 T_3} = E' + T_3 = \hbar \frac{|q|H}{mc} \left( n + \frac{1}{2} \right) + T_3. \quad (9.13)$$

Величины  $p_2, k$  пробегает все вещественные значения, а  $n$  – все натуральные (включая нуль). Мы видим, что энергия частицы не зависит от величины  $p_2$ . В то же время, функции (9.12) с различными  $p_2$  являются линейно-независимыми. Это означает, что каждое значение (9.13) является бесконечно-кратно вырожденным.

### §9.4. Свойства оператора момента импульса

В классической механике при движении в центрально-симметричном поле сохраняется момент импульса частицы. Естественно поэтому, что и в соответствующей квантовой задаче момент импульса играет важную роль. В этом параграфе исследуются основные свойства оператора момента.

#### А. Коммутационные соотношения

В соответствии с постулатом III оператор момента импульса частицы получается из классического выражения  $\mathbf{m} = [\mathbf{r}, \mathbf{p}]$  заменой  $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\partial/\partial\mathbf{r}$ :

$$\hat{\mathbf{m}} = \hbar[\mathbf{r}, -i\partial/\partial\mathbf{r}]$$

(Здесь квадратные скобки обозначают векторное произведение, а не коммутатор). Удобно определить вспомогательный оператор  $\hat{\mathbf{l}}$ , выделяя постоянную Планка,  $\hat{\mathbf{m}} = \hbar\hat{\mathbf{l}}$ . Оператор  $\hat{\mathbf{l}}$  является безразмерным – это есть оператор момента, измеренного в единицах  $\hbar$ . В компонентах,

$$\hat{l}_x = -i(y\partial/\partial z - z\partial/\partial y), \quad \hat{l}_y = -i(z\partial/\partial x - x\partial/\partial z), \quad \hat{l}_z = -i(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x). \quad (9.14)$$

Найдем коммутаторы этих операторов. Имеем для любого вектора  $\psi$

$$\begin{aligned} [\hat{l}_x, \hat{l}_y]\psi = & -[(y\partial/\partial z - z\partial/\partial y), (z\partial/\partial x - x\partial/\partial z)]\psi = -\{[y\partial/\partial z, z\partial/\partial x] - [y\partial/\partial z, x\partial/\partial z] \\ & - [z\partial/\partial y, z\partial/\partial x] + [z\partial/\partial y, x\partial/\partial z]\}\psi. \end{aligned} \quad (9.15)$$

Ввиду независимости координат  $x, y, z$  находим

$$[y\partial/\partial z, z\partial/\partial x]\psi = y\partial/\partial z(z\partial\psi/\partial x) - z\partial/\partial x(y\partial\psi/\partial z) = y\partial\psi/\partial x,$$

$$[y\partial/\partial z, x\partial/\partial z]\psi = y\partial/\partial z(x\partial\psi/\partial z) - x\partial/\partial z(y\partial\psi/\partial z) = 0,$$

и т.д., так что получаем

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y]\psi = -y\partial\psi/\partial x + x\partial\psi/\partial y = i\hat{l}_z\psi,$$

что в силу произвольности вектора  $\psi$  можно записать в операторном виде

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z. \quad (9.16)$$

Остальные два коммутатора можно получить отсюда циклической перестановкой координат  $x, y, z$ :

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hat{l}_x, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hat{l}_y. \quad (9.17)$$

При определении собственных значений и собственных функций оператора момента особенно удобными оказываются следующие две комбинации его компонент  $\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y$  и  $\hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y$ . Эти операторы эрмитово сопряжены друг другу. Действительно, по правилам (7.13), (7.16) находим  $(\hat{l}_+)^+ = \hat{l}_x^+ + (i\hat{l}_y)^+ = \hat{l}_x - i\hat{l}_y = \hat{l}_-$ . Ниже нам понадобятся коммутаторы этих операторов друг с другом и с  $\hat{l}_z$ . Поскольку коммутаторы компонент

момента мы уже вычислили, интересующие нас коммутаторы могут быть найдены сразу в операторном виде:

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = [\hat{l}_x + i\hat{l}_y, \hat{l}_x - i\hat{l}_y] = [\hat{l}_x, \hat{l}_x] - i[\hat{l}_x, \hat{l}_y] + i[\hat{l}_y, \hat{l}_x] + [\hat{l}_y, \hat{l}_y] = 0 - i(i\hat{l}_z) + i(-i\hat{l}_z) + 0,$$

или

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hat{l}_z. \quad (9.18)$$

Далее,

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_z] = [\hat{l}_x + i\hat{l}_y, \hat{l}_z] = [\hat{l}_x, \hat{l}_z] + i[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = -i\hat{l}_y + i(i\hat{l}_x),$$

т.е.

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_z] = -\hat{l}_+. \quad (9.19)$$

Аналогично получаем, наконец, что

$$[\hat{l}_-, \hat{l}_z] = \hat{l}_-. \quad (9.20)$$

Рассмотрим теперь оператор квадрата момента импульса,

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2.$$

С помощью операторов  $\hat{l}_\pm$  и формулы (9.16) его можно переписать так:

$$\hat{l}^2 = (\hat{l}_x + i\hat{l}_y)(\hat{l}_x - i\hat{l}_y) + i(\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x) + \hat{l}_z^2 = \hat{l}_+\hat{l}_- - \hat{l}_z + \hat{l}_z^2,$$

а учитывая соотношение (9.18), также и в виде

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_-\hat{l}_+ + \hat{l}_z + \hat{l}_z^2. \quad (9.21)$$

Важно, что оператор квадрата момента коммутирует с операторами компонент момента. Действительно, имеем, используя представление (9.21) и формулы (9.19), (9.20),

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_z] = [\hat{l}_-\hat{l}_+, \hat{l}_z] = \hat{l}_-\hat{l}_+\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_-\hat{l}_+ = \hat{l}_-(\hat{l}_z\hat{l}_+ - \hat{l}_+) - \hat{l}_z\hat{l}_-\hat{l}_+ = (\hat{l}_z\hat{l}_- + \hat{l}_-)\hat{l}_+ - \hat{l}_-\hat{l}_+ - \hat{l}_z\hat{l}_-\hat{l}_+ = 0.$$

Циклически переставив здесь индексы  $x, y, z$ , получим, что и  $[\hat{l}^2, \hat{l}_x] = [\hat{l}^2, \hat{l}_y] = 0$ . По теореме, доказанной в §7.5А, это означает, что у каждой пары операторов  $\{\hat{l}^2, \hat{l}_x\}$ ,  $\{\hat{l}^2, \hat{l}_y\}$ ,  $\{\hat{l}^2, \hat{l}_z\}$  существует совместная система собственных функций (другими словами, соответствующие пары физических величин всегда могут быть точно измерены одновременно). Однако это не имеет места уже для троек операторов вида  $\{\hat{l}^2, \hat{l}_x, \hat{l}_y\}$ , поскольку не все они коммутируют друг с другом.

**Пример 41. Средние значения компонент момента.** Рассмотрим состояние  $\psi_m$  системы, в котором проекция  $l_z$  имеет определенное значение  $m$ . Тогда средние значения других двух проекций в этом состоянии равны нулю. Действительно, усредняя уравнения (9.17) по состоянию  $\psi_m$  и учитывая эрмитовость оператора  $\hat{l}_z$ , находим

$$\begin{aligned} i\bar{l}_x &= i(\psi_m, \hat{l}_x\psi_m) = (\psi_m, (\hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y)\psi_m) = (\psi_m, \hat{l}_y(\hat{l}_z\psi_m)) - (\hat{l}_z\psi_m, \hat{l}_y\psi_m) \\ &= (\psi_m, \hat{l}_y m\psi_m) - (m\psi_m, \hat{l}_y\psi_m) = 0 \end{aligned} \quad (9.22)$$

и, аналогично,  $\bar{l}_y = 0$ . Как мы знаем из §7.5В, среднее коммутатора двух операторов дает нижнюю границу произведения флуктуаций соответствующих физических величин в данном состоянии. В данном случае  $\bar{l}_x = \bar{l}_y = 0$ , и можно было бы подумать, исходя из соотношений (9.17), что в состоянии с определенным  $l_z$  определенное значения может иметь также и другая проекции момента, например,  $l_x$ . Однако из формулы (9.16) и соотношения неопределенности (7.73) следует, что  $D_{l_x} D_{l_y} \geq m/2$ , и поэтому при  $m \neq 0$  должно быть  $D_{l_x} > 0$ ,  $D_{l_y} > 0$ . Итак, единственным случаем, когда более чем одна из проекций момента имеет определенное значение, является тривиальный случай  $l_x = l_y = l_z = 0$ .

### В. Собственные функции и собственные значения

При движении в центрально-симметричном поле разделение переменных в уравнении Шредингера следует производить в сферических координатах. Для этого, в частности, оператор момента также должен быть выражен в сферических координатах. Нам понадобится, прежде всего, выражение для оператора  $\hat{l}_z$ . Легко видеть, что если переход от декартовых координат к сферическим задается формулами

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta,$$

то этот оператор в сферических координатах имеет вид

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

Действительно, по правилу дифференцирования сложной функции находим для произвольного вектора  $\psi$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \phi} = \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \phi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \phi} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \phi} = -\frac{\partial \psi}{\partial x} r \sin \theta \sin \phi + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \sin \theta \cos \phi + 0 = -\frac{\partial \psi}{\partial x} y + \frac{\partial \psi}{\partial y} x,$$

следовательно, в соответствии с выражением (9.16)

$$-i \frac{\partial \psi}{\partial \phi} = -i \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi = \hat{l}_z \psi.$$

Таким образом, собственные функции оператора  $\hat{l}_z$  определяются уравнением

$$-i \frac{\partial \psi_{l_z}}{\partial \phi} = l_z \psi_{l_z}.$$

Решение этого уравнения есть  $\psi_{l_z}(r, \theta, \phi) = A(r, \theta) e^{il_z \phi}$ , где  $A(r, \theta) \in \mathcal{M}$  – произвольная функция координат  $r, \theta$ . Поскольку при любом вещественном  $l_z$  функция  $\psi_{l_z}(r, \theta, \phi)$  является бесконечно дифференцируемой и ограниченной функцией координат  $r, \theta, \phi$ , то отсюда можно было бы заключить, что собственными значениями оператора  $\hat{l}_z$  являются все вещественные числа. Однако этот вывод поспешен. Дело в том, что соответствие между декартовыми и сферическими координатами не является взаимно-однозначным: тройки координат  $(r, \theta, \phi)$  и  $(r, \theta, \phi + 2\pi n)$ , где  $n \in \mathbb{Z}$ , соответствуют одной и той же точке пространства. В то же время, по определению собственных функций, они должны принадлежать пространству  $\mathcal{M}$ , т.е. быть однозначными дифференцируемыми функциями

именно декартовых координат (см. §7.1). Конечно, однозначности функции  $e^{il_z\phi}$  можно добиться, ограничив множество значений угла  $\phi$  полуоткрытым отрезком  $[0, 2\pi)$ . Однако при этом точки с координатами  $(r, \theta, 0)$  и  $(r, \theta, 2\pi - \epsilon)$  можно сделать сколь угодно близкими друг к другу, выбирая достаточно малое число  $\epsilon > 0$ . Для того чтобы функция  $\psi_{l_z}(r, \theta, \phi)$  была непрерывна в точке  $(r, \theta, 0)$ , необходимо, следовательно, чтобы предел величины  $\psi_{l_z}(r, \theta, 2\pi - \epsilon)$  при  $\epsilon \rightarrow 0$  совпадал со значением  $\psi_{l_z}(r, \theta, 0)$ , т.е.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} A(r, \theta) e^{il_z(2\pi - \epsilon)} = A(r, \theta) e^{il_z 2\pi} = A(r, \theta),$$

откуда следует, что  $e^{il_z 2\pi} = 1$ , т.е.  $l_z = m, m \in Z$ . Таким образом, собственные значения оператора  $\hat{l}_z$  являются целыми числами, а его собственные функции имеют вид

$$\psi_m(r, \theta, \phi) = A(r, \theta) e^{im\phi}, \quad m \in Z. \quad (9.23)$$

Перейдем теперь к собственным функциям и собственным значениям оператора квадрата момента. Поскольку  $[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z] = 0$ , то на основании теоремы из §7.5А мы можем считать, что собственные векторы оператора  $\hat{\mathbf{l}}^2$  являются также и собственными векторами оператора  $\hat{l}_z$ . Обозначим их через  $\psi_{\lambda m}$ , где  $\lambda, m$  есть собственные значения операторов  $\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z$ , соответственно. Итак, векторы  $\psi_{\lambda m}$  удовлетворяют уравнениям

$$\hat{\mathbf{l}}^2 \psi_{\lambda m} = \lambda \psi_{\lambda m}, \quad \hat{l}_z \psi_{\lambda m} = m \psi_{\lambda m}. \quad (9.24)$$

Оказывается, что функции  $\psi_{\lambda m}$ , соответствующие различным значениям  $m$  при данном  $\lambda$ , связаны друг с другом простым соотношением. Для его вывода подействуем операторным равенством (9.19) на вектор  $\psi_{\lambda m}$ , учитывая второе из уравнений (9.24),

$$\hat{l}_+ m \psi_{\lambda m} - \hat{l}_z \hat{l}_+ \psi_{\lambda m} = -\hat{l}_+ \psi_{\lambda m},$$

откуда

$$\hat{l}_z (\hat{l}_+ \psi_{\lambda m}) = (m + 1) (\hat{l}_+ \psi_{\lambda m}).$$

Из этого уравнения следует, что вектор  $\hat{l}_+ \psi_{\lambda m}$  является собственным вектором оператора  $\hat{l}_z$ , соответствующим собственному значению  $(m + 1)$ . Более того, этот вектор соответствует тому же собственному значению оператора квадрата момента, что и вектор  $\psi_{\lambda m}$ . Действительно, поскольку  $\hat{\mathbf{l}}^2$  коммутирует с операторами проекций момента, то он коммутирует и с оператором  $\hat{l}_+$ , и потому в силу первого из уравнений (9.24)

$$\hat{\mathbf{l}}^2 (\hat{l}_+ \psi_{\lambda m}) = (\hat{\mathbf{l}}^2 \hat{l}_+) \psi_{\lambda m} = (\hat{l}_+ \hat{\mathbf{l}}^2) \psi_{\lambda m} = \hat{l}_+ (\hat{\mathbf{l}}^2 \psi_{\lambda m}) = \hat{l}_+ \lambda \psi_{\lambda m} = \lambda (\hat{l}_+ \psi_{\lambda m}),$$

что и требовалось доказать. Итак, оператор  $\hat{l}_+$  увеличивает значение  $z$ -проекции момента на единицу, оставляя неизменным величину квадрата момента. Его называют поэтому *повышающим оператором*. Аналогично, с помощью равенства (9.20) показывается, что оператор  $\hat{l}_-$  уменьшает значение  $z$ -проекции момента на единицу, и называется поэтому *понижающим оператором*.

Определим теперь сами значения  $\lambda$ , т.е. спектр оператора  $\hat{\mathbf{l}}^2$ . Заметим, во-первых, что  $\lambda \geq 0$ . Действительно, учитывая уравнения (9.24), эрмитовость операторов компонент момента и свойство 2 скалярного произведения, имеем

$$\begin{aligned} \lambda (\psi_{\lambda m}, \psi_{\lambda m}) &= (\psi_{\lambda m}, \lambda \psi_{\lambda m}) = (\psi_{\lambda m}, \hat{\mathbf{l}}^2 \psi_{\lambda m}) = (\psi_{\lambda m}, (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2) \psi_{\lambda m}) \\ &= (\hat{l}_x \psi_{\lambda m}, \hat{l}_x \psi_{\lambda m}) + (\hat{l}_y \psi_{\lambda m}, \hat{l}_y \psi_{\lambda m}) + m^2 (\psi_{\lambda m}, \psi_{\lambda m}). \end{aligned} \quad (9.25)$$

В силу свойства 4 скалярного произведения входящие в это равенство скалярные произведения неотрицательны, а величина  $(\psi_{\lambda m}, \psi_{\lambda m})$  к тому же не равна нулю, по определению собственного вектора. Поэтому, переписывая равенство (9.25) в виде

$$(\lambda - m^2)(\psi_{\lambda m}, \psi_{\lambda m}) = (\hat{l}_x \psi_{\lambda m}, \hat{l}_x \psi_{\lambda m}) + (\hat{l}_y \psi_{\lambda m}, \hat{l}_y \psi_{\lambda m}),$$

видим, что при заданном значении  $\lambda$  возможные значения числа  $m$  ограничены по абсолютной величине. Положим

$$l = \max_{\lambda}(m),$$

где максимум берется при заданном значении  $\lambda$ . Таким образом, по определению,  $l$  – целое неотрицательное число. Выразим  $\lambda$  через  $l$ . Для этого подействуем операторным равенством (9.21) на вектор  $\psi_{\lambda l}$ . Поскольку  $l$  – максимально возможное значение  $m$  при данном  $\lambda$ , то оператор  $\hat{l}_+$  обращает вектор  $\psi_{\lambda l}$  в нуль (если бы это было не так, то вектор  $\hat{l}_+ \psi_{\lambda l}$  был бы собственным для оператора  $\hat{l}_z$ , соответствующим собственному значению  $m = l + 1$ , что невозможно по определению числа  $l$ ). Поэтому, учитывая равенства (9.24), находим

$$\lambda \psi_{\lambda l} = l \psi_{\lambda l} + l^2 \psi_{\lambda l},$$

откуда

$$\lambda = l(l + 1). \quad (9.26)$$

Поскольку значение  $\lambda$  однозначно определяется числом  $l$ , и наоборот, то для простоты обозначений первым нижним индексом у собственных функций вместо  $\lambda$  указывают обычно число  $l$  и пишут:  $\psi_{lm}$ , что мы и будем делать в дальнейшем.

Для того чтобы показать, что значения (9.26) действительно являются собственными значениями оператора  $\hat{l}^2$ , нам надо еще найти явный вид функций  $\psi_{lm}(r, \theta, \phi)$  и доказать, что они принадлежат пространству  $\mathcal{M}$ . Это удобно сделать с помощью операторов  $\hat{l}_{\pm}$ , для чего надо выразить их в сферических координатах. Проверим, что

$$\hat{l}_+ = e^{i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad \hat{l}_- = e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \quad (9.27)$$

С одной стороны, имеем согласно формулам (9.14)

$$\begin{aligned} \hat{l}_+ \psi &= -i \left( y \frac{\partial \psi}{\partial z} - z \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \left( z \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) = z \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} + i \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - (x + iy) \frac{\partial \psi}{\partial z} \\ &= r \cos \theta \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} + i \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - r \sin \theta e^{i\phi} \frac{\partial \psi}{\partial z}. \end{aligned}$$

С другой стороны, по правилу дифференцирования сложной функции

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi &= \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} r \cos \theta \cos \phi + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \cos \theta \sin \phi - \frac{\partial \psi}{\partial z} r \sin \theta \right) \\ &+ i \operatorname{ctg} \theta \left( -\frac{\partial \psi}{\partial x} r \sin \theta \sin \phi + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \sin \theta \cos \phi \right) \\ &= r \cos \theta (\cos \phi - i \sin \phi) \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} + i \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - r \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial z}. \end{aligned}$$

Сравнение этих двух выражений с учетом формулы  $\cos \phi - i \sin \phi = e^{-i\phi}$  подтверждает первую из формул (9.27). Аналогично проверяется и вторая.

Теперь уже нетрудно вычислить  $\psi_{lm}$ . Расписывая явно тождество  $\hat{l}_+ \psi_{lm} = 0$ , имеем

$$e^{i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi_{lm} = 0,$$

или, подставляя согласно формуле (9.23)  $\psi_{lm} = A(r, \theta) e^{il\phi}$ ,

$$\frac{\partial A(r, \theta)}{\partial \theta} = l \operatorname{ctg} \theta A(r, \theta).$$

Решение этого уравнения легко находится разделением дифференциалов:

$$A(r, \theta) = A(r) \sin^l \theta,$$

где  $A(r)$  – произвольная функция координаты  $r$ . Поскольку операторы компонент момента действуют лишь на угловые переменные, зависимость их собственных функций от радиальной координаты  $r$  остается полностью произвольной (требуется лишь, чтобы функции  $A(r)$  принадлежали пространству  $\mathcal{M}$ ). Иначе говоря, координата  $r$  в данном случае играет роль параметра, и для краткости не будет выписываться явно. Итак, мы получили, что  $\psi_{lm}(\theta, \phi) = A \sin^l \theta e^{il\phi}$ . Действуя на эту функцию оператором  $\hat{l}_-$ , получаем вектор  $\psi_{l, l-1}$ :

$$\psi_{l, l-1}(r, \theta, \phi) = e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) A \sin^l \theta e^{il\phi} = -2lAe^{i(l-1)\phi} \sin^{l-1} \theta \cos \theta,$$

а для того чтобы получить вектор  $\psi_{lm}$ , надо подействовать на вектор  $\psi_{l, l-1}$  понижающим оператором  $(l - m)$  раз:

$$\psi_{lm}(\theta, \phi) = A \left\{ e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right\}^{l-m} \sin^l \theta e^{il\phi}. \quad (9.28)$$

Альтернативно, вектор  $\psi_{lm}$  может быть получен как  $\psi_{lm} = (\hat{l}_+)^{l+m} \psi_{l, -l}$ . Из тождества  $\hat{l}_- \psi_{l, -l} = 0$  находим, как и раньше,  $\psi_{l, -l} = A \sin^l \theta e^{-il\phi}$ , и поэтому

$$\psi_{lm}(\theta, \phi) = A \left\{ e^{i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right\}^{l+m} \sin^l \theta e^{-il\phi}. \quad (9.29)$$

Из формул (9.28), (9.29) следует важный вывод о том, что все функции  $\psi_{lm}(r, \theta, \phi)$  являются полиномами по  $\sin \theta$  и  $\cos \theta$ , а именно, легко проверить, что синусы, появляющиеся в знаменателе из-за котангенса в  $\hat{l}_\pm$  и содержащие потенциальную особенность при  $\theta = 0, \pi$ , сокращаются с синусами из  $\sin^l \theta$ . Действительно, степень последнего уменьшается на единицу при каждом действии операторов  $\hat{l}_\pm$  (как из-за дифференцирования по  $\theta$ , так и из-за умножения на  $\operatorname{ctg} \theta$ ), но из формулы (9.28) видно, что при  $m \geq 0$  степень синуса после всех этих операций оказывается не меньше  $l - (l - m) = m \geq 0$ , тогда как из формулы (9.29) следует, что при  $m \leq 0$  эта степень оказывается не меньше  $l - (l + m) = -m \geq 0$ , т.е. неотрицательной при любом  $m$ . Таким образом, при всех целых неотрицательных  $l$  функции  $\psi_{lm}(r, \theta, \phi)$  являются однозначными и имеют производные любого порядка по  $r, \theta, \phi$ , а потому и по  $x, y, z$ . Следовательно, они принадлежат пространству  $\mathcal{M}$  и являются собственными функциями операторов  $\hat{l}^2, \hat{l}_z$ .

**Пример 42.** Флуктуации компонент момента. Продолжим разбор примера 41. Найдем флуктуации  $l_x, l_y$  в том случае, когда вместе с  $l_z$  имеет определенное значение и квадрат момента. Усредняя равенство

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$$

по этому состоянию, получаем

$$l(l+1) = \overline{l_x^2} + \overline{l_y^2} + m^2. \quad (9.30)$$

С другой стороны, имеем тождественно  $\overline{l_+^2} = 0$ , поскольку оператор  $\hat{l}_+^2$  переводит вектор  $\psi_{lm}$  в ортогональный ему вектор  $\psi_{l, m+2}$  (см. теорему об ортогональности собственных функций эрмитова оператора из §7.4В). Раскрывая это тождество, находим

$$\overline{l_+^2} = (\psi_{lm}, (\hat{l}_x + i\hat{l}_y)^2 \psi_{lm}) = (\psi_{lm}, (\hat{l}_x^2 - \hat{l}_y^2 + i(\hat{l}_x \hat{l}_y + \hat{l}_y \hat{l}_x)) \psi_{lm}) = \overline{l_x^2} - \overline{l_y^2} + i\overline{(l_x l_y + l_y l_x)} = 0.$$

Операторы  $\hat{l}_x^2, \hat{l}_y^2, \hat{l}_x \hat{l}_y + \hat{l}_y \hat{l}_x$  являются эрмитовыми. Действительно, имеем, например,

$$(\hat{l}_x \hat{l}_y + \hat{l}_y \hat{l}_x)^+ = (\hat{l}_x \hat{l}_y)^+ + (\hat{l}_y \hat{l}_x)^+ = \hat{l}_y^+ \hat{l}_x^+ + \hat{l}_x^+ \hat{l}_y^+ = \hat{l}_y \hat{l}_x + \hat{l}_x \hat{l}_y = \hat{l}_x \hat{l}_y + \hat{l}_y \hat{l}_x.$$

Поэтому их средние значения вещественны, и отделение вещественной части тождества  $\overline{l_x^2} - \overline{l_y^2} + i\overline{(l_x l_y + l_y l_x)} = 0$  дает  $\overline{l_x^2} = \overline{l_y^2}$ . Подставляя это в равенство (9.30), находим

$$\overline{l_x^2} = \overline{l_y^2} = \frac{l(l+1) - m^2}{2}.$$

Поэтому

$$D_{l_y} = D_{l_x} = \sqrt{\overline{l_x^2}} = \sqrt{\frac{l(l+1) - m^2}{2}}.$$

В частности, поскольку  $l \geq m$ , то

$$D_{l_x} D_{l_y} = \frac{l(l+1) - m^2}{2} \geq \frac{m}{2},$$

в согласии с принципом неопределенности.

**Пример 43.** Собственные функции момента с  $l = 0, 1, 2$ . При  $l = 0$  возможно лишь одно значение  $m = 0$ , а соответствующая собственная функция  $\psi_{00} = B$ , т.е. не зависит от угловых координат. При  $l = 1$  число  $m$  пробегает значения  $+1, 0, -1$ , при этом  $\psi_{11} = A \sin \theta e^{i\phi}$ ,  $\psi_{10} = \hat{l}_- \psi_{11} = -2A \cos \theta$ ,  $\psi_{1,-1} = \hat{l}_- \psi_{10} = -2A \sin \theta e^{-i\phi}$ . При  $l = 2$   $z$ -проекция момента может иметь значения  $+2, +1, 0, -1, -2$ , которым соответствуют собственные функции

$$\psi_{22} = A \sin^2 \theta e^{2i\phi}, \quad \psi_{21} = \hat{l}_- \psi_{22} = -4A \sin \theta \cos \theta e^{i\phi},$$

$$\begin{aligned} \psi_{20} &= \hat{l}_- \psi_{21} = -4A e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \sin \theta \cos \theta e^{i\phi} \\ &= -4A (-\cos^2 \theta + \sin^2 \theta - \operatorname{ctg} \theta \sin \theta \cos \theta) = 4A (3 \cos^2 \theta - 1). \end{aligned} \quad (9.31)$$

Аналогично получаем, что  $\psi_{2,-1} = A \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi}$ ,  $\psi_{2,-2} = A \sin^2 \theta e^{-2i\phi}$ .

## §9.5. Центральнo-симметричное поле

Движение частицы в центрально-симметричном поле описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r), \quad \Delta \equiv \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2. \quad (9.32)$$

Для того чтобы разделить переменные в уравнении Шредингера, воспользуемся известным выражением лапласиана  $\Delta$  в сферических координатах:

$$\Delta\psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial\psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} \right\}.$$

Замечательным при этом оказывается тот факт, что выражение в фигурных скобках здесь есть не что иное как  $(-\hat{l}^2)$ . Это нетрудно проверить, подставив выражения (9.27) в формулу (9.21). Имеем

$$\begin{aligned} \hat{l}_- \hat{l}_+ \psi &= e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) e^{i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \psi = -\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} - \frac{\partial}{\partial\theta} \left( i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial\psi}{\partial\phi} \right) \\ &\quad - \operatorname{ctg}\theta \left( \frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \psi + i \operatorname{ctg}\theta \left( \frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \frac{\partial\psi}{\partial\phi} \\ &= -\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + i \frac{\partial\psi}{\partial\phi} - \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}^2\theta \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}, \end{aligned}$$

поэтому

$$\begin{aligned} \hat{l}^2\psi &= (\hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z + \hat{l}_z^2)\psi = -\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + i \frac{\partial\psi}{\partial\phi} - \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}^2\theta \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} - i \frac{\partial\psi}{\partial\phi} - \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} \\ &= -\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \right) - \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}, \end{aligned}$$

Таким образом, стационарное уравнение Шредингера в центральном поле принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{l}^2}{r^2} \right] \psi + U(r)\psi = E\psi. \quad (9.33)$$

Мы видим, что гамильтониан опять имеет вид (9.1), причем  $q_1 = r$ ,  $\{q_2\} = \{\theta, \phi\}$ ,  $\hat{h} = \hat{l}^2$ . Поэтому мы ищем его собственные функции в виде

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi),$$

где  $Y(\theta, \phi)$  являются собственными функциями оператора  $\hat{l}^2$ :

$$\hat{l}^2 Y = \lambda Y.$$

Но эти собственные функции были уже найдены в §9.4В как совместные собственные функции операторов  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z$ . Согласно формуле (9.28) имеем

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = A_{lm} \left\{ e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \right\}^{l-m} \sin^l\theta e^{il\phi},$$

где  $A_{lm}$  – произвольные постоянные. Заменяя в гамильтониане оператор  $\hat{l}^2$  его собственным значением [см. формулу (9.26)], получаем уравнение для радиальной функции  $R(r)$  [см. вывод уравнения (9.5)]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R + U(r)R = ER. \quad (9.34)$$

Таким образом, задача нахождения собственных функций гамильтониана в центральном поле сведена к задаче решения обыкновенного дифференциального уравнения для радиальной функции  $R(r)$ . Больше того, полученное уравнение может быть представлено в виде одномерного уравнения Шредингера. Для этого заметим, что первый член в левой части уравнения (9.34) можно переписать так:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} = \frac{1}{r} \frac{d^2 (rR)}{dr^2}.$$

Поэтому, домножая уравнение (9.34) на  $r$  и вводя новую неизвестную функцию  $\chi(r) = rR(r)$ , приходим к следующему уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + U_{\text{eff}}^{(l)}(r)\chi = E\chi, \quad (9.35)$$

где

$$U_{\text{eff}}^{(l)}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}.$$

Это уравнение имеет в точности вид уравнения (8.5), описывающего прямолинейное движение частицы в эффективном потенциальном поле  $U_{\text{eff}}^{(l)}(r)$  (ср. с аналогичным результатом классической механики, §3.2).

Заметим, что величиной, определяющей плотность распределения вероятностей радиальной координаты, является именно функция  $\chi(r)$ . Действительно, согласно постулату I, вероятность обнаружить частицу в элементе объема  $d\tau = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$  около точки с координатами  $r, \theta, \phi$  дается выражением (предполагается, что  $(\psi, \psi) = 1$ )

$$w(r, \theta, \phi) d\tau = |\psi|^2 d\tau = |R(r)|^2 |Y(\theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = (|\chi(r)|^2 dr) (|Y(\theta, \phi)|^2 do),$$

где  $do = \sin \theta d\theta d\phi$  – элемент телесного угла в направлении, определяемом углами  $\theta, \phi$ . Распределение вероятности для радиальной координаты получается отсюда интегрированием по  $do$  (ср. пояснение **B** в §7.3)

$$w(r) dr = |\chi(r)|^2 dr \int do |Y(\theta, \phi)|^2. \quad (9.36)$$

Поскольку функции  $Y(\theta, \phi)$  конечны, то интеграл  $\int do |Y(\theta, \phi)|^2$  также конечен. Из формулы (9.36) следует поэтому, что если договориться нормировать функции  $Y(\theta, \phi)$  условием

$$\int do |Y(\theta, \phi)|^2 = 1, \quad (9.37)$$

то  $|\chi(r)|^2$  даст плотность распределения вероятностей координаты  $r$ :

$$w(r) = |\chi(r)|^2. \quad (9.38)$$

Как следствие, условие нормировки для функции  $\chi(r)$  имеет тот же вид, что и при одномерном движении:

$$\int_0^{+\infty} dr |\chi(r)|^2 = 1. \quad (9.39)$$

**Пример 44.** Нормированные собственные функции момента с  $l = 0, 1$ . Нетрудно проверить, что функции  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  с  $l = 0, 1$  можно выбрать в виде

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}. \quad (9.40)$$

Имеем, например,

$$(Y_{10}, Y_{10}) = \frac{3}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \cos^2 \theta = \frac{3}{2} \int_{-1}^{+1} dx x^2 = 1.$$

Тот факт, что уравнение Шредингера и условие нормировки для радиального движения имеют одномерный вид позволяет применить к нему результаты качественного исследования, проведенного в §8.2. Для этого надо лишь заменить  $U(x) \rightarrow U_{\text{eff}}(r)$  и учесть, что  $r$  не может быть отрицательным. Это условие можно интерпретировать как наличие бесконечно высокой потенциальной стенки в точке  $r = 0$ . Вероятность нахождения частицы слева от стенки должна быть равна нулю, а потому по непрерывности она должна обращаться в нуль и в точке  $r = 0$ . Таким образом, одним из граничных условий для собственной функции  $\chi(r)$  является  $\chi(0) = 0$ . Второе условие на собственную функцию следует, как всегда, из условия ограниченности функции  $\psi(\mathbf{r})$ . Поскольку функции  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  конечны при всех  $\theta, \phi$ , то для ограниченности  $\psi$  при  $r \rightarrow \infty$  необходимо и достаточно, чтобы функция  $R(r)$  была ограничена при  $r \rightarrow \infty$ . Если  $\chi(r)$  ограничена при  $r \rightarrow +\infty$ , то и  $R(r) = \chi(r)/r$  также ограничена (а именно, стремится к нулю). С другой стороны, как мы знаем из §8.2, если решение одномерного уравнения Шредингера неограничено, то оно растет на больших расстояниях быстрее первой степени координаты. Поэтому, если функция  $\chi(r)$  неограничена, то и функция  $R(r) = \chi(r)/r$  также неограничена. Мы видим, таким образом, что функция  $\psi = R(r)Y(\theta, \phi)$  является собственной функцией гамильтониана тогда и только тогда, когда функция  $\chi(r)$  является собственной функцией оператора  $\hat{H}_r^{(l)} \equiv -\hbar^2/2m \cdot d^2/dr^2 + U_{\text{eff}}^{(l)}(r)$ , описывающего одномерное радиальное движение частицы в эффективном поле  $U_{\text{eff}}^{(l)}(r)$ .

Заметим, наконец, что поскольку радиальное движение может быть инфинитным лишь в одну сторону, то каждому значению  $E$  в уравнении (9.35) может соответствовать максимум одна собственная функция  $\chi(r)$ , т.е. собственные значения  $E^{(l)}$  гамильтониана  $\hat{H}_r^{(l)}$  являются невырожденными. Это не означает, конечно, что спектр исходного гамильтониана (9.32), описывающего трехмерное движение, также невырожден. Наоборот, поскольку уравнение (9.34) не содержит собственного значения  $m$  проекции момента на ось  $z$ , то и  $E$  не зависит от  $m$ , а потому для каждого  $E^{(l)}$  имеется  $2l + 1$  независимых собственных функций  $\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = (\chi(r)/r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ ,  $m = -l, \dots, +l$ . Таким образом, каждое собственное значение  $E = E^{(l)}$  гамильтониана  $\hat{H}$  как минимум  $(2l + 1)$ -кратно вырождено. Степень вырождения может даже оказаться выше, если собственные значения  $E^{(l)}$  совпадают для различных значений  $l$ , как это имеет место, например, в кулоновом поле.

## §9.6. Двухатомная молекула

Применим полученные результаты к движению двухатомной молекулы. Как было объяснено в §4.2, ввиду того что электронные скорости в атомах и молекулах значительно ( $\sim 10^3$  раз) превосходят ядерные, движение атомных ядер может быть эффективно описано как движение материальных точек, взаимодействующих по закону  $U(r)$ , где  $U(r)$  есть электронный терм молекулы, т.е. полная энергия электронов (их кинетическая и потенциальная энергии), вычисленная при неподвижных ядрах, плюс энергия электростатического взаимодействия ядер. Для каждой молекулы имеется набор термов, соответствующих различным электронным состояниям.

Для того чтобы описать квантовое поведение ядер, надо, как всегда, построить гамильтониан системы. Как было показано в §3.2, функция Лагранжа системы двух частиц может быть представлена в виде

$$L = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{m \dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(r),$$

где  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  – вектор, описывающий ориентацию первой частицы относительно второй,  $\mathbf{R} = (m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$  – радиус-вектор центра масс системы,  $\mu = m_1 + m_2$  и  $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  – полная и приведенная масса системы, соответственно, и  $U(r)$  – потенциальная энергия взаимодействия частиц. Первое слагаемое в этой функции Лагранжа описывает свободную частицу массы  $\mu$  (т.е. центр масс ядер). Поскольку свободное движение частиц мы уже изучили ранее, мы опустим этот член и рассмотрим относительное движение ядер, описываемое функцией

$$L = \frac{m \dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(r).$$

Эта функция в точности совпадает с функцией Лагранжа частицы, движущейся в центральном поле, причем положение частицы задается радиус-вектором  $\mathbf{r}$ . Ввиду этого совпадают и функции Гамильтона этих систем, а следовательно и их гамильтонианы. Поэтому полученные в предыдущем параграфе результаты непосредственно применимы и к данной задаче.

Рассмотрим случай, когда при движении системы расстояние между ядрами в среднем меняется мало. Классически такое движение соответствует наложению малых радиальных колебаний ядер и их вращения вокруг центра масс. В этом случае ядра находятся в основном вблизи минимума функции  $U_{\text{eff}}^{(l)}(r) = U(r) + \hbar^2 l(l+1)/(2mr^2)$ . Точка минимума  $r_0$  определяется уравнением  $dU_{\text{eff}}^{(l)}/dr = 0$ , или

$$\frac{dU}{dr}(r_0) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr_0^3}. \quad (9.41)$$

Разлагая эффективную потенциальную энергию около точки  $r_0$ , получаем

$$U_{\text{eff}}^{(l)}(r) = U_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_0^2} + \frac{k_0}{2}(r - r_0)^2 + \frac{3\hbar^2 l(l+1)}{2mr_0^4}(r - r_0)^2, \quad U_0 \equiv U(r_0), \quad k_0 \equiv \frac{d^2 U}{dr^2}(r_0).$$

Подставляя это выражение в уравнение (9.35), получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{d\xi^2} + \frac{\varkappa \xi^2}{2} \chi = E' \chi, \quad (9.42)$$

где

$$\varkappa = k_0 + \frac{3\hbar^2 l(l+1)}{mr_0^4}, \quad E' = E - U_0 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_0^2}$$

и введена новая независимая переменная  $\xi = r - r_0$ . Уравнение (9.42) было уже решено в §8.5. Единственное отличие от случая обычного осциллятора состоит в том, что функция  $\chi(\xi)$  должна удовлетворять условиям  $\chi(-r_0) = \chi(+\infty) = 0$ , а не  $\chi(-\infty) = \chi(+\infty) = 0$  (см. предыдущий параграф). Однако ввиду малости колебаний этим отличием можно пренебречь. Действительно, как мы знаем из §8.5, волновая функция осциллятора очень быстро (экспоненциально) убывает при удалении от точки равновесия, поэтому если характерная амплитуда колебаний (т.е. дисперсия координаты) много меньше равновесного расстояния между атомами, то величина  $\chi(-r_0)$  практически равна нулю. Выберем единицы, в которых  $\hbar = m = \varkappa = 1$ . Тогда уравнение (9.42) переходит в

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \chi}{d\xi^2} + \frac{\xi^2}{2} \chi = E' \chi. \quad (9.43)$$

Ограниченные решения уравнения этого уравнения имеют вид

$$\chi_v(\xi) = p_v(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad E'_v = v + \frac{1}{2}, \quad v = 0, 1, \dots,$$

где  $p_v(\xi)$  – полиномы, определяемые уравнениями (8.47), (8.48). Наконец, учитывая определение  $R(r) = \chi(r)/r \approx \chi(r)/r_0$ , находим собственные функции и собственные значения гамильтониана молекулы:

$$\psi_{vlm}(r, \theta, \phi) = a_v p_v(r - r_0) e^{-(r-r_0)^2/2} Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (9.44)$$

$$E_{vl} = U_0 + \left(v + \frac{1}{2}\right) + B_0 l(l+1), \quad B_0 \equiv \frac{1}{2r_0^2}, \quad (9.45)$$

где  $a_v$  – нормировочные постоянные, вычисляемые по формулам, полученным в §8.5.

Исследуем спектр молекулы более детально. В обычных единицах он имеет вид

$$E_{vl} = U_0 + \hbar \sqrt{\frac{\varkappa}{m}} \left(v + \frac{1}{2}\right) + B_0 l(l+1), \quad B_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}. \quad (9.46)$$

Поскольку потенциальная энергия ядер  $U(r)$  определяется их кулоновским взаимодействием и взаимодействием электронных оболочек атомов, она не зависит от масс ядер. С другой стороны, второй и третий члены в  $E_{vl}$  обратно пропорциональны приведенной массе ядер, и поэтому можно ожидать, что эти члены будут малы по сравнению с первым. Оказывается, что это действительно так. Например, для молекулы  $H_2$  безразмерное отношение  $\hbar \sqrt{\varkappa/m}/U_0 \approx 0,1$ , а отношение  $B_0/|U_0| \approx 10^{-3}$ . Для более тяжелой молекулы  $O_2$  отношение  $\hbar \sqrt{\varkappa/m}/U_0$  уже около 0,04, а  $B_0/|U_0| \approx 4 \cdot 10^{-5}$ . Это означает, что при не слишком больших<sup>1</sup> значениях квантовых чисел  $v, l$  колебания и вращение молекулы вносят сравнительно малые поправки к уровням энергии электронной системы молекулы.

<sup>1</sup> В газах ненулевые значения чисел  $v, l$  возникают из-за столкновений молекул друг с другом, причем распределение молекул по этим числам определяется условиями статистического равновесия. Поскольку  $\hbar \sqrt{\varkappa/m} \gg B_0$ , то для переходов с увеличением числа  $v$  требуется значительно большая энергия,

Поэтому имеет смысл представить выражение  $E_{nl}$  в виде ряда, каждый член которого убывает с ростом массы  $m$  по степенному закону. Сделаем это с точностью до членов  $\sim 1/m^2$ . Конечно, поскольку  $m$  является размерной величиной, то непосредственно разлагать по степеням  $m$  нельзя, т.к. величина  $m$  зависит от выбора единиц для ее измерения (например, выше были использованы единицы, в которых  $m = 1$ ). Для того чтобы корректно построить такое разложение, нам надо будет еще найти малый безразмерный параметр, зависящий от  $m$ .

Заметим, что хотя функция  $U(r)$  не зависит от  $m$ , но величины  $U_0, k_0$  все же зависят неявно от массы, поскольку точка равновесия  $r_0$ , в которой они вычисляются, определяется уравнением (9.41), содержащим  $m$ . Положение равновесия оказывается зависящим от массы из-за наличия центробежной энергии, связанной с вращением молекулы. Поэтому в качестве характерных параметров вместо величин  $U_0, k_0, r_0$  следует использовать их значения при  $l = 0$ :

$$U_e = U(r_e), \quad k_e = \frac{d^2U}{dr^2}(r_e),$$

где точка  $r_e$  находится из уравнения

$$\frac{dU}{dr}(r_e) = 0.$$

В отличие от  $U_0, k_0, r_0$ , величины  $U_e, k_e, r_e$  в силу своего определения уже не зависят ни от  $m$ , ни от числа  $l$ . Аналогично, значение коэффициента  $B_0$  при  $l = 0$  обозначим через  $B_e$ :

$$B_e = \frac{\hbar^2}{2mr_e^2}.$$

Отношение этого коэффициента ко второму члену в  $E_{nl}$  мало:

$$\varepsilon = \frac{B_e}{\hbar\sqrt{k_e/m}} = \frac{\hbar}{\sqrt{k_e m} r_e^2} \ll 1.$$

В приведенных выше примерах  $\varepsilon$  не превосходит  $10^{-2}$ . Эта величина и будет использована ниже в качестве малого параметра, по которому производится разложение энергии молекулы.

Найдем, во-первых, величину  $\Delta r = r_0 - r_e$  сдвига положения равновесия, вызванного вращением молекулы, с точностью до членов порядка  $\varepsilon^2$ . Для этого переписываем уравнение (9.41) в виде

$$\frac{dU}{dr}(r_e + \Delta r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr_e^3(1 + \Delta r/r_e)^3}$$

и, разлагая по  $\Delta r/r_e$ , имеем

$$\frac{dU}{dr}(r_e) + k_e \Delta r = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr_e^3}. \quad (9.47)$$

---

чем для переходов с увеличением  $l$ . При комнатной температуре подавляющее большинство молекул обычно находится в состоянии  $v = 0$ , а значения  $l$  варьируются от нескольких единиц для легких молекул до нескольких десятков для тяжелых (поскольку  $B_0 \sim 1/m$ , вращение более тяжелых молекул возбуждается легче). Например, для молекулы CO наиболее вероятное значение  $l = 7$ , а для молекулы CsI  $l = 65$ .

В правой части достаточно оставить первый член, поскольку он уже является малой величиной второго порядка по  $\varepsilon$ . Действительно, учитывая, что  $dU/dr(r_e) = 0$ , находим из (9.47)

$$\Delta r = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{k_e m r_e^3} = r_e l(l+1) \varepsilon^2.$$

Разложим теперь  $E_{nl}$  по степеням  $\Delta r$ . Имеем

$$U_0 = U(r_e + \Delta r) = U(r_e) + \frac{dU}{dr}(r_e) \Delta r + \frac{1}{2} \frac{d^2 U}{dr^2}(r_e) (\Delta r)^2 = U_e + \frac{k_e}{2} [r_e l(l+1) \varepsilon^2]^2.$$

Далее,

$$B_0 = B(r_0) = \frac{\hbar^2}{2m r_e^2 (1 + \Delta r/r_e)^2} = \frac{\hbar^2}{2m r_e^2} - \frac{\hbar^2}{m r_e^3} \Delta r = B_e - \varepsilon^2 k_e r_e [r_e l(l+1) \varepsilon^2].$$

Итак, первый и третий члены в  $E_{nl}$  в сумме дают

$$U_0 + B_0 l(l+1) = U_e + B_e l(l+1) - \frac{\varepsilon^4}{2} k_e r_e^2 [l(l+1)]^2.$$

Остается разложить  $\sqrt{\varkappa}$  во втором члене. Зависимость “коэффициента жесткости”  $\varkappa$  от  $l$  описывает взаимодействие колебаний молекулы с ее вращением. Поскольку этот член уже содержит  $\sqrt{m}$  в знаменателе,  $\varkappa$  достаточно найти с точностью  $\varepsilon^3$ :

$$\begin{aligned} \varkappa &= \frac{d^2 U}{dr^2}(r_e + \Delta r) + \frac{3\hbar^2 l(l+1)}{m r_e^4 (1 + \Delta r/r_e)^4} = \frac{d^2 U}{dr^2}(r_e) + \frac{d^3 U}{dr^3}(r_e) \Delta r + 3k_e l(l+1) \varepsilon^2 + O(\varepsilon^4) \\ &= k_e + a_e r_e l(l+1) \varepsilon^2 + 3k_e l(l+1) \varepsilon^2 + O(\varepsilon^4), \quad a_e \equiv \frac{d^3 U}{dr^3}(r_e). \end{aligned}$$

Отсюда находим

$$\sqrt{\varkappa} = \sqrt{k_e} \left[ 1 + \frac{\varepsilon^2}{2} l(l+1) (3 + a_e r_e / k_e) \right].$$

Складывая полученные выражения и подставляя  $\varepsilon = \hbar / (\sqrt{k_e m} r_e^2)$ , приходим, таким образом, к следующему разложению энергии молекулы по степеням  $m$

$$E_{vl} = U_e + \hbar \sqrt{\frac{k_e}{m}} \left( v + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m r_e^2} l(l+1) + \frac{\hbar^3 (3k_e + a_e r_e)}{2(k_e m)^{3/2} r_e^4} l(l+1) \left( v + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^4 l^2 (l+1)^2}{2k_e m^2 r_e^6}.$$

Если ввести частоту  $\omega_e = \sqrt{k_e/m}$ , то эту формулу можно переписать в следующем виде, принятом в теории двухатомных молекул

$$E_{vl} = U_e + \hbar \omega_e \left( v + \frac{1}{2} \right) + B_v l(l+1) - D_e l^2 (l+1)^2, \quad v, l = 0, 1, 2, \dots, \quad (9.48)$$

где

$$\begin{aligned} B_v &= B_e - \alpha_e \left( v + \frac{1}{2} \right), \quad \alpha_e = -\frac{6B_e^2}{\hbar \omega_e} \left( \frac{a_e \hbar}{6m \omega_e^2} \sqrt{\frac{2}{m B_e}} + 1 \right), \\ D_e &= \frac{4B_e^3}{\hbar^2 \omega_e^2}. \end{aligned} \quad (9.49)$$

При этом  $v$  называют *вибрационным квантовым числом*, а  $B_e$  – *вибрационной постоянной*. Поскольку первое слагаемое в этой формуле по величине значительно больше второго, а второе – значительно больше последних двух, то энергетический спектр молекулы имеет следующую характерную структуру. Каждый электронный терм молекулы (расстояние между термами по порядку величины равно  $U_e$ ) расщепляется на ряд колебательных подуровней, соответствующих различным значениям числа  $v$ , а каждый из них в свою очередь расщепляется на ряд вращательных подуровней, соответствующих различным  $l$ .

Формула (9.48) лежит в основе спектрального метода изучения двухатомных молекул. При прохождении электромагнитного излучения через вещество, например, через газ, в его спектре возникают так называемые линии поглощения – участки резкого падения интенсивности излучения. Эти линии появляются из-за того, что часть фотонов поглощается молекулами при их переходах между состояниями различной энергии. При этом спектр линий поглощения, т.е., значения соответствующих им частот  $\nu$ , можно найти, приравняв энергию поглощенного фотона  $h\nu$  разности энергий молекулы:

$$\nu = \frac{E'_{v'l'} - E_{vl}}{h}, \quad h = 2\pi\hbar.$$

Здесь величины со штрихом и без относятся к конечному и начальному состояниям молекулы. Штрих у самого символа  $E$  напоминает, что значения коэффициентов в формуле (9.48) зависят от электронного терма молекулы. *Вращательный спектр поглощения* получается при переходах между состояниями, принадлежащими одному и тому же терму без изменения вибрационного числа. При этом наиболее интенсивное поглощение происходит при переходах между соседними вращательными уровнями. Полагая  $v' = v$ ,  $l' = l + 1$  в (9.48), находим выражение для частот этих переходов

$$\nu(l \rightarrow l + 1) = \frac{1}{h} \{2B_v(l + 1) - 4D_e(l + 1)^3\}. \quad (9.50)$$

Аналогично можно получить выражение для частот *колебательно-вращательного спектра*, т.е. линий поглощения или излучения, соответствующих переходам между состояниями с различными  $v$  и различными  $l$ . Измеряя эти частоты, можно определить постоянные  $\omega_e, B_e, \alpha_e, D_e$ , а вместе с ними и основные параметры, определяющие потенциалы взаимодействия ядер. Приведем для примера значения этих постоянных для некоторых молекул. В молекулярной спектроскопии принято относить частоту  $\omega_e$  к  $c = 2,998 \cdot 10^{10}$  см/с – значению скорости света в вакууме, а постоянные  $B_e, \alpha_e, D_e$  – к величине  $hc = 1,987 \cdot 10^{-16}$  г·см<sup>3</sup>/с<sup>2</sup>. Тогда все эти параметры выражаются в обратных сантиметрах:

	$\omega_e/c, \text{ см}^{-1}$	$B_e/hc, \text{ см}^{-1}$	$\alpha_e/hc, \text{ см}^{-1}$	$D_e/hc \times 10^6, \text{ см}^{-1}$
H <sub>2</sub>	4400	60,86	3,07	46600
HCl	2991	10,59	0,307	532
O <sub>2</sub>	1580	1,445	0,016	5,0
Xe <sub>2</sub>	21,1	0,0134	0,0003	0,02

На Рис. 19 приведена запись спектра поглощения паров HCl в инфракрасной области. Поскольку  $B_e/D_e \approx 5 \cdot 10^{-5}$ , то отношение второго члена к первому в (9.50) мало при всех значениях  $l$ , при которых поглощение заметно. Поэтому положение линий определяется в

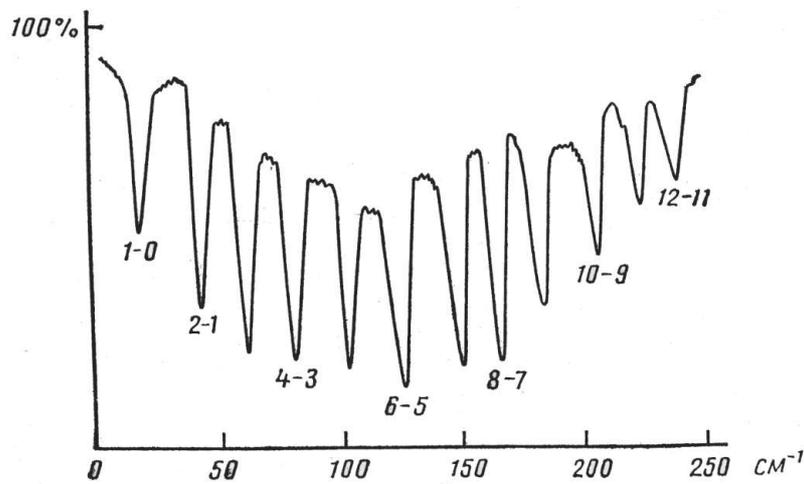


Рис. 19: Вращательный спектр поглощения паров HCl. По оси абсцисс указан волновой вектор фотонов  $k = 1/\lambda$  ( $\lambda$  – длина волны фотона), по оси ординат – относительная интенсивность прошедшего через газ излучения. Цифры у пиков указывают значения  $l$  вращательных состояний молекулы HCl, между которыми происходит переход с поглощением фотона.

основном первым членом в формуле (9.50). В частности, линии располагаются примерно эквидистантно с шагом  $\Delta(\nu/c) = 2B_v/hc \approx 2B_e/hc \approx 21 \text{ см}^{-1}$ . Максимум поглощения приходится на переход  $l = 5 \rightarrow l = 6$ , т.е.  $l = 5$  есть наиболее вероятное значение момента молекул HCl при данной температуре.

#### Модель жесткого ротатора.

Как мы видели выше, поправки к вращательным уровням молекулы, описываемые членами, пропорциональными постоянным  $\alpha_e, D_e$ , относительно очень малы. В связи с этим при изучении вращения молекулы ее с хорошей точностью можно рассматривать как *жесткий ротатор*. Формально приближение жесткого ротатора соответствует пределу  $k_e \rightarrow \infty$  (или, эквивалентно,  $\omega_e \rightarrow \infty$ ). Из формул (9.48), (9.49) видно, что в этом пределе  $\alpha_e, D_e \rightarrow 0$ , а расстояние между колебательными уровнями неограниченно растет. Это означает, что молекула все время находится в состоянии с  $v = 0$ , т.к. для возбуждения колебаний требуется затратить большую энергию. Более того, из формулы (8.60) следует, что при этом дисперсия радиальной координаты стремится к нулю. Другими словами, при движении молекулы ядра атомов остаются на фиксированном расстоянии  $r_e$  друг от друга, как если бы они были связаны жестким невесомым стержнем.

Договоримся отсчитывать энергию молекулы от ее значения при  $l = 0$ . Тогда формула (9.48) дает следующее простое выражение для ее вращательного спектра в приближении жесткого ротатора

$$E_l = B_e l(l+1), \quad B_e = \frac{\hbar^2}{2mr_e^2}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (9.51)$$

Волновыми функциями жесткого ротатора можно считать функции  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ . Действительно, при фиксированном расстоянии между ядрами их положение определяется углами  $\theta, \phi$ . Поэтому этими же углами определяются и все “вращательные” свойства молекулы. В частности, операторы величин, характеризующих эти свойства должны действовать

именно на угловую зависимость волновых функций, но не радиальную. Для среднего значения такой величины, например, в состоянии (9.44) [ $c v = 0$ ] мы имеем, учитывая условие (9.39),

$$\bar{f} = \int d\tau \psi_{0lm}^* \hat{f} \psi_{0lm} = \int dr |\chi_0(r)|^2 \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) \hat{f} Y_{lm}(\theta, \phi) = \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) \hat{f} Y_{lm}(\theta, \phi),$$

откуда и следует, что роль волновой функции ротатора играет  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ , а роль скалярного произведения двух функций  $\psi_1(\theta, \phi), \psi_2(\theta, \phi)$  – число

$$(\psi_1, \psi_2) = \int d\Omega \psi_1^* \psi_2.$$

Напомним, что ранее мы уже договорились считать функции  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  нормированными в смысле этого скалярного произведения [см. формулу (9.37)].

Заметим, наконец, что функции  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  и числа (9.51) являются соответственно собственными функциями и собственными значениями оператора

$$\hat{H} = B_e \hat{L}^2, \quad (9.52)$$

который естественно поэтому назвать *гамильтонианом жесткого ротатора*.

### §9.7. Кулоново поле

Рассмотрим движение частицы в кулоновом поле

$$U(r) = \frac{\alpha}{r}.$$

Уравнение (9.35) для радиальной части собственных функций гамильтониана в этом случае имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + U_{\text{eff}}^{(l)}(r) \chi = E \chi, \quad U_{\text{eff}}^{(l)}(r) = \frac{\alpha}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}. \quad (9.53)$$

Графики эффективной потенциальной энергии для случаев отталкивания и притяжения приведены на Рис. 4. Мы видим, что в обоих случаях спектр гамильтониана относится к типу II, но в то время как при  $\alpha > 0$  имеется лишь непрерывный спектр собственных значений, простирающийся от  $E = 0$  до  $E = +\infty$ , в случае  $\alpha < 0$  возможны также и дискретные уровни с  $E < 0$ . Эта возможность представляет наибольший интерес и будет рассмотрена ниже.

Для сокращения формул выберем новые единицы измерения, в которых  $\hbar = m = |\alpha| = 1$ . Рассуждая так же, как и в §8.5, нетрудно проверить, что это действительно возможно, и что из трех величин  $\hbar, m, \alpha$  нельзя составить безразмерной комбинации, так что обратный переход к обычным единицам однозначен. Тогда, домножив уравнение (9.53) на  $2r^2$  и перегруппировав члены, получим

$$r^2 \frac{d^2 \chi}{dr^2} + [2Er^2 + 2r - l(l+1)] \chi = 0. \quad (9.54)$$

Поскольку коэффициенты здесь – полиномы по  $r$ , то, так же как и в §8.5, решения этого уравнения будем искать в виде ряда по целым степеням  $r$ . Для этого удобно переопределить независимую переменную согласно

$$\varrho = \frac{2r}{n}, \quad n \equiv \frac{1}{\sqrt{2|E|}},$$

и ввести новую неизвестную функцию  $p(\varrho)$  по формуле

$$\chi(r) = \varrho^{l+1} e^{-\varrho/2} p(\varrho). \quad (9.55)$$

Тогда с учетом того, что  $E < 0$ , уравнение (9.54) приводится к виду

$$\varrho p'' + [2(l+1) - \varrho] p' + [n - (l+1)] p = 0, \quad (9.56)$$

где штрих обозначает дифференцирование по  $\varrho$ . Подставляя сюда разложение

$$p(\varrho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \varrho^k,$$

где  $a_k$  – неизвестные вещественные коэффициенты, получаем

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \{ [k(k-1) + 2(l+1)k] \varrho^{k-1} + [n - k - (l+1)] \varrho^k \} = 0.$$

Сдвигая в первом члене  $k \rightarrow k+1$ , и приравнивая нулю коэффициенты при различных степенях  $\varrho$ , получаем следующее рекуррентное соотношение для  $a_k$ :

$$[k + 2(l+1)](k+1)a_{k+1} + [n - k - (l+1)]a_k = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (9.57)$$

Опять-таки в полной аналогии с рассуждениями §8.5 нам надо исследовать поведение ряда для  $p(\varrho)$  при  $\varrho \rightarrow \infty$  и оставить лишь те решения, которые удовлетворяют условию ограниченности функции  $\chi(r)$ . Поскольку функция  $p(\varrho)$  умножается в (9.55) на  $\varrho^{l+1} e^{-\varrho/2}$ , то вид начального отрезка ряда при этом не существен, т.к.  $\varrho^k e^{-\varrho/2} \rightarrow 0$  при  $\varrho \rightarrow \infty$  для любого  $k$ . Предположим, что ни один из коэффициентов  $a_k$  не обращается в нуль. Тогда при больших  $k$  из соотношения (9.57) приближенно найдем

$$a_{k+1} = \frac{a_k}{k+1} = \frac{a_{k-1}}{(k+1)k} = \dots = \frac{a_0}{(k+1)!}.$$

Поэтому при больших  $\varrho$  функция  $p(\varrho)$  ведет себя так же, как ряд

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_0}{k!} \varrho^k = a_0 e^{\varrho}.$$

Мы видим, что в этом случае при  $\varrho \rightarrow \infty$  функция  $\chi(r)$  оказывается неограниченной:

$$\chi(r) = \varrho^{l+1} e^{-\varrho/2} p(\varrho) \rightarrow a_0 \varrho^{l+1} e^{+\varrho/2} \rightarrow \infty.$$

Итак, при некотором  $k$  коэффициент  $a_k$  должен обратиться в нуль. Если  $a_{n_r}$  – последний ненулевой коэффициент, т.е.  $a_{n_r} \neq 0$ ,  $a_{n_r+1} = 0$ , то из соотношения (9.57) следует, что должно быть  $n - n_r - (l + 1) = 0$ , или

$$n = n_r + l + 1.$$

Учитывая определение числа  $n$ , находим отсюда спектр энергии частицы при данном значении момента  $l$ :

$$E_{n_r, l} = -\frac{1}{2(n_r + l + 1)^2}, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (9.58)$$

Число  $n_r$  называется *радиальным квантовым числом*. По определению, оно нумерует дискретные уровни энергии при данном  $l$ , причем состоянию с наименьшей энергией соответствует  $n_r = 0$ . Число же  $n$  называется *главным квантовым числом*. Полученный результат можно сформулировать иначе, сказав, что при данном значении числа  $n \in N$  энергия частицы равна

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}, \quad (9.59)$$

а ее момент может принимать лишь значения  $l = 0, 1, \dots, n - 1$ . Замечательным следствием этой формулы является тот факт, что при данном значении главного квантового числа энергия не зависит от числа  $l$ . Таким образом, каждое дискретное собственное значение гамильтониана  $\hat{H}$  частицы в кулоновом поле вырождено не только по числу  $m$  – значению проекции момента на ось  $z$ , – но и по  $l$ . Подсчитаем степень этого вырождения. При заданном  $n$  число  $l$  пробегает  $n$  значений  $0, 1, \dots, n - 1$ , а для каждого  $l$  число  $m$  пробегает  $2l + 1$  значений  $-l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ , поэтому полное число собственных функций  $\hat{H}$  для данного  $n$  есть

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2 \frac{(n-1) + 0}{2} n + n = n^2.$$

С учетом определений  $R = \chi/r$ ,  $\varrho = 2r/n$  имеем следующее общее выражение для этих собственных функций

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) = B_{nl} r^l e^{-r/n} p_{nl} \left( \frac{2r}{n} \right) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (9.60)$$

Здесь за квантовые числа, нумерующие собственные функции, выбраны тройки  $\{n, l, m\}$ , а  $B_{nl}$  – нормировочные постоянные радиальных функций, которые мы условились определять в §9.5 из соотношения (9.39). Наконец, коэффициенты  $a_k$  в полиномах

$$p_{nl}(\varrho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} a_k \varrho^k$$

определяются рекуррентной формулой (9.57).

Найдем явный вид нескольких первых функций  $R_{nl}(r)$ . Нормальному состоянию соответствует  $n = 1$ . При этом должно быть  $l = 0$ . Полином  $p(\varrho)$  в это случае сводится

к постоянной, которую мы включаем в нормировочный множитель  $B_{10}$ . Итак, по общей формуле (9.60) получаем  $R_{10}(r) = B_{10}e^{-r}$ . Из условия нормировки

$$\int_0^{\infty} dr r^2 |R(r)|^2 = |B_{10}|^2 \int_0^{\infty} dr r^2 e^{-2r} = |B_{10}|^2 \frac{1}{4} = 1$$

видно, что можно положить  $B_{10} = 2$ . Таким образом,

$$R_{10}(r) = 2e^{-r}.$$

Далее, при  $n = 2$  число  $l$  может принимать значения 0, 1. Для  $l = 0$  полином  $p(\varrho)$  имеет вид  $p_{20}(\varrho) = a_0 + a_1\varrho$ . Полагая  $k = 0$  в уравнении (9.57), находим  $2a_1 + a_0 = 0$ , поэтому  $R_{20}(r) = B_{20}(1 - r/2)e^{-r/2}$ . При  $l = 1$  полином  $p(\varrho)$  снова есть просто константа, и поэтому по формуле (9.60) находим  $R_{21}(r) = B_{21}re^{-r/2}$ . Нормируя эти функции, получаем

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r/2}, \quad R_{21}(r) = \frac{r}{2\sqrt{6}} e^{-r/2}.$$

Перепишем, наконец, полученные формулы в обычных единицах. Для этого учтем, что  $[\alpha] = [U \cdot r] = \text{г}\cdot\text{см}^3/\text{с}^2$ ,  $[\hbar] = \text{г}\cdot\text{см}^2/\text{с}$ ,  $[m] = \text{г}$ , поэтому комбинацией этих трех параметров с размерностью энергии является  $m\alpha^2/\hbar^2$ , следовательно, формула (9.59) в обычных единицах принимает вид

$$E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}.$$

Далее, размерностью длины обладает комбинация  $\hbar^2/(m|\alpha|)$ , так что выражения для радиальных функций в обычных единицах получатся, если в написанных выше выражениях для  $R_{nl}(r)$  заменить  $r \rightarrow rm|\alpha|/\hbar^2$  и поделить их на  $(\hbar^2/m|\alpha|)^{3/2}$  (поскольку  $R_{nl}^2$  должны иметь размерность  $\text{см}^{-3}$ ). Например,

$$R_{10}(r) = \frac{2(m|\alpha|)^{3/2}}{\hbar^3} e^{-rm|\alpha|/\hbar^2}.$$

Форма и размеры областей “размазанности” электрона в низших состояниях (т.е. областей, в которых  $|\psi|^2$  заметно отлична от нуля) – *электронных орбиталей* – показаны на Рис. 20.

**Пример 45. Атом водорода.** Применим полученные результаты к атому водорода. Как мы знаем, задача определения движения двух тел с массами  $m_1$  и  $m_2$ , взаимодействующих по закону  $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$  сводится к задаче о движении одной частицы массы  $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  в поле  $U(r)$ . В данном случае  $U(r) = -e^2/r$ , где  $e$  – элементарный заряд, а приведенная масса  $m$  приближенно равна массе электрона, в силу малости последней по сравнению с массой протона. Поэтому спектр дискретных уровней энергии атома водорода дается выражением

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Подставляя сюда  $e = 4,803 \cdot 10^{-10} \text{ед.СГС}$ ,  $m = 9,11 \cdot 10^{-28} \text{г}$ ,  $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-27} \text{г}\cdot\text{см}^2/\text{с}$ , получаем численные значения для уровней энергии  $E_n = -1/(2n^2) \cdot 4,36 \cdot 10^{-11} \text{г}\cdot\text{см}^2/\text{с}^2$ .

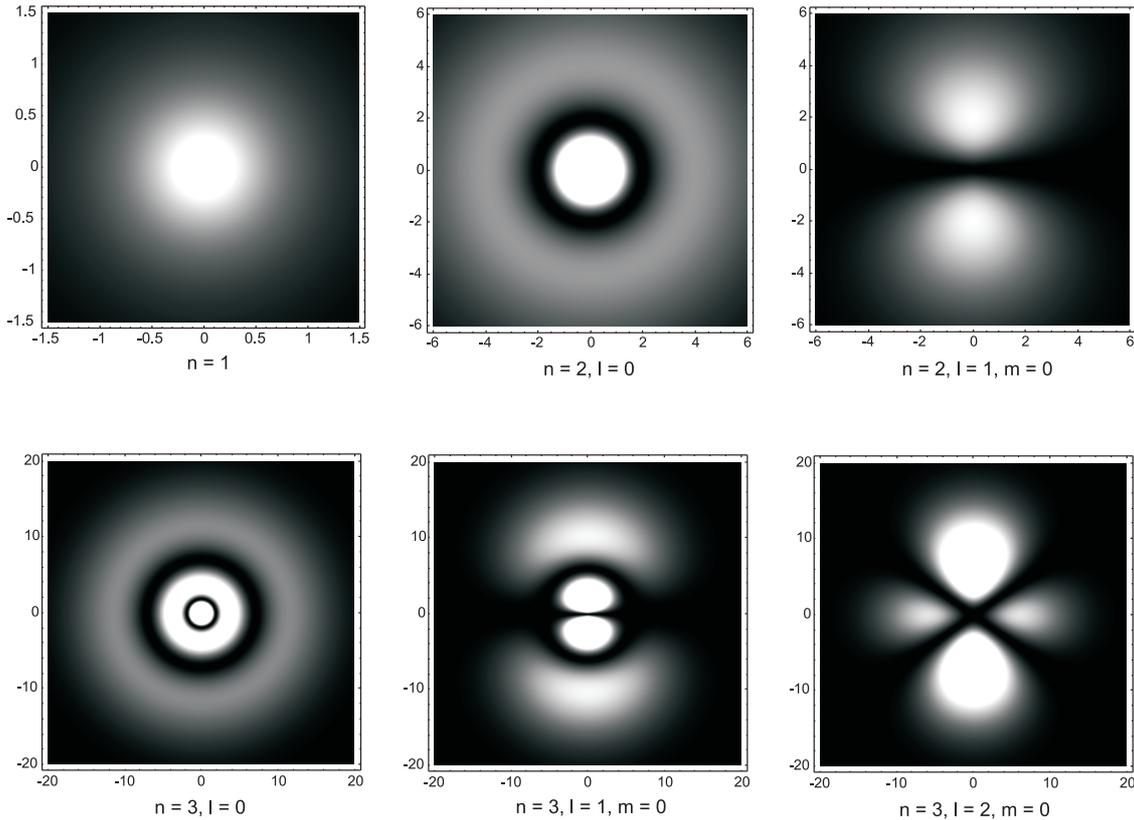


Рис. 20: Электронные орбитали нормального и первых двух возбужденных состояний в кулоновом поле притяжения. Вид в плоскости, проходящей через ось симметрии орбиталей (ось  $z$ ). Яркость областей пропорциональна  $|\psi|^2$ . Расстояния указаны в единицах  $\hbar^2/(m|\alpha|)$ .

Атомная же единица длины равна  $\hbar^2/(me^2) = 0,529 \cdot 10^{-8}$  см. (так называемый *боровский радиус*).

Рассмотрим подробно нормальное состояние. Его волновая функция есть

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r)Y_{00}(\theta, \phi) = 2e^{-r} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}.$$

Она сферически-симметрична. Отсюда в частности следует, что плотность распределения вероятностей координат электрона  $w(\mathbf{r}) = |\psi|^2$  зависит лишь от  $|\mathbf{r}| = r$ . При этом распределение вероятностей для самой координаты  $r$  дается квадратом модуля функции  $\chi(r) = rR(r)$  (см. вывод формулы (9.38))

$$w(r) = 4r^2e^{-2r}.$$

Эта функция имеет максимум при  $r = 1$ , т.е. при  $r = 0,529 \cdot 10^{-8}$  см в обычных единицах. Среднее расстояние электрона до ядра

$$\bar{r} = \int_0^{\infty} dr r w(r) = \int_0^{\infty} dr 4r^3 e^{-2r} = \frac{3}{2}.$$

Вычислим теперь распределение вероятностей импульса электрона. Согласно §7.4С плотность этого распределения дается квадратом модуля  $c_{\mathbf{p}}$  – коэффициента разложения волновой функции данного состояния по нормированным собственным функциям оператора

вектора импульса. Подставляя выражение для  $\psi_{100}$  в формулу (7.64), получим (в единицах  $\hbar = m = e = 1$ )

$$c_{\mathbf{p}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{+\infty} d^3\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r})} \frac{e^{-r}}{\sqrt{\pi}}.$$

Для того чтобы вычислить этот тройной интеграл, направим ось сферической системы координат по вектору  $\mathbf{p}$ . Тогда

$$c_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}(2\pi)^{3/2}} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{\infty} dr r^2 e^{-ipr \cos\theta - r},$$

где  $p \equiv |\mathbf{p}|$ . Интеграл по  $\phi$  дает  $2\pi$ , а в интеграле по  $\theta$  делаем замену  $u = \cos\theta$ :

$$c_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{2}\pi} \int_{-1}^{+1} du \int_0^{\infty} dr r^2 e^{-ipru - r} = \frac{\sqrt{2}}{\pi p} \int_0^{\infty} dr r e^{-r} \sin(pr) = -\frac{\sqrt{2}}{\pi p} \frac{\partial}{\partial p} \int_0^{\infty} dr e^{-r} \cos(pr).$$

Последний интеграл берется двойным интегрированием по частям:

$$\begin{aligned} I &\equiv \int_0^{\infty} dr e^{-r} \cos(pr) = \frac{1}{p} \int_0^{\infty} d \sin(pr) e^{-r} = \frac{1}{p} \sin(pr) e^{-r} \Big|_0^{\infty} + \frac{1}{p} \int_0^{\infty} dr e^{-r} \sin(pr) \\ &= -\frac{1}{p^2} \int_0^{\infty} d \cos(pr) e^{-r} = -\frac{1}{p^2} \cos(pr) e^{-r} \Big|_0^{\infty} - \frac{1}{p^2} \int_0^{\infty} dr e^{-r} \cos(pr) = \frac{1}{p^2} - \frac{I}{p^2}, \end{aligned}$$

откуда  $I = (1 + p^2)^{-1}$ , и поэтому

$$c_{\mathbf{p}} = -\frac{\sqrt{2}}{\pi p} \frac{\partial}{\partial p} \frac{1}{1 + p^2} = \frac{2\sqrt{2}}{\pi(1 + p^2)^2}.$$

Таким образом, плотность распределения вероятностей импульса электрона есть

$$w(\mathbf{p}) = |c_{\mathbf{p}}|^2 = \frac{8}{\pi^2(1 + p^2)^4}.$$

Комбинацией постоянных  $\hbar, m, e$  с размерностью импульса является  $me^2/\hbar$ . Учитывая также, что плотность вероятности трехмерного вектора импульса должна иметь размерность [импульс] $^{-3}$ , получаем выражение для  $w(\mathbf{p})$  в обычных единицах:

$$w(\mathbf{p}) = \left( \frac{\hbar}{me^2} \right)^3 \frac{8}{\pi^2 \{1 + (\hbar p/me^2)^2\}^4}.$$

## Глава 10. МАТРИЦЫ ОПЕРАТОРОВ

Понятие о волновой функции в ее современном виде и уравнение Шредингера были предложены в 1926 г. Однако несколько ранее этого квантовая механика была сформулирована в матричном виде – каждой физической величине сопоставлялся набор комплексных чисел, сгруппированных в квадратную матрицу, собственные значения которой определяли спектр данной физической величины, а изменения состояния системы описывались как преобразования этой матрицы. Обе формулировки полностью эквивалентны, но в разных задачах удобны по-разному. Матричная формулировка особенно удобна при работе с величинами с дискретным спектром, потому что она сводит задачи решения дифференциального уравнения Шредингера и вычисления средних значений к алгебраическим.

### §10.1. Определение и основные свойства

Пусть имеется полная ортонормированная система векторов  $\{\psi_n\}$ , например, система собственных функций некоторого эрмитова оператора  $\hat{f}$ . Пусть, далее,  $\hat{f}$  – некоторый линейный оператор (эрмитов или нет). Совокупность величин

$$f_{nm} = (\psi_n, \hat{f}\psi_m) \quad (10.1)$$

называется *матрицей оператора  $\hat{f}$  в базисе  $\{\psi_n\}$* . Договоримся, что первый индекс матрицы, как обычно, нумерует ее строки, а второй – столбцы. Матрица оператора естественно появляется при разложении вектора  $\hat{f}\psi_n$  по системе  $\{\psi_n\}$ :

$$\hat{f}\psi_n = \sum_m f_{mn}\psi_m. \quad (10.2)$$

Это равенство легко проверить, скалярно умножая обе его части на  $\psi_k$  и используя свойство 2 скалярного произведения и ортонормированность векторов  $\{\psi_n\}$

$$(\psi_k, \hat{f}\psi_n) = \left( \psi_k, \sum_m f_{mn}\psi_m \right) = \sum_m f_{mn}(\psi_k, \psi_m) = \sum_m f_{mn}\delta_{km} = f_{kn}.$$

Найдем выражение для матрицы  $(f'f)_{nm}$ , сопоставляемой произведению двух операторов  $\hat{f}, \hat{f}'$ . Используя формулы (10.1), (10.2), определение произведения операторов, их линейность, а также свойство 2 скалярного произведения, находим

$$\begin{aligned} (\hat{f}'\hat{f})_{nm} &= (\psi_n, (\hat{f}'\hat{f})\psi_m) = (\psi_n, \hat{f}'(\hat{f}\psi_m)) = \left( \psi_n, \hat{f}' \sum_k f_{km}\psi_k \right) = \sum_k f_{km} (\psi_n, \hat{f}'\psi_k) \\ &= \sum_k f_{km} \left( \psi_n, \sum_l f'_{lk}\psi_l \right) = \sum_k f_{km} \sum_l f'_{lk}(\psi_n, \psi_l) = \sum_k f_{km} \sum_l f'_{lk}\delta_{nl} = \sum_k f_{km}f'_{nk}, \end{aligned}$$

или

$$(\hat{f}'\hat{f})_{nm} = \sum_k f'_{nk}f_{km}, \quad (10.3)$$

т.е. матрица произведения операторов равна произведению их матриц, вычисляемому по обычному правилу умножения “строка на столбец.” Найдём теперь матрицу оператора, эрмитово-сопряжённого данному оператору  $\hat{f}$ . Используя определения (7.10), (10.1), а также свойство 1 скалярного произведения, находим

$$(f^+)_{nm} = (\psi_n, \hat{f}^+ \psi_m) = (\hat{f}^+ \psi_m, \psi_n)^* = (\psi_m, \hat{f} \psi_n)^* = (f_{mn})^*,$$

или

$$(f^+)_{nm} = (\widetilde{f_{nm}})^*, \quad (10.4)$$

где волна означает транспонирование матрицы, т.е. замену ее строк столбцами и наоборот. Итак, матрица оператора, эрмитово-сопряжённого данному оператору, получается комплексным сопряжением и транспонированием матрицы этого оператора. В частности, матрица эрмитова оператора  $\hat{f}$  удовлетворяет равенству

$$f_{nm} = (f_{mn})^*. \quad (10.5)$$

Наконец, если операторы  $\hat{f}, \hat{\phi}$  коммутируют, то, как мы знаем из §7.5А, у них имеется система совместных собственных функций. Если  $\{\psi_n\}$  – такая система, то  $f_{nm} = (\psi_n, \hat{f} \psi_m) = (\psi_n, f_m \psi_m) = f_m \delta_{nm}$ , или

$$f_{nm} = f_m \delta_{nm}, \quad (10.6)$$

т.е. матрица оператора  $\hat{f}$  является диагональной, причем на главной диагонали стоят собственные значения  $\hat{f}$ .

#### А. Переход в $\phi$ -представление

Матрицы операторов позволяют обобщить понятие оператора и волновой функции. Пусть, как и раньше,  $\{\psi_n\}$  – ортонормированная система собственных функций оператора  $\hat{\phi}$ , а  $\hat{f}$  – какой-либо оператор. Возьмем произвольный вектор состояния системы  $\psi$  и разложим его по  $\{\psi_n\}$ :

$$\psi = \sum_n c(n) \psi_n. \quad (10.7)$$

Коэффициенты разложения здесь обозначены через  $c(n)$  вместо прежнего  $c_n$  для удобства последующей их интерпретации. Тогда, используя равенство (10.2), действие оператора  $\hat{f}$  на  $\psi$  можно представить в виде

$$\hat{f} \psi = \hat{f} \sum_n c(n) \psi_n = \sum_n c(n) \hat{f} \psi_n = \sum_n \sum_m c(n) f_{mn} \psi_m,$$

или, меняя порядок суммирования по  $n$  и  $m$ ,

$$\hat{f} \psi = \sum_m (\hat{f}c)(m) \psi_m, \quad (\hat{f}c)(m) = \sum_n f_{mn} c(n). \quad (10.8)$$

Здесь введен новый символ  $(\hat{f}c)(m)$ , который обозначает набор чисел, вычисляемых по второй из формул (10.8), а именно, если представлять набор  $\{c(n)\}$  как столбец, то  $\{(\hat{f}c)(m)\}$  есть также столбец, получающийся умножением матрицы  $f_{mn}$  на  $c(n)$  по правилу “строка на столбец.” Первая из формул (10.8) показывает, что вместо того чтобы действовать оператором  $\hat{f}$  на функции  $\psi_n$ , вектор  $\hat{f}\psi$  можно найти, заменив коэффициенты  $c(n)$  в разложении (10.7) на  $(\hat{f}c)(n)$ . Этот факт и позволяет расширить понятия волновой функции и оператора. Действительно, поскольку любой вектор состояния  $\psi$  может быть представлен, и притом единственным способом, в виде (10.7), то вектор  $\psi$  однозначно определяет столбец  $\{c(n)\}$ , и наоборот. Аналогично, оператор  $\hat{f}$  однозначно определяет матрицу  $f_{nm}$ , а эта матрица, в свою очередь, однозначно определяет по формулам (10.8) действие оператора  $\hat{f}$  на произвольный вектор состояния  $\psi$ . Поэтому набор  $\{c(n)\}$  называют *вектором состояния системы (волновой функцией) в представлении оператора  $\hat{f}$* , или, короче, в  $\phi$ -представлении, а набор  $\{f_{nm}\}$  – *матрицей оператора  $\hat{f}$  в этом представлении*. При этом запись  $(\hat{f}c)(n)$  вполне соответствует нашему прежнему обозначению  $(\hat{f}\psi)(\{\mathbf{r}\})$  для действия операторов на функции координат: индекс  $n$ , нумерующий собственные значения оператора  $\hat{f}$ , играет роль аргумента нового вектора  $(\hat{f}c)$ . В то время как  $|\psi(\{\mathbf{r}\})|^2$  определяет распределение вероятностей для координат,  $|c(n)|^2$  определяет распределение вероятностей для величины  $\phi$ . Наконец, скалярное произведение векторов состояния  $\psi$  естественным образом определяет скалярное произведение векторов  $c(n)$  в  $\phi$ -представлении. Действительно, если  $\psi_1 = \sum_n c_1(n)\psi_n$ ,  $\psi_2 = \sum_n c_2(n)\psi_n$ , то, учитывая ортонормированность системы  $\{\psi_n\}$ , находим

$$(\psi_1, \psi_2) = \sum_n c_1^*(n)c_2(n).$$

Сумму в правой части мы обозначим  $(c_1, c_2)$  и назовем скалярным произведением векторов  $c_1 = \{c_1(n)\}$  и  $c_2 = \{c_2(n)\}$ :

$$(c_1, c_2) = \sum_n c_1^*(n)c_2(n). \quad (10.9)$$

При записи этого скалярного произведения столбец  $c_1$  удобно транспонировать, т.е. представлять его строкой – тогда скалярное произведение будет равно матричному произведению  $c_1^*$  и  $c_2$ , вычисляемому по обычному правилу “строка на столбец.”

Выписанные здесь формулы предполагают, что оператор  $\hat{f}$  имеет дискретный спектр, но они тривиально обобщаются на операторы с любым типом спектра, причем под  $\hat{f}$  можно подразумевать не один, а совокупность нескольких операторов. Например, если  $\hat{f} = \hat{\mathbf{p}}$ , то вместо (10.7) надо использовать разложение (7.63), а формула (10.9) переписется в виде

$$(c_1, c_2) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} d^3\mathbf{p} c_1^*(\mathbf{p})c_2(\mathbf{p}).$$

Наиболее важными представлениями являются импульсное ( $\phi = \mathbf{p}$ ), энергетическое ( $\phi = H$ ) и представление  $z$ -компоненты момента импульса ( $\phi = l_z$ ). Последнее особенно важно при рассмотрении спина частиц (см. 11).

**§10.2. Матрицы координаты и импульса гармонического осциллятора**

Вернемся к гармоническому осциллятору, рассмотренному в §8.5, и покажем, каким образом можно найти матрицы операторов координаты и импульса осциллятора в базе собственных векторов гамильтониана чисто алгебраически, не используя явного вида этих векторов. Для этого рассмотрим все возможные коммутаторы операторов  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$ ,  $\hat{H}$ , где гамильтониан осциллятора (см. пример 32)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

Согласно формуле (7.32) из примера 31

$$\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar. \quad (10.10)$$

С помощью этой формулы находим

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \frac{1}{2m}(\hat{p}^2 x - x \hat{p}^2) = \frac{1}{2m}(\hat{p}(x\hat{p} - i\hbar) - x\hat{p}^2) = \frac{1}{2m}((x\hat{p} - i\hbar)\hat{p} - i\hbar\hat{p} - x\hat{p}^2) = -\frac{i\hbar\hat{p}}{m},$$

$$[\hat{H}, \hat{p}] = \frac{m\omega^2}{2}(x^2\hat{p} - \hat{p}x^2) = \frac{m\omega^2}{2}(x(\hat{p}x + i\hbar) - \hat{p}x^2) = \frac{m\omega^2}{2}((\hat{p}x + i\hbar)x + xi\hbar - \hat{p}x^2) = im\hbar\omega^2 x.$$

Возьмем матричный элемент этих равенств между  $n$ -ым и  $k$ -ым состояниями с определенной энергией (т.е. собственными векторами гамильтониана осциллятора). Тогда, применяя правило умножения матриц (10.3) и предполагая, что собственные векторы гамильтониана нормированы, имеем из (10.10)

$$\sum_l (x_{nl}p_{lk} - p_{nl}x_{lk}) = i\hbar\delta_{nk}.$$

Далее, используя свойство 2 скалярного произведения и определение (10.1), найдем

$$(\psi_n, [\hat{H}, \hat{x}]\psi_k) = \left( \psi_n, -\frac{i\hbar\hat{p}}{m}\psi_k \right) = -\frac{i\hbar}{m}p_{nk},$$

$$(\psi_n, [\hat{H}, \hat{p}]\psi_k) = (\psi_n, im\hbar\omega^2 x\psi_k) = im\hbar\omega^2 x_{nk}.$$

Но, учитывая эрмитовость гамильтониана и то, что  $\psi_k, \psi_n$  — его собственные векторы, можем написать

$$(\psi_n, [\hat{H}, x]\psi_k) = (\psi_n, (\hat{H}x - x\hat{H})\psi_k) = (\hat{H}\psi_n, x\psi_k) - (\psi_n, x\hat{H}\psi_k) = (E_n - E_k)x_{nk}$$

и, аналогично,

$$(\psi_n, [\hat{H}, \hat{p}]\psi_k) = (E_n - E_k)p_{nk}.$$

Таким образом, мы получаем следующую систему уравнений для величин  $x_{nk}, p_{nk}$

$$\sum_l (x_{nl}p_{lk} - p_{nl}x_{lk}) = i\hbar\delta_{nk}, \quad \omega_{nk}x_{nk} = -\frac{i}{m}p_{nk}, \quad \omega_{nk}p_{nk} = im\omega^2 x_{nk},$$

где введена величина  $\omega_{nk} = (E_n - E_k)/\hbar$ , называемая *частотой перехода* из состояния  $\psi_k$  в состояние  $\psi_n$ . Из последних двух уравнений системы следует, что  $(\omega_{nk}^2 - \omega^2)x_{nk} = 0$ , т.е.

матричные элементы координаты (а, следовательно, и импульса) отличны от нуля лишь для переходов между состояниями, для которых  $\omega_{nk} = \pm\omega$ . Как мы знаем из §8.5, величина  $\hbar\omega$  есть как раз разность энергий соседних уровней осциллятора. Таким образом, для данного  $n$  величины  $x_{nl}, p_{nl}$  отличны от нуля лишь при  $l = n \pm 1$ . Поэтому первое уравнение системы при  $n = k$  сводится к

$$(x_{n,n-1}p_{n-1,n} + x_{n,n+1}p_{n+1,n}) - (p_{n,n-1}x_{n-1,n} + p_{n,n+1}x_{n+1,n}) = i\hbar. \quad (10.11)$$

Поскольку операторы  $\hat{x}, \hat{p}$  эрмитовы, их матрицы удовлетворяют соотношению (10.5). Более того, если мы договоримся выбирать собственные функции гамильтониана вещественными (это всегда возможно, см. замечание после (8.5)), то все матричные элементы  $x_{nk} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_n^* x \psi_k$  будут вещественными, т.к.  $x$  вещественна. Следовательно, ввиду равенства (10.5), матрица координаты будет симметрична,  $x_{nk} = x_{kn}$ , а матрица импульса антисимметрична,  $p_{nk} = -p_{kn}$ . Учитывая это и подставляя  $p_{n,n\pm 1} = im\omega_{n,\pm 1}x_{n,\pm 1} = \mp im\omega x_{n,n\pm 1}$  в соотношение (10.11), находим

$$(x_{n,n-1}(-im\omega x_{n-1,n}) + x_{n,n+1}im\omega x_{n+1,n}) - (im\omega x_{n,n-1}x_{n-1,n} - im\omega x_{n,n+1}x_{n+1,n}) = i\hbar,$$

или

$$(x_{n+1,n})^2 - (x_{n,n-1})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}. \quad (10.12)$$

Из этого соотношения следует, что величины  $(x_{n,n-1})^2$  образуют арифметическую прогрессию, причем  $x_{0,-1} \equiv 0$ , поскольку состояний с  $n < 0$  не существует. Таким образом,

$$(x_{n,n-1})^2 = \frac{n\hbar}{2m\omega}. \quad (10.13)$$

Выше мы договорились выбирать собственные функции гамильтониана вещественными. Это условие оставляет произвольными их знаки. Выберем теперь эти знаки так, чтобы  $x_{n,n-1}$  были положительны. Это легко сделать последовательно следующим образом. Возьмем функцию  $\psi_0(x)$  с любым знаком, и затем выберем знак  $\psi_1(x)$  так, чтобы  $x_{10} = (\psi_1, x\psi_0)$  был положителен. Затем выберем знак функции  $\psi_2(x)$  так, чтобы  $x_{21} = (\psi_2, x\psi_1)$  также был положителен, и т.д. Тогда окончательно получим матричные элементы координаты в виде

$$x_{n,n-1} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}. \quad (10.14)$$

Согласно постулату III оператор любой физической величины выражается через операторы координат и импульсов, поэтому, зная матрицы операторов этих двух операторов, можно найти матрицу любого оператора. В частности, можно заново получить выражение для уровней энергии. Замечая, что  $E_n = H_{nn}$ , имеем

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{(p^2)_{nn}}{2m} + \frac{m\omega^2(x^2)_{nn}}{2} \\ &= \frac{1}{2m}(p_{n,n-1}p_{n-1,n} + p_{n,n+1}p_{n+1,n}) + \frac{m\omega^2}{2}(x_{n,n-1}x_{n-1,n} + x_{n,n+1}x_{n+1,n}) \\ &= \frac{1}{2m}(|p_{n,n-1}|^2 + |p_{n,n+1}|^2) + \frac{m\omega^2}{2}((x_{n,n-1})^2 + (x_{n,n+1})^2) = m\omega^2((x_{n,n-1})^2 + (x_{n,n+1})^2) \\ &= m\omega^2 \left( \frac{n\hbar}{2m\omega} + \frac{(n+1)\hbar}{2m\omega} \right) = \hbar\omega(n + 1/2), \end{aligned}$$

т.е. формулу (8.58).

## Глава 11. СПИН

## §11.1. Оператор спина

Как показывает опыт, многие квантовые системы обладают определенной дискретной характеристикой, не имеющей аналога в классической механике и называемой *спином*. Более точно, отсутствие у спина классического аналога означает, что не существует такой функции  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  координат и импульсов частиц системы, с помощью которой можно было бы построить оператор этой величины в соответствии с постулатом III. Замечательным является однако тот факт, что основные свойства спина очень похожи на свойства момента импульса, чем и объясняется само название “спин” (от английского слова *spin* – вращение). Отсутствие классической функции  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ , по которой можно было бы построить оператор спина, означает, что спину не соответствует какое-либо реальное пространственное вращение (такое вращение как раз описывается моментом импульса). Строго говоря, свойства спина могут быть описаны последовательно лишь в рамках релятивистской квантовой теории – теории, обобщающей квантовую механику и основанной на принципе относительности Эйнштейна. Оставаясь же в рамках нерелятивистской квантовой механики, наличие спина и вид его оператора можно ввести как дополнительный постулат, чему и посвящен настоящий параграф.

Схожесть свойств спина и момента выражается математически в том, что спин является вектором, причем коммутационные соотношения для компонент оператора спина  $\hat{\mathbf{s}}$  имеют тот же вид (9.16), (9.17) что и для оператора момента (как и момент, спин удобно измерять в единицах  $\hbar$ , что и предполагается везде ниже)

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hat{s}_z, \quad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hat{s}_x, \quad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hat{s}_y. \quad (11.1)$$

Как было сказано выше,  $\hat{\mathbf{s}}$  не может быть выражен через  $\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}$ . Поэтому в выражении  $\hat{\mathbf{s}}\psi$  оператор спина действует не на обычные координаты  $\mathbf{r}$ , а на особые “спиновые” координаты волновой функции. Обозначая эти координаты через  $\sigma$ , мы будем поэтому писать теперь волновую функцию как  $\psi(\{\mathbf{r}\}, \sigma)$ , причем будем предполагать для простоты, что зависимость  $\psi$  от  $\sigma$  отделяется в виде множителя:

$$\psi(\{\mathbf{r}\}, \sigma) = \varphi(\{\mathbf{r}\})\chi(\sigma).$$

Когда такое разделение действительно имеет место, функцию  $\varphi(\{\mathbf{r}\})$  называют *координатной волновой функцией*, а  $\chi(\sigma)$  – *спиновой волновой функцией*. До сих пор мы изучали лишь первую, а теперь сосредоточимся на второй. Оказывается, что вид оператора спина можно установить непосредственно из коммутационных соотношений (11.1), используя понятие о  $\phi$ -представлении, введенное в §10.1А. Там было показано, что волновые функции можно представлять числовыми столбцами – коэффициентами разложения данного состояния по полной ортонормированной системе некоторого эрмитова оператора  $\hat{\phi}$ . В этом случае операторы представляются матрицами, вычисленными по этой системе. Выберем в качестве оператора  $\hat{\phi}$  оператор  $\hat{s}_z$  – оператор проекции вектора спина на некоторую ось в пространстве. Тогда, как мы знаем из §10.1А, аргументом волновой функции  $\chi(\sigma)$  будет являться индекс, нумерующий собственные значения оператора  $\hat{s}_z$ . В теории спина принято в качестве этого индекса использовать сами собственные значения. Таким образом, переменная  $\sigma$  будет пробегать собственные значения  $\hat{s}_z$ . Тогда формулы для  $\chi(\sigma)$  и матриц спина получаются заменой  $c(n) \rightarrow \chi(\sigma)$ ,  $f_{mn} \rightarrow s_{\sigma\sigma'}$  в формулах §10.1А.

Определим возможные значения спина. В §9.4В, используя одни лишь коммутационные соотношения для компонент момента импульса, было показано, что соседние собственные значения его проекции отличаются на единицу, а собственные значения квадрата момента имеют вид  $l(l+1)$ , где  $l$  есть максимальное значение проекции момента при заданном значении его квадрата. Поскольку компоненты спина удовлетворяют тем же коммутационным соотношениям, то это утверждение верно и для них. Таким образом, при заданном значении  $\hat{s}_z^2 = s(s+1)$ , где  $s$  – некоторое число,  $\sigma$  пробегает значения  $-s, -s+1, \dots, s-1, s$ . Однако теперь мы уже не можем утверждать, что эти значения являются целыми, т.к. целочисленность значений проекции момента импульса была получена из условия непрерывности ее собственной функции как функции угловой координаты, тогда как спин не имеет отношения к координатной зависимости волновой функции. Поэтому единственным условием на  $\sigma$  является то, что между  $\sigma = -s$  и  $\sigma = +s$  должно уложиться целое число. Отсюда следует, что число  $s$ , которое обычно и называют спином системы, должно быть либо целым, либо полуцелым. Далее, формула (9.21) также была получена исходя из одних лишь коммутационных соотношений для момента, и потому справедлива и для оператора  $\hat{s}$

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_- \hat{s}_+ + \hat{s}_z + \hat{s}_z^2, \quad (11.2)$$

где

$$\hat{s}_\pm = \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y \quad (11.3)$$

имеют прежний смысл повышающих/понижающих операторов.

Найдем, наконец, операторы компонент спина для системы, спин которой имеет заданное значение  $s$ , т.е.,

$$(\hat{s}^2 \chi)(\sigma) = s(s+1)\chi(\sigma). \quad (11.4)$$

Прежде всего, согласно формуле (10.6) матрица оператора  $\hat{s}_z$  в  $s_z$ -представлении является диагональной, с собственными значениями на главной диагонали:

$$(s_z)_{\sigma\sigma'} = \sigma\delta_{\sigma\sigma'}. \quad (11.5)$$

Далее, для того чтобы найти матрицы операторов проекций спина на оси  $x, y$ , вычислим матрицы операторов  $\hat{s}_\pm$ . Для этого усредним уравнение (11.2) по состоянию  $\chi_{\tilde{\sigma}}$ , в котором одновременно с квадратом спина имеет определенное значение  $\tilde{\sigma}$  и его компонента  $s_z$ :

$$(\hat{s}_z \chi_{\tilde{\sigma}})(\sigma) = \tilde{\sigma} \chi_{\tilde{\sigma}}(\sigma). \quad (11.6)$$

Имеем

$$s(s+1) = (\chi_{\tilde{\sigma}}, \hat{s}_- \hat{s}_+ \chi_{\tilde{\sigma}}) + \tilde{\sigma} + \tilde{\sigma}^2. \quad (11.7)$$

Вычислим стоящее здесь скалярное произведение. Во-первых, как и всякий оператор физической величины, оператор спина эрмитов,  $\hat{s}^+ = \hat{s}$ , и поэтому  $\hat{s}_-^+ = \hat{s}_+$ . Следовательно, мы можем написать

$$(\chi_{\tilde{\sigma}}, \hat{s}_- \hat{s}_+ \chi_{\tilde{\sigma}}) = (\hat{s}_+ \chi_{\tilde{\sigma}}, \hat{s}_+ \chi_{\tilde{\sigma}}) = \sum_{\sigma} |(\hat{s}_+ \chi_{\tilde{\sigma}})(\sigma)|^2, \quad (11.8)$$

где мы использовали формулу (10.9) для скалярного произведения векторов в  $s_z$ -представлении. Далее, по правилу действия операторов в  $s_z$ -представлении имеем [см. вторую формулу (10.8)]

$$(\hat{s}_+ \chi_{\tilde{\sigma}})(\sigma) = \sum_{\sigma'} (s_+)_{\sigma\sigma'} \chi_{\tilde{\sigma}}(\sigma'). \quad (11.9)$$

Заметим, что по определению волновой функции в  $s_z$ -представлении, величина  $|\chi(\sigma)|^2$  есть вероятность обнаружения значения  $\sigma$  при измерении  $s_z$ . По условию, в состоянии  $\chi_{\tilde{\sigma}}(\sigma)$  компонента  $s_z$  имеет определенное значение  $\tilde{\sigma}$ . Поэтому  $|\chi_{\tilde{\sigma}}(\sigma)|^2 = \delta_{\tilde{\sigma}\sigma}$ . Отсюда следует, что

$$\begin{cases} \chi_{\tilde{\sigma}}(\sigma) = e^{i\alpha}, & \sigma = \tilde{\sigma}, \\ \chi_{\tilde{\sigma}}(\sigma) = 0, & \sigma \neq \tilde{\sigma}, \end{cases} \quad (11.10)$$

где  $\alpha$  – некоторое действительное число. Поэтому равенство (11.9) сводится к

$$(\hat{s}_+ \chi_{\tilde{\sigma}})(\sigma) = (s_+)_{\sigma\tilde{\sigma}} e^{i\alpha}. \quad (11.11)$$

Кроме того, поскольку оператор  $\hat{s}_+$  увеличивает значение  $s_z$  на единицу, а собственные векторы эрмитова оператора, соответствующие различным собственным значениям, ортогональны, то элемент  $(s_+)_{\sigma\tilde{\sigma}} = (\chi_{\tilde{\sigma}}, \hat{s}_+ \chi_{\tilde{\sigma}})$  отличен от нуля лишь при  $\sigma = \tilde{\sigma} + 1$ . Учитывая это и подставляя (11.11) в правую часть (11.8), получаем

$$(\chi_{\tilde{\sigma}}, \hat{s}_- \hat{s}_+ \chi_{\tilde{\sigma}}) = |(s_+)_{\tilde{\sigma}+1, \tilde{\sigma}}|^2,$$

после чего из уравнения (11.7) находим следующее выражение для модулей матричных элементов оператора  $\hat{s}_+$

$$|(s_+)_{\tilde{\sigma}+1, \tilde{\sigma}}| = \sqrt{s(s+1) - \tilde{\sigma}(\tilde{\sigma}+1)}.$$

Фазы матричных элементов, как всегда, зависят от выбора фаз собственных функций, т.е. чисел  $\alpha$  в выражении (11.10). Договоримся выбирать  $\alpha$  так, чтобы все элементы  $(s_+)_{\tilde{\sigma}+1, \tilde{\sigma}}$  были вещественны и положительны. Это можно легко сделать с помощью той же самой процедуры, что была использована при переходе от формулы (10.13) к (10.14). Таким образом, опуская тильду над  $\sigma$ , получаем окончательно ненулевые матричные элементы повышающего оператора в виде

$$(s_+)_{\sigma+1, \sigma} = \sqrt{s(s+1) - \sigma(\sigma+1)}. \quad (11.12)$$

Матричные элементы понижающего оператора находим отсюда по формуле (10.4)

$$(s_-)_{\sigma, \sigma+1} = \sqrt{s(s+1) - \sigma(\sigma+1)}, \quad (11.13)$$

а матрицы операторов  $\hat{s}_x, \hat{s}_y$  находим затем по формулам

$$(s_x)_{\sigma\sigma'} = \frac{(s_+)_{\sigma\sigma'} + (s_-)_{\sigma\sigma'}}{2}, \quad (s_y)_{\sigma\sigma'} = \frac{(s_+)_{\sigma\sigma'} - (s_-)_{\sigma\sigma'}}{2i}, \quad (11.14)$$

следующих из определения (11.3).

## §11.2. Спин 1/2

Применим полученные формулы к важнейшему случаю  $s = 1/2$ . Этот спин имеют электрон, протон, нейтрон и многие другие частицы. В этом случае  $\sigma$  принимает два значения  $+1/2$  и  $-1/2$ . По формуле (11.12) находим

$$(s_+)_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - \left( -\frac{1}{2} \right) \left( -\frac{1}{2} + 1 \right)} = 1,$$

а остальные элементы равны нулю. Для того чтобы представить  $(s_+)_{\sigma\sigma'}$  в виде матрицы  $2 \times 2$ , договоримся нумеровать строки сверху вниз, а столбцы – слева направо в порядке убывания  $\sigma$  от  $\sigma = +s$  до  $\sigma = -s$ . Тогда

$$\hat{s}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Аналогично по формуле (11.13) находим

$$\hat{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (11.15)$$

Наконец, по формулам (11.14), (11.5) получаем

$$\hat{s}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}. \quad (11.16)$$

Это выражение для оператора спина электрона было получено немецким физиком В. Паули в 1927г.

**Пример 46.** Среднее значение и флуктуация проекции спина. Пусть спиновая волновая функция электрона  $\chi(\sigma)$  задана в виде

$$\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.17)$$

т.е. проекция спина на ось  $z$  имеет определенное значение  $1/2$ . Найдем среднее значение проекции спина на ось  $z'$ , составляющую угол  $\theta$  с осью  $z$ . Найдем сперва вид оператора проекции спина на данное направление в пространстве. Для этого заметим, что оператор  $\hat{s}_z$  проекции спина на ось  $z$  может быть переписан тождественно в виде  $\hat{s}_z = (\hat{\mathbf{s}}, \mathbf{n})$ , где  $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$  – орт оси  $z$ . Поскольку запись через скалярное произведение инвариантна, т.е. не зависит от выбора системы координат, то оператор проекции на ось  $z'$  имеет тот же вид  $\hat{s}_{z'} = (\hat{\mathbf{s}}, \mathbf{n}')$  где  $\mathbf{n}'$  – орт оси  $z'$ . Поскольку по условию угол между осями  $z$  и  $z'$  равен  $\theta$ , то в системе координат, в которой состояние электрона задано в виде (11.17), вектор  $\mathbf{n}' = (n'_x, n'_y, \cos \theta)$ . Итак, оператор проекции на ось  $z'$  есть

$$\hat{s}_{z'} = \hat{s}_x n'_x + \hat{s}_y n'_y + \hat{s}_z \cos \theta = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & n'_x - i n'_y \\ n'_x + i n'_y & -\cos \theta \end{pmatrix}.$$

Поэтому среднее значение проекции спина на ось  $z'$  равно

$$\begin{aligned}\overline{s_{z'}} &= (\chi, \hat{s}_{z'} \chi) = \sum_{\sigma} \chi^*(\sigma) \left[ \sum_{\sigma'} (s_{z'})_{\sigma\sigma'} \chi(\sigma') \right] \\ &= (1 \ 0) \left[ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & n'_x - in'_y \\ n'_x + in'_y & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} \cos \theta \\ n'_x + in'_y \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cos \theta.\end{aligned}$$

В частности, так же как и в случае обычного момента, средние значения проекций спина на оси  $x, y$  ( $\theta = \pi/2$ ) равны нулю. Найдем теперь флуктуацию  $s_{z'}$ . Имеем

$$D_{s_{z'}}^2 = \overline{s_{z'}^2} - (\overline{s_{z'}})^2.$$

Далее, по формуле (10.3) находим матрицу квадрата оператора  $\hat{s}_{z'}$ :

$$\begin{aligned}\hat{s}_{z'}^2 &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \cos \theta & n'_x - in'_y \\ n'_x + in'_y & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & n'_x - in'_y \\ n'_x + in'_y & -\cos \theta \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \cos^2 \theta + (n'_x)^2 + (n'_y)^2 & 0 \\ 0 & \cos^2 \theta + (n'_x)^2 + (n'_y)^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

поскольку  $\cos^2 \theta + (n'_x)^2 + (n'_y)^2 = \mathbf{n}'^2 = 1$ . Поэтому

$$\overline{s_{z'}^2} = (\chi, \hat{s}_{z'}^2 \chi) = (1 \ 0) \left[ \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{4} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{4}.$$

Итак,

$$D_{s_{z'}}^2 = \frac{1}{4} - \left( \frac{\cos \theta}{2} \right)^2,$$

или  $D_{s_{z'}} = \sin \theta / 2$ .

## §11.3. Бозоны и фермионы

Оказывается, что спин частиц не только описывает их дополнительные “внутренние степени свободы,” но и определяет симметрию волновых функций систем, состоящих из одинаковых частиц, по отношению к их перестановкам. Рассмотрим для простоты систему из двух электронов. Если поменять электроны местами, то в силу полной их тождественности состояние системы не должно измениться. Это значит, что волновая функция этого состояния может изменить лишь свою фазу. Для того чтобы выразить этот факт математически, обозначим совокупность координат каждого электрона и проекции его спина на ось  $z$  единым символом  $\xi$ :

$$\xi = \{\mathbf{r}, \sigma\},$$

и введем оператор  $\hat{P}$  перестановки двух электронов, определив его равенством

$$(\hat{P}\psi)(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_2, \xi_1),$$

где  $\xi_{1,2}$  обозначают  $\xi$ -координаты первого и второго электрона, а  $\psi(\xi_1, \xi_2)$  волновую функцию системы. Тогда, как было сказано, действие оператора перестановки на любой вектор  $\psi$  может изменить лишь его фазу:

$$(\hat{P}\psi)(\xi_1, \xi_2) = c\psi(\xi_1, \xi_2), \quad |c| = 1.$$

Поскольку порядок следования аргументов в обеих частях этого равенства одинаков, его можно записать более коротко как

$$\hat{P}\psi = c\psi. \quad (11.18)$$

С другой стороны, если дважды переставить электроны местами, то это вообще ничего не изменит, т.е. должно быть  $\hat{P}^2 = 1$ . Учитывая это тождество и действуя оператором перестановки на равенство (11.18), находим

$$\psi = c\hat{P}\psi = c^2\psi,$$

откуда  $c^2 = 1$ . Отсюда следует, что  $c = \pm 1$ . *Теорема Паули* утверждает, что  $c = (-1)^{2s}$ , где  $s$  есть спин частицы. Эта теорема также может быть доказана лишь методами релятивистской квантовой теории. Таким образом, волновая функция системы не меняется при перестановке любых двух одинаковых частиц с целым спином, и меняет знак при перестановке любых двух частиц с полуцелым спином. Этот результат имеет далеко идущие следствия в отношении свойств систем, состоящих из одинаковых частиц. Эти свойства, или, как говорят, *статистика*, оказываются совершенно различными для частиц с целым и полуцелым спином. Статистика систем из одинаковых частиц с целым спином называется *статистикой Бозе-Эйнштейна*, а систем из одинаковых частиц с полуцелым спином – *статистикой Ферми-Дирака*. Соответственно, частицы с целым спином называют *бозонами*, а с полуцелым – *фермионами*.

Важнейшим следствием теоремы Паули является так называемый *принцип Паули*, который утверждает, что два фермиона не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии. Докажем это для простейшего случая системы, состоящей из двух невзаимодействующих электронов. В этом случае волновая функция системы строится из произведений функций, описывающих каждый электрон. Обозначим векторы состояния, в

которых может находиться каждый из электронов, через  $\psi_n$ . Тогда волновые функции системы, меняющие знак при перемещении местами электронов, должны иметь вид

$$\psi_{nm}(\xi_1, \xi_2) = \psi_n(\xi_1)\psi_m(\xi_2) - \psi_n(\xi_2)\psi_m(\xi_1).$$

Непосредственно видно, что  $\psi_{nn}(\xi_1, \xi_2) \equiv 0$ , что и утверждает принцип Паули.

Из свойств симметрии волновой функции при перестановке частиц следует важный вывод о свойствах ее симметрии при перестановке одних лишь пространственных координат частиц. Как было указано выше, обычно взаимодействия частиц приводят к установлению определенного значения полного спина системы. При этом спиновые волновые функции сами по себе оказываются обладающими определенной симметрией. Чтобы проиллюстрировать это, рассмотрим опять случай двух электронов, предполагая их взаимодействие слабым настолько, чтобы можно было говорить о состояниях каждого из электронов в отдельности, так что волновая функция системы по-прежнему может быть записана через произведения волновых функций двух электронов. Тогда спиновые волновые функции системы, описывающие состояния с определенным значением полного спина, даются выражениями (11.23), (11.27) – (11.28). Очевидно, что при перестановке индексов 1 и 2 функции с  $s = 1$  не меняются, а функция (11.28), описывающая состояние с  $s = 0$ , меняет знак. Поскольку полная волновая функция должна быть антисимметричной при одновременной перестановке  $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$ ,  $\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$ , то отсюда следует, что в состояниях с  $s = 1$  координатная волновая функция системы антисимметрична при замене  $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$ ,

$$\varphi_{s=1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\varphi_{s=1}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1), \quad (11.19)$$

а в состоянии с  $s = 0$  симметрична

$$\varphi_{s=0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi_{s=0}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1).$$

Если выбор значения полного спина определяется электростатическим взаимодействием электронов, то на основании этих формул естественно ожидать, что состоянием с наименьшей энергией будет состояние с  $s = 1$ . Действительно, в силу равенства (11.19) волновая функция этого состояния обращается в нуль при  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ . Это означает, что вероятность нахождения электронов вблизи друг от друга мала, следовательно, мала также и энергия их электростатического отталкивания. Поэтому при прочих равных условиях энергия состояний с  $s = 1$  будет меньше энергии состояния с  $s = 0$ . Это рассуждение легко обобщается на случай любого числа электронов – наименьшей энергией будет обладать конфигурация с наибольшим значением полного спина. В применении к атомам этот результат составляет содержание *правила Хунда* заполнения электронных оболочек.

#### §11.4. Сложение спинов

Рассмотрим систему, состоящую из двух частиц со спином  $1/2$ , и поставим вопрос о спине такой системы, рассматриваемой как целое. Для этого надо изучить свойства оператора полного спина системы

$$\hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2,$$

где  $\hat{\mathbf{s}}_{1,2}$  есть операторы спина частиц. Заметим, прежде всего, что эти операторы коммутируют друг с другом. Действительно, спиновая волновая функция  $\chi = \chi(\sigma_1, \sigma_2)$  в

рассматриваемом случае является функцией двух переменных  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ , каждая из которых описывает свою частицу и пробегает значения  $\pm 1/2$ , а операторы (матрицы)  $\hat{\mathbf{s}}_1$  и  $\hat{\mathbf{s}}_2$  действуют, соответственно, на аргумент  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ :

$$(\hat{\mathbf{s}}_1\chi)(\sigma_1, \sigma_2) = \sum_{\sigma'_1} (\mathbf{s})_{\sigma_1\sigma'_1} \chi(\sigma'_1, \sigma_2), \quad (\hat{\mathbf{s}}_2\chi)(\sigma_1, \sigma_2) = \sum_{\sigma'_2} (\mathbf{s})_{\sigma_2\sigma'_2} \chi(\sigma_1, \sigma'_2), \quad (11.20)$$

где матрицы  $(\mathbf{s})_{\sigma_1\sigma'_1}$ ,  $(\mathbf{s})_{\sigma_2\sigma'_2}$  имеют вид (11.16). Поскольку суммирование в формулах (11.20) идет по разным переменным, то порядок действия операторов  $\hat{\mathbf{s}}_1$ ,  $\hat{\mathbf{s}}_2$  не важен: используя формулы (11.20), находим по определению произведения операторов

$$\begin{aligned} (\{\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2\}\chi)(\sigma_1, \sigma_2) &= (\hat{\mathbf{s}}_1(\hat{\mathbf{s}}_2\chi))(\sigma_1, \sigma_2) = \sum_{\sigma'_1} (\mathbf{s})_{\sigma_1\sigma'_1} (\hat{\mathbf{s}}_2\chi)(\sigma'_1, \sigma_2) \\ &= \sum_{\sigma'_1} (\mathbf{s})_{\sigma_1\sigma'_1} \sum_{\sigma'_2} (\mathbf{s})_{\sigma_2\sigma'_2} \chi(\sigma'_1, \sigma'_2) = \sum_{\sigma'_2} (\mathbf{s})_{\sigma_2\sigma'_2} \sum_{\sigma'_1} (\mathbf{s})_{\sigma_1\sigma'_1} \chi(\sigma'_1, \sigma'_2) \\ &= \sum_{\sigma'_2} (\mathbf{s})_{\sigma_2\sigma'_2} (\hat{\mathbf{s}}_1\chi)(\sigma_1, \sigma'_2) = (\hat{\mathbf{s}}_2(\hat{\mathbf{s}}_1\chi))(\sigma_1, \sigma_2) = (\{\hat{\mathbf{s}}_2\hat{\mathbf{s}}_1\}\chi)(\sigma_1, \sigma_2), \end{aligned} \quad (11.21)$$

где фигурные скобки указывают, что под произведением векторов  $\hat{\mathbf{s}}_1$ ,  $\hat{\mathbf{s}}_2$  понимается простое произведение каких-либо их компонент. Таким образом,

$$\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2 - \hat{\mathbf{s}}_2\hat{\mathbf{s}}_1 = 0.$$

Отсюда следует, что компоненты полного спина удовлетворяют тем же коммутационным соотношениям, что и операторы  $\hat{\mathbf{s}}_{1,2}$ . Имеем, например,

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = [\hat{s}_{x1} + \hat{s}_{x2}, \hat{s}_{y1} + \hat{s}_{y2}] = [\hat{s}_{x1}, \hat{s}_{y1}] + [\hat{s}_{x2}, \hat{s}_{y2}] = i\hat{s}_{z1} + i\hat{s}_{z2} = i\hat{s}_z.$$

Отсюда следует, в частности, что квадрат полного спина коммутирует с проекцией полного спина на ось  $z$  (см. §9.4А). Далее, оба эти оператора коммутируют с квадратами спинов  $\hat{\mathbf{s}}_{1,2}$ . Действительно,

$$\hat{\mathbf{s}}^2 = (\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2)(\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2) = \hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2 + 2(\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2). \quad (11.22)$$

Поскольку  $\hat{\mathbf{s}}_1^2$  коммутирует со всеми компонентами  $\hat{\mathbf{s}}_1$ , а также по только что доказанному со всеми компонентами  $\hat{\mathbf{s}}_2$ , то  $[\hat{\mathbf{s}}^2, \hat{\mathbf{s}}_1^2] = 0$ . Аналогично доказывается, что  $[\hat{\mathbf{s}}^2, \hat{\mathbf{s}}_{1,2}^2] = 0$ . Однако  $\hat{\mathbf{s}}^2$  не коммутирует с компонентами  $\hat{\mathbf{s}}_{1,2}$  по отдельности: например, хотя  $\hat{s}_{z1}$  коммутирует с первыми двумя слагаемыми в правой части (11.22), но не коммутирует с последним, поскольку  $[\hat{s}_{z1}, \hat{s}_{x1}] \neq 0$ ,  $[\hat{s}_{z1}, \hat{s}_{y1}] \neq 0$ . Как мы знаем из §7.5А, коммутативность операторов  $\hat{\mathbf{s}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{s}}_1^2$ ,  $\hat{\mathbf{s}}_2^2$ ,  $\hat{s}_z$  означает, что они имеют полную систему совместных собственных функций. В состояниях, описываемых такими функциями, все четыре величины  $\mathbf{s}^2$ ,  $\mathbf{s}_1^2$ ,  $\mathbf{s}_2^2$ ,  $s_z$  имеют определенные значения, а в силу принципа неопределенности (§7.5В) значения величин  $s_{z1}$ ,  $s_{z2}$ , вообще говоря, не определены. Наоборот, операторы  $\hat{\mathbf{s}}_1^2$ ,  $\hat{\mathbf{s}}_2^2$ ,  $\hat{s}_{z1}$ ,  $\hat{s}_{z2}$  также все коммутируют друг с другом, и потому имеют полную систему совместных собственных функций. В соответствующих состояниях  $\mathbf{s}_1^2$ ,  $\mathbf{s}_2^2$ ,  $s_{z1}$ ,  $s_{z2}$  имеют определенные значения, а  $\mathbf{s}^2$  не определен. С физической точки зрения наиболее интересными являются состояния первого типа, поскольку взаимодействия между частицами обычно приводят к установлению определенной величины именно квадрата полного спина. Построим эти состояния.

Вообще говоря, для этого надо решить следующую систему уравнений на собственные функции и собственные значения

$$\hat{s}^2\chi = s(s+1)\chi, \quad \hat{s}_z\chi = \sigma\chi, \quad \hat{s}_1^2\chi = s_1(s_1+1)\chi, \quad \hat{s}_2^2\chi = s_2(s_2+1)\chi,$$

где неизвестными являются функции  $\chi = \chi(\sigma_1, \sigma_2)$  и числа  $s, \sigma$  (а числа  $s_1, s_2$  равны по условию  $1/2$ ). Однако проще и нагляднее найти эти состояния, используя известные нам свойства собственных функций и собственных значений. Определим сперва спектр оператора  $\hat{s}_z = \hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}$ . Спектр данного оператора является характеристикой этого оператора и не зависит от того, какие другие операторы выбираются в качестве набора коммутирующих с ним операторов. Поэтому собственные значения  $\hat{s}_z$  можно найти, рассматривая состояния  $\chi$ , в которых вместе с  $s_z$  имеют определенные значения и величины  $s_{1z}, s_{2z}$ . Действуя на такое состояние оператором  $\hat{s}_z = \hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}$ , получаем  $\sigma\chi = \sigma_1\chi + \sigma_2\chi$ , откуда

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2.$$

Поскольку каждая из проекций  $\sigma_{1,2}$  может принимать значения  $\pm 1/2$ , то из полученного равенства следует, что собственными значениями  $\hat{s}_z$  являются  $\sigma = +1, 0, -1$ . Далее, по определению числа  $s$  оно равняется наибольшему из возможных значений проекции на ось  $z$  при заданном значении квадрата спина. Мы еще не знаем, какие значения может принимать квадрат спина и какие из найденных значений  $\sigma$  им соответствуют, но поскольку среди трех значений  $\pm 1, 0$  максимальным является  $+1$ , то ясно, что одним из значений  $s$  является  $s = 1$ , и это значение является максимально возможным. При этом значении полного спина его проекция  $\sigma$  пробегает значения  $+1, 0, -1$ , т.е. все возможные собственные значения оператора  $\hat{s}_z$ . Это, однако, не означает, что  $s = 1$  является единственным возможным значением полного спина, поскольку состояние с  $s = 0$  также имеет  $\sigma = 0$ . Легко видеть, что состояние с  $s = 0$  действительно должно существовать. Это следует уже из простого подсчета общего числа собственных функций. С математической точки зрения, переход от собственных функций одного набора коммутирующих операторов к собственным функциям другого такого набора представляет собой смену базиса в пространстве состояний. Поскольку число векторов базиса должно при этом оставаться неизменным, то число состояний с определенной величиной квадрата полного спина в рассматриваемом случае должно равняться четырем. Действительно, при заданных значениях  $s_1 = s_2 = 1/2$  базис собственных функций набора  $\hat{s}_1^2, \hat{s}_2^2, \hat{s}_{z1}, \hat{s}_{z2}$  состоит из четырех функций вида  $\chi_{\tilde{\sigma}_1\tilde{\sigma}_2}(\sigma_1, \sigma_2) = \chi_{\tilde{\sigma}_1}(\sigma_1)\chi_{\tilde{\sigma}_2}(\sigma_2)$ , соответствующих четырем возможным комбинациям  $\tilde{\sigma}_1 = \tilde{\sigma}_2 = 1/2, \tilde{\sigma}_1 = -\tilde{\sigma}_2 = 1/2, \tilde{\sigma}_1 = -\tilde{\sigma}_2 = -1/2$  и  $\tilde{\sigma}_1 = \tilde{\sigma}_2 = -1/2$ . С другой стороны, состоянию с  $s = 1$  в новом базисе соответствуют лишь три собственных функции с  $\sigma = \pm 1, 0$ , поэтому недостающая четвертая функция должна соответствовать состоянию с  $s = 0$ . Этот результат можно интерпретировать наглядно, сказав, что состояния с  $s = 1$  и  $s = 0$  описывают конфигурации спинов, в которых векторы спинов соответственно параллельны и антипараллельны друг другу. Однако при этом ни сами эти векторы, ни их сумма не имеют определенного направления относительно осей  $x, y, z$ .

Найдем теперь явный вид собственных функций состояний с определенным полным спином. Наиболее прост случай  $s = 1, \sigma = 1$ . В этом случае не только  $s_z$  но и  $s_{1z}, s_{2z}$  должны иметь определенные значения, равные  $1/2$ . Действительно, поскольку  $1/2$  есть максимально возможное значение для каждого из  $s_{1z}, s_{2z}$ , то любая неопределенность в их значении привела бы к уменьшению их средних значений. Но тогда и сумма этих средних  $\overline{s_{1z}} + \overline{s_{2z}} = \overline{s_z}$  была бы меньше единицы, тогда как по условию она равна единице. Таким

образом, собственная функция состояния с  $s = 1, \sigma = 1$  имеет вид

$$\chi_{s=\sigma=1}(\sigma_1, \sigma_2) = \chi_{1/2}(\sigma_1)\chi_{1/2}(\sigma_2),$$

где  $\chi_{1/2}(\sigma)$  дается формулой (11.10) с  $\tilde{\sigma} = 1/2$ . Непосредственной подстановкой этого выражения в уравнение  $\hat{s}_z\chi = \sigma\chi$  нетрудно убедиться, что  $\sigma$  действительно равно 1. Как мы знаем, фазу  $\alpha$  в (11.10) можно выбрать произвольно для какого-либо одного состояния, и тогда фазы состояний с другими  $\tilde{\sigma}$  автоматически определяются из условия положительности матричных элементов повышающего оператора. Положим, например,  $\alpha = 0$  в состоянии с  $\tilde{\sigma} = 1/2$ , т.е. возьмем собственную функцию этого состояния для каждой из частиц в виде

$$\chi_{1/2}(\sigma) = \delta_{\frac{1}{2}, \sigma} = \begin{cases} 1, & \sigma = \frac{1}{2}, \\ 0, & \sigma = -\frac{1}{2}. \end{cases}$$

Тогда собственная функция полной системы с  $s = \sigma = 1$  примет вид

$$\chi_{s=\sigma=1}(\sigma_1, \sigma_2) = \delta_{\frac{1}{2}, \sigma_1} \delta_{\frac{1}{2}, \sigma_2}.$$

Это выражение удобно изобразить графически, используя введенное выше представление функций  $\chi_{\tilde{\sigma}}(\sigma)$  в виде столбцов

$$\chi_{s=\sigma=1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \quad (11.23)$$

где нижний индекс у скобок указывает на систему, к которой относится данный столбец. Состояния с  $s = 1$  и  $\sigma = 0$  можно построить, используя основное свойство понижающего оператора  $\hat{s}_-$ , а именно, что он переводит собственную функцию с данным  $\tilde{\sigma}$  в собственную функцию с  $\tilde{\sigma} - 1$ . С помощью формулы (11.15) оператор  $\hat{s} = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-}$  запишется в матричном виде как

$$\hat{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_1 + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_2, \quad (11.24)$$

где нижний индекс у матрицы указывает на какой столбец умножается данная матрица при составлении выражения  $\hat{s}_-\chi$ . Действуя этим оператором на вектор (11.23), находим вектор  $\chi_{s=1, \sigma=0}$ :

$$\begin{aligned} \chi_{s=1, \sigma=0} &= \hat{s}_-\chi_{s=\sigma=1} = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_1 + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \\ &= \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2. \end{aligned} \quad (11.25)$$

Нормируем этот вектор. Для этого вычислим его скалярный квадрат по формуле (10.9). В данном случае “координата”  $n$  состоит из двух индексов  $\sigma_1, \sigma_2$  и поэтому формула (10.9) имеет вид

$$(\chi_1, \chi_2) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \chi_1^*(\sigma_1, \sigma_2)\chi_2(\sigma_1, \sigma_2). \quad (11.26)$$

В соответствии с этой формулой выражение  $(\chi_{s=1,\sigma=0}, \chi_{s=1,\sigma=0})$  представится в виде четырех слагаемых, каждое из которых является произведением скалярных квадратов векторов состояния первой и второй частиц

$$\begin{aligned} & (\chi_{s=1,\sigma=0}, \chi_{s=1,\sigma=0}) \\ &= \left\{ (0 \ 1)_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \right\} \left\{ (1 \ 0)_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} + 2 \left\{ (0 \ 1)_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \right\} \left\{ (1 \ 0)_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \right\} \\ &+ \left\{ (1 \ 0)_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \right\} \left\{ (0 \ 1)_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \right\} = 1 \times 1 + 2 \times 0 \times 0 + 1 \times 1 = 2. \end{aligned}$$

Таким образом, нормированный собственный вектор с  $s = 1, \sigma = 0$  имеет вид

$$\chi_{s=1,\sigma=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \right\}. \quad (11.27)$$

Заметим, что нормировочный множитель этого вектора выбран положительным, так чтобы не изменить его фазу, которая уже фиксирована соглашением о выборе фаз матричных элементов повышающего оператора. Действуя на этот вектор оператором  $\hat{s}_-$  еще раз и нормируя результат, получим вектор состояния с  $s = 1, \sigma = -1$ :

$$\chi_{s=1,\sigma=-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2.$$

Нам осталось найти собственный вектор состояния с  $s = 0$ . Это легко сделать с помощью теоремы об ортогональности собственных функций эрмитова оператора, соответствующих различным собственным значениям (см. §7.4В). А именно, вектор  $\chi_{s=0}$  должен быть ортогонален всем трем найденным выше векторам с  $s = 1$ . Поскольку при  $s = 0$  также и  $\sigma = 0$ , то искомый вектор должен являться линейной комбинацией векторов

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2.$$

Легко видеть, что таким вектором является

$$\chi_{s=0,\sigma=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \right\}, \quad (11.28)$$

что нетрудно проверить, вычислив скалярное произведение этого вектора с вектором (11.27).

Проведенное рассуждение непосредственно обобщается на системы с любым спином и применимо также к сложению моментов или момента со спином. Если данная система состоит из двух подсистем со спинами  $s_1$  и  $s_2$ , то максимально возможное значение проекции на ось  $z$  вектора полного спина равно  $s_1 + s_2$ , и поэтому наибольшее значение полного спина есть  $s_{\max} = s_1 + s_2$ . Это соответствует случаю, когда оба спина параллельны друг другу. Минимальное же значение достигается в случае антипараллельных спинов:  $s_{\min} = |s_1 - s_2|$ . Поскольку число  $s$  по определению есть максимально возможное значение  $s_{1z} + s_{2z}$  при заданном значении квадрата вектора спина, то число  $s$  является целым, если

обе частицы имеют либо целый, либо полуцелый спин, и является полуцелым, если одна частица имеет целый спин, а другая полуцелый. Другими словами, для данной системы число  $2s$  имеет всегда одну и ту же четность, и поэтому все возможные значения  $s$  отличаются на целое число. Таким образом, при заданных  $s_1, s_2$  полный спин системы может принимать  $(2s + 1)$  значений

$$|s_1 - s_2|, |s_1 - s_2| + 1, \dots, s_1 + s_2 - 1, s_1 + s_2.$$

Поскольку при каждом данном  $s$  проекция  $s_z$  может принимать значения  $-s, -s+1, \dots, s-1, s$ , то полное число независимых состояний с определенным значением полного спина равно, по известной формуле для суммы арифметической прогрессии,

$$\begin{aligned} \sum_{s=|s_1-s_2|}^{s_1+s_2} (2s+1) &= \frac{\{2|s_1-s_2|+1\} + \{2(s_1+s_2)+1\}}{2} \{(s_1+s_2) - |s_1-s_2| + 1\} \\ &= (s_1+s_2+1)^2 - |s_1-s_2|^2 = 4s_1s_2 + 2s_1 + 2s_2 + 1 = (2s_1+1)(2s_2+1), \end{aligned} \quad (11.29)$$

т.е. то же число, что и в исходном базисе собственных векторов набора операторов  $\hat{s}_1^2, \hat{s}_2^2, \hat{s}_{z1}, \hat{s}_{z2}$ , в котором  $s_{1z}$  и  $s_{2z}$  по отдельности имеют определенные значения и могут принимать независимо  $(2s_1+1)$  и  $(2s_2+1)$  значений, соответственно.

**Пример 47.** Полные спин и момент электронов атома серебра. Найдем величину полного спина электронов атома серебра в нормальном состоянии. Состояние электрона в центральном поле характеризуется четырьмя квантовыми числами – главным ( $n$ ), орбитальным ( $l$ ), магнитным ( $m$ ) числами, определяющими вид координатной волновой функции, и числом  $\sigma$  – проекцией спина на ось  $z$ , определяющим спиновую волновую функцию электрона. При этом согласно принципу Паули в каждом состоянии с данными  $n, l, m, \sigma$  может находиться не более одного электрона. Поскольку энергия электрона зависит лишь от главного и орбитального квантовых чисел, то электроны в атоме удобно разбивать на группы (*оболочки*) с одинаковыми значениями  $n, l$ . В нормальном состоянии 47 электронов атома серебра заполняют все состояния с  $n = 1$  и  $l = 0$  (2 электрона),  $n = 2$  и  $l = 0, 1$  ( $2 + 6 = 8$  электронов),  $n = 3, 4$  и  $l = 0, 1, 2$  ( $2(2 + 6 + 10) = 36$  электронов), и одно состояние с  $n = 5, l = 0$ . Непосредственным следствием принципа Паули является тот факт, что полный спин  $S$  и полный момент импульса  $L$  каждой заполненной оболочки равны нулю. Действительно, поскольку по определению число электронов в заполненной оболочке равняется числу возможных состояний, то имеется всего лишь одна независимая волновая функция, описывающая состояние рассматриваемой совокупности электронов – перестановка электронов приводит лишь к изменению ее знака. Если хотя бы одно из чисел  $S, L$  не равнялось нулю, то имелось бы несколько волновых функций, соответствующих различным значениям проекции вектора  $\mathbf{S}$  или вектора  $\mathbf{L}$  на ось  $z$ . Но это невозможно, поскольку эти функции были бы линейно-независимы как собственные функции оператора  $\hat{S}_z$  или  $\hat{L}_z$  (см. §7.4А).

Равенство  $S = 0$  для заполненной оболочки можно доказать и непосредственно с помощью полученных выше формул. Именно, если в состоянии с данными  $n, l, m$  имеется ровно два электрона, то они имеют противоположные значениями  $\sigma$ . Поэтому их общая спиновая волновая функция должна быть линейной комбинацией вида

$$\chi = c_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 + c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2. \quad (11.30)$$

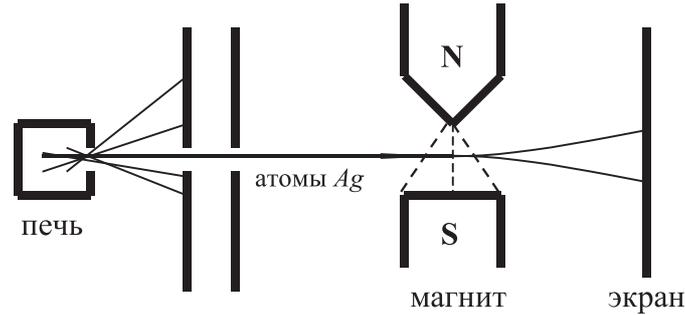


Рис. 21: Схема опыта Штерна-Герлаха.

Поскольку оба электрона имеют одинаковые значения  $n, l, m$ , то их координатные волновые функции совпадают, и поэтому координатная волновая функция системы двух электронов является симметричной относительно перестановки электронов. Следовательно, спиновая волновая функция (11.30) должна быть антисимметричной, т.е.  $c_1 = -c_2$ , а такая функция соответствует состоянию с нулевым суммарным спином [ср. формулы (11.28), (11.27)].

Таким образом, полные спин и момент импульса электронной компоненты атома серебра в нормальном состоянии совпадают со спином и моментом единственного электрона в незаполненной оболочке, т.е.,  $S = 1/2, L = 0$ .

### §11.5. Опыт Штерна-Герлаха. Уравнение Паули

Важный эксперимент, послуживший основанием для гипотезы о существовании у электрона собственного момента, был поставлен в 1922 г. немецкими физиками О. Штерном и В. Герлахом. В этом эксперименте пучок атомов серебра, полученных испарением при высокой температуре, пропускался в вакууме через неоднородное магнитное поле и затем осаждался на стеклянной пластине (см. Рис. 21). Было обнаружено, что при прохождении через магнитное поле пучок разделяется на два пучка равной интенсивности, причем разделение происходит в направлении неоднородности магнитного поля.

Для того чтобы объяснить этот результат, рассмотрим сперва эксперимент Штерна-Герлаха с классической точки зрения. Покажем, прежде всего, что несмотря на неоднородность магнитного поля, его влияние на движение атомов серебра можно описывать в приближении однородного поля. Основанием для этого является следующее соображение. В силу малости размеров атома движение электронов в нем можно рассматривать как происходящее в однородном магнитном поле, напряженность которого равна напряженности внешнего поля в точке нахождения атома. В силу же электронейтральности атома нарушение приближения однородного поля на больших масштабах должно быть несущественно. Для того чтобы строго обосновать это интуитивное рассуждение, векторный потенциал однородного поля удобно выбрать в следующей инвариантной форме (т.е. форме, независимой от частного выбора направления координатных осей):

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{H}, \mathbf{r}]. \quad (11.31)$$

Проверим, что оно приводит к заданному значению  $\mathbf{H}$  напряженности поля. Имеем, на-

пример, для  $x$ -компоненты

$$H_x = \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} = \frac{1}{2} \frac{\partial (H_{xy} - H_{yx})}{\partial y} - \frac{1}{2} \frac{\partial (H_{zx} - H_{xz})}{\partial z} = \frac{H_x}{2} - \frac{-H_x}{2} = H_x.$$

В силу произвольности направления оси  $x$  тот же результат получится и для осей  $y, z$ . Поэтому функция Лагранжа атома в магнитном поле имеет вид

$$L = \sum_i \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} + \sum_i \frac{q_i}{2c} (\dot{\mathbf{r}}_i, [\mathbf{H}, \mathbf{r}_i]) - U,$$

где суммирование ведется по всем частицам системы (электроны и ядро), а  $U$  обозначает полную электростатическую энергию взаимодействия частиц атома. Для того чтобы определить эффективное влияние электронного состояния на движение атома в магнитном поле, применим прием, аналогичный использованному в §4.2. Именно, учитывая тот факт, что электронные скорости значительно превосходят скорость ядра, усредним  $L$  по интервалу времени, большому по сравнению с периодом обращения электрона вокруг ядра, но малому по сравнению с характерным временем орбитального движения атома, т.е. его движения как целого в поле  $\mathbf{H}$ . При этом влиянием магнитного поля на само электронное состояние будем пренебрегать (это влияние будет рассмотрено в примере 48). Обозначая определенное таким образом усреднение угловыми скобками, имеем очевидные равенства

$$\langle \mathbf{r}_i \rangle = \mathbf{R}, \quad \langle \dot{\mathbf{r}}_i \rangle = \dot{\mathbf{R}}, \quad (11.32)$$

где  $\mathbf{R}$  обозначает центр инерции атома. Они выражают целостность атома, т.е. что частицы не разлетаются, а движутся вокруг центра инерции атома. Для того чтобы усреднить кинетическую энергию, пишем

$$\langle \dot{\mathbf{r}}_i^2 \rangle = \langle (\dot{\mathbf{r}}_i - \dot{\mathbf{R}})^2 + 2(\dot{\mathbf{r}}_i, \dot{\mathbf{R}}) - \dot{\mathbf{R}}^2 \rangle = \langle (\dot{\mathbf{r}}_i - \dot{\mathbf{R}})^2 \rangle + \dot{\mathbf{R}}^2.$$

Первый член справа представляет собой среднее значение квадрата скорости частицы относительно центра масс. Поэтому эта величина не зависит от скорости атома как целого. Поскольку мы пренебрегаем влиянием магнитного поля на электронное состояние, то  $\langle (\dot{\mathbf{r}}_i - \dot{\mathbf{R}})^2 \rangle$  не зависит от  $\mathbf{H}$ , а следовательно, и от положения атома в пространстве. Другими словами, эта величина является постоянной и может быть опущена (как и всякая аддитивная постоянная в функции Лагранжа). Аналогично, так как электростатическая энергия зависит лишь от расстояний между частицами, среднее значение  $U$  также не зависит ни от положения атома, ни от его скорости. Таким образом,  $\langle T - U \rangle$  сводится к одному члену

$$\langle T \rangle = \sum_i \frac{m_i \dot{\mathbf{R}}^2}{2} = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2},$$

где  $\mu$  есть полная масса атома. Усредним теперь член с магнитным полем в  $L$ . Для этого каждый член суммы перепишем тождественно следующим образом

$$(\dot{\mathbf{r}}_i, [\mathbf{H}, \mathbf{r}_i]) = (\dot{\mathbf{r}}_i - \dot{\mathbf{R}}, [\mathbf{H}, \mathbf{r}_i - \mathbf{R}]) + (\dot{\mathbf{R}}, [\mathbf{H}, \mathbf{r}_i - \mathbf{R}]) + (\dot{\mathbf{r}}_i - \dot{\mathbf{R}}, [\mathbf{H}, \mathbf{R}]) + (\dot{\mathbf{R}}, [\mathbf{H}, \mathbf{R}]).$$

При усреднении второй и третий члены обращаются в нуль в силу равенств (11.32), поскольку медленно меняющиеся величины  $\mathbf{R}, \dot{\mathbf{R}}, \mathbf{H}$  можно вынести за знак усреднения:

$$\left\langle (\dot{\mathbf{R}}, [\mathbf{H}, \mathbf{r}_i - \mathbf{R}]) \right\rangle = (\dot{\mathbf{R}}, [\mathbf{H}, \langle \mathbf{r}_i - \mathbf{R} \rangle]) = 0$$

и аналогично для третьего члена. Последний член вообще не меняется при усреднении, первый же дает

$$\left\langle \left( \dot{\mathbf{r}}_i - \dot{\mathbf{R}}, [\mathbf{H}, \mathbf{r}_i - \mathbf{R}] \right) \right\rangle = \left\langle \left( \mathbf{H}, [\mathbf{r}_i - \mathbf{R}, \dot{\mathbf{r}}_i - \dot{\mathbf{R}}] \right) \right\rangle = \frac{1}{m_i} (\langle \mathbf{m}_i \rangle, \mathbf{H}),$$

где  $\mathbf{m}_i$  есть момент импульса частицы, определенный относительно центра инерции атома и вычисленный в отсутствие магнитного поля ( $m$  обозначает, как всегда, массу частицы, а не модуль вектора  $\mathbf{m}$ ). Таким образом, обобщенный потенциал после усреднения принимает вид

$$\sum_i \frac{q_i}{2c} \left\{ \frac{1}{m_i} (\langle \mathbf{m}_i \rangle, \mathbf{H}) + \left( \dot{\mathbf{R}}, [\mathbf{H}, \mathbf{R}] \right) \right\}.$$

В силу электронейтральности атома ( $\sum_i q_i = 0$ ) второй член в фигурных скобках не дает вклада. Этот факт подтверждает наше предположение о том, что движение атома как целого можно описывать в приближении однородного поля – в функции Лагранжа остались лишь члены, в которых выражение (11.31) используется локально, т.е. в масштабах атома, где поле можно считать однородным. Нам остается вычислить первый член в фигурных скобках. Для этого заметим, что вкладом ядра в этом члене можно с большой степенью точности пренебречь. Действительно, хотя импульс ядер имеет тот же порядок величины, что и импульс электронов, но отношение расстояний ядер и электронов до центра масс обратно отношению их масс [см. формулу (3.9)]. Учитывая также множитель  $1/m_i$ , заключаем, что отношение ядерного и электронного вкладов во взаимодействие атома с магнитным полем является величиной порядка квадрата отношения массы электрона к массе протона. Следовательно, вклад обобщенного потенциала сводится к

$$\sum_i \frac{e}{2mc} (\langle \mathbf{m}_i \rangle, \mathbf{H}) = \frac{e}{2mc} (\mathbf{M}, \mathbf{H}),$$

где  $e = -|e|$  и  $m$  обозначают заряд и массу электрона, а

$$\mathbf{M} = \sum_i \mathbf{m}_i$$

есть полный момент импульса электронов. Поскольку мы пренебрегаем влиянием поля на электронное состояние, вектор  $\mathbf{M}$  сохраняется, и знак усреднения в последнем выражении можно опустить. Итак, функция Лагранжа атома после усреднения по электронному движению принимает следующий простой вид

$$L = \frac{\mu \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{e}{2mc} (\mathbf{M}, \mathbf{H}).$$

Поскольку второй член, по доказанному, зависит лишь от координат атома, то обобщенный импульс атома  $\mathbf{P} = \partial L / \partial \dot{\mathbf{R}} = \mu \dot{\mathbf{R}}$ , а его функция Гамильтона

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu} - \frac{e}{2mc} (\mathbf{M}, \mathbf{H}). \quad (11.33)$$

В неоднородном поле наличие второго члена приводит к появлению силы, действующей на атом,

$$\mathbf{F} = -\frac{e}{2mc} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (\mathbf{M}, \mathbf{H}).$$

Рассмотрим простейший случай, когда всего лишь одна компонента  $\mathbf{H}$  отлична от нуля:  $\mathbf{H} = (0, 0, H_z)$ . Тогда

$$\mathbf{F} = -\frac{eM_z}{2mc} \frac{\partial H_z}{\partial \mathbf{R}}.$$

Таким образом, в этом случае сила действует в направлении градиента поля. Если в условиях эксперимента Штерна-Герлаха момент импульса атома отличен от нуля, то моменты атомов в пучке хаотически разбросаны по всем направлениям, поскольку для испаряющихся атомов все направления термодинамически эквивалентны. Это значит, что в пучке имеются атомы со всеми  $M_z \in [-|\mathbf{M}|, +|\mathbf{M}|]$ . Отсюда следует, что с классической точки зрения после прохождения магнитного поля атомы, осаждающиеся на экране, должны были бы образовать непрерывную полосу вдоль проекции градиента  $H_z$  на плоскость экрана. С точки же зрения квантовой теории результат должен получиться иной. Поскольку при заданной величине  $M = \hbar L$  момента импульса его проекция на любое направление может принимать лишь  $(2L + 1)$  дискретных значений, то вместо непрерывной полосы на экране должно образоваться  $(2L + 1)$  точек, т.е. исходный пучок должен разделиться на  $(2L + 1)$  компоненту. В частности, пучок атомов серебра вообще не должен разделяться. Действительно, если в процессе испарения атомов в печи и происходит их возбуждение, то они быстро переходят в нормальное состояние за счет излучения фотонов электронами. В нормальном же состоянии атома серебра  $L = 0$  (см. пример 47). Но опыт показал, что пучок атомов серебра разделяется на две компоненты. Этот результат никак не мог быть объяснен в рамках бесспиновой квантовой механики, поскольку число компонент в любом случае должно быть нечетным (т.к.  $L$  – целое число). Американские физики С. Гаудсмит и Д. Уленбек заметили в 1925 г., что этот и многие другие экспериментальные факты можно объяснить, если предположить существование у электрона полуцелого “внутреннего” момента импульса – спина. Например, полный электронный спин атома серебра в нормальном состоянии  $S = 1/2$  (см. пример 47), что соответствует разделению пучка на две компоненты – с  $S_z = +1/2$  и  $S_z = -1/2$ . При этом более детальный анализ данных наблюдений показал, что спин электрона взаимодействует с магнитным полем в два раза сильнее обычного момента импульса. Из выражения (11.33) и постулата III следует, что гамильтониан взаимодействия обычного момента  $\mathbf{M} = \hbar \mathbf{L}$  с магнитным полем есть

$$\hat{H}_L = -\frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\mathbf{L}}, \mathbf{H}). \quad (11.34)$$

Поэтому В. Паули постулировал в 1927 г., что оператор энергии взаимодействия спина электрона  $\hbar \hat{\mathbf{s}}$  с магнитным полем имеет вид

$$\hat{H}_s = -\frac{e\hbar}{mc} (\hat{\mathbf{s}}, \mathbf{H}), \quad (11.35)$$

а уравнение Шредингера для электрона при наличии магнитного поля должно записываться в следующей матричной форме

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi - \frac{e\hbar}{mc} (\hat{\mathbf{s}}, \mathbf{H}) \Psi, \quad (11.36)$$

где матрицы  $\hat{\mathbf{s}}$  даются выражениями (11.16). Как всегда,  $\hat{\mathbf{s}}$  действует на столбец  $\Psi$  по правилу умножения “строка на столбец.” Это уравнение называют *уравнением Паули*. Оно было строго получено в рамках релятивистской квантовой теории английским физиком П. Дираком в 1928 г.

**Пример 48.** Прецессия спина в магнитном поле. Формула (11.33) показывает, что атом взаимодействует с внешним магнитным полем через электронный момент. При выводе этой формулы влиянием поля на внутреннее состояние атома, в частности, на величину момента, пренебрегалось. Рассмотрим теперь это влияние. Для этого заметим, что наиболее “чувствительным” к внешнему полю является именно момент, точнее, его направление. Действительно, энергия свободного атома не зависит от его ориентации в пространстве, а эта ориентация определяется направлением вектора  $\mathbf{M}$ . Поэтому для изменения направления  $\mathbf{M}$  достаточно сколь угодно малого момента силы. Поскольку магнитное поле не совершает работы, то это изменение не должно сопровождаться изменением энергии атома в поле. Из формулы (11.33) поэтому следует, что для этого должно оставаться постоянным скалярное произведение  $(\mathbf{M}, \mathbf{H})$ . Так как величина  $|\mathbf{M}|$  также постоянна, это означает, что вектор  $\mathbf{M}$  вращается вокруг направления  $\mathbf{H}$ , составляя с ним постоянный угол. Для того чтобы строго обосновать этот вывод, достаточно рассмотреть поведение вектора спина, поскольку векторы  $\mathbf{M}$  и  $\mathbf{s}$  одинаково взаимодействуют с магнитным полем [ср. формулы (11.34), (11.35)].

Будем искать решение уравнения (11.36) в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t)\chi(t),$$

где  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  есть обычная волновая функция, удовлетворяющая уравнению Шредингера для бесспиновой частицы в однородном магнитном поле (см. §9.3)

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \varphi, \quad (11.37)$$

а

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}.$$

Подстановка в уравнение (11.36) с учетом того, что  $\chi$  не зависит от координат, дает

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} \chi + i\hbar \frac{d\chi}{dt} \varphi = \chi \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \varphi - \varphi \frac{e\hbar}{mc} (\hat{\mathbf{s}}, \mathbf{H}) \chi. \quad (11.38)$$

Поскольку  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  удовлетворяет (11.37), уравнение (11.38) сводится к следующему уравнению для  $\chi(t)$ :

$$i\hbar \frac{d\chi}{dt} = -\frac{e\hbar}{mc} (\hat{\mathbf{s}}, \mathbf{H}) \chi. \quad (11.39)$$

Выберем ось  $z$  в направлении вектора  $\mathbf{H}$ . Тогда  $(\hat{\mathbf{s}}, \mathbf{H}) = \hat{s}_z H$ . Используя выражение (11.16) для  $\hat{s}_z$  и расписывая уравнение (11.39) в компонентах, приходим к двум уравнениям для функций  $a(t), b(t)$ :

$$i \frac{da}{dt} = \omega a, \quad i \frac{db}{dt} = -\omega b, \quad \omega = \frac{|e|H}{2mc}. \quad (11.40)$$

Решение этих уравнений имеет вид

$$a(t) = A e^{-i\omega t}, \quad b(t) = B e^{i\omega t},$$

где  $A, B$  – постоянные, определяемые начальными условиями и условием нормировки  $|A|^2 + |B|^2 = 1$ . Вычислим средние значения компонент спина. С помощью выражений (11.16) имеем

$$\overline{s_x} = (\chi, \hat{s}_x \chi) = (a^* \quad b^*) \left[ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{2} (a^* \quad b^*) \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (a^* b + b^* a),$$

или

$$\overline{s_x} = \operatorname{Re}(a^* b) = \operatorname{Re}(A^* B e^{2i\omega t}).$$

Аналогично находим

$$\overline{s_y} = \frac{1}{2} (-ia^* b + ib^* a) = \operatorname{Im}(A^* B e^{2i\omega t}), \quad \overline{s_z} = \frac{1}{2} (|a|^2 - |b|^2) = \frac{1}{2} (|A|^2 - |B|^2).$$

Если записать числа  $A, B$ , выделив явно их модуль и фазу, как  $A = |A|e^{i\alpha}$ ,  $B = |B|e^{i\beta}$ , то получим окончательно

$$\overline{s_x} = |A||B| \cos(2\omega t + \gamma), \quad \overline{s_y} = |A||B| \sin(2\omega t + \gamma), \quad \overline{s_z} = \frac{1}{2} (|A|^2 - |B|^2),$$

где  $\gamma = \beta - \alpha$ . Наконец, в силу условия нормировки  $|\overline{\mathbf{s}}| = 1/2$ . Полученные формулы и означают, что вектор  $\overline{\mathbf{s}}$  равномерно вращается с частотой  $2\omega = |e|H/mc$  вокруг вектора  $\mathbf{H}$ , составляя с ним постоянный угол  $\theta = \arccos(|A|^2 - |B|^2)$ .

## Глава 12. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

За исключением простейших случаев типа рассмотренных в предыдущих параграфах, точные решения уравнения Шредингера не могут быть найдены явно. Однако на практике часто встречаются системы, гамильтонианы которых имеют вид  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , где  $\hat{H}_0$  – гамильтониан, для которого уравнение Шредингера решается просто, а  $\hat{V}$  – оператор, описывающий взаимодействие системы, которое по тем или иным причинам является слабым. В этом случае решения уравнения Шредингера могут быть найдены приближенно. При этом систему, описываемую гамильтонианом  $\hat{H}_0$ , называют *невозмущенной*, оператор  $\hat{V}$  – возмущением, а методы нахождения приближенных решений – *теорией возмущений*.

### §12.1. Стационарная теория возмущений

Рассмотрим сначала случай, когда оба оператора  $\hat{H}_0, \hat{V}$  не зависят от времени, причем оператор  $\hat{H}_0$  имеет дискретный спектр. Обозначим через  $\psi_n^{(0)}, E_n^{(0)}$  собственные векторы и собственные значения невозмущенного гамильтониана

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}. \quad (12.1)$$

По условию,  $\psi_n^{(0)}, E_n^{(0)}$  известны. Как обычно, система векторов  $\{\psi_n^{(0)}\}$  будет предполагаться ортонормированной. Нам надо найти решения уравнения Шредингера возмущенной системы

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi_n = E_n \psi_n. \quad (12.2)$$

По теореме о разложении искомые векторы можно представить в виде

$$\psi_n = \sum_m c_{mn} \psi_m^{(0)}, \quad (12.3)$$

где  $c_{mn}$  – неизвестные коэффициенты. Подстановка этого разложения в уравнение (12.2) с учетом линейности операторов и уравнения (12.1) дает

$$\sum_m c_{mn} (E_m^{(0)} + \hat{V}) \psi_m^{(0)} = E_n \sum_m c_{mn} \psi_m^{(0)}.$$

Умножая последнее уравнение скалярно на вектор  $\psi_k^{(0)}$  и используя ортонормированность векторов  $\{\psi_n^{(0)}\}$ , получаем следующую систему уравнений для коэффициентов  $c_{mn}$

$$c_{kn} (E_n - E_k^{(0)}) = \sum_m V_{km} c_{mn}, \quad (12.4)$$

где обозначено

$$V_{km} = (\psi_k^{(0)}, \hat{V} \psi_m^{(0)}).$$

Для любых данных значений номеров  $k, m$  число  $V_{km}$  называется *матричным элементом возмущения для перехода из состояния  $\psi_m^{(0)}$  в состояние  $\psi_k^{(0)}$* , а набор этих величин для всех  $k, m$  – *матрицей возмущения (в базисе  $\{\psi_n^{(0)}\}$ )*. До сих пор предположение о малости возмущения нигде не было использовано, так что система (12.4) является точной. Используем теперь это предположение для нахождения приближенных решений системы (12.4) в виде рядов по степеням малости возмущения. Для того чтобы построить эти ряды, необходимо найти малый безразмерный параметр. Для этого мы поступим следующим образом: сначала введем такой параметр малости искусственно, заменив оператор возмущения  $\hat{V}$  на  $\varepsilon \hat{V}$ , где  $\varepsilon \in [0, 1]$  – некоторое число, по степеням которого будет вестись разложение, а затем исследуем возможность положить  $\varepsilon = 1$ , что и даст нам критерий применимости разложения. Итак, вместо (12.4) мы рассматриваем уравнение

$$c_{kn} (E_n - E_k^{(0)}) = \varepsilon \sum_m V_{km} c_{mn}, \quad \forall k, \quad (12.5)$$

причем ищем неизвестные числа  $c_{kn}, E_n$  в виде

$$c_{kn} = c_{kn}^{(0)} + \varepsilon c_{kn}^{(1)} + \varepsilon^2 c_{kn}^{(2)} + \dots, \quad E_n = E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)}. \quad (12.6)$$

Здесь учтено, что в нулевом порядке, т.е. при полном пренебрежении возмущением,  $n$ -ое собственное значение гамильтониана равно  $E_n^{(0)}$ . В этом же порядке уравнение (12.5) сводится к следующему соотношению для коэффициентов  $c_{kn}^{(0)}$

$$c_{kn}^{(0)} (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) = 0, \quad \forall k, \quad (12.7)$$

из которого следует, что  $c_{kn}^{(0)} = 0$ , если  $E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$ . Далее, подставляя разложения (12.6) в уравнение (12.5) и сравнивая коэффициенты при первой степени  $\varepsilon$ , находим

$$c_{kn}^{(1)} (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) + c_{kn}^{(0)} E_n^{(1)} = \sum_m V_{km} c_{mn}^{(0)}, \quad \forall k. \quad (12.8)$$

Решение этой системы существенно зависит от того, является ли собственное значение  $E_n^{(0)}$  вырожденным, или нет. Рассмотрим эти два случая по отдельности.

## А. Невырожденные собственные значения

Если значение  $E_n^{(0)}$  невырождено, т.е.  $E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$  при  $k \neq n$ , то  $c_{kn}^{(0)} = 0$  при  $k \neq n$ , т.е. среди коэффициентов нулевого порядка отличен от нуля лишь один  $c_{nn}^{(0)}$ . В этом случае уравнение (12.8) при  $k = n$  дает выражение для поправки первого порядка к  $n$ -ому уровню энергии

$$E_n^{(1)} = V_{nn}, \quad (12.9)$$

а при  $k \neq n$  – выражение для коэффициентов  $c_{kn}^{(1)}$

$$c_{kn}^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad \forall k \neq n. \quad (12.10)$$

Таким образом, в первом порядке по  $\varepsilon$   $n$ -ый собственный вектор возмущенного гамильтониана имеет вид

$$\psi_n = (c_{nn}^{(0)} + \varepsilon c_{nn}^{(1)})\psi_n^{(0)} + \varepsilon \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}. \quad (12.11)$$

Мы видим, что уравнение Шредингера не накладывает ограничений на коэффициент  $c_{nn} = c_{nn}^{(0)} + \varepsilon c_{nn}^{(1)}$ , который, таким образом, остается неопределенным. Так и должно быть, поскольку нормировка собственных векторов всегда остается в нашем распоряжении. Если мы договоримся выбирать эти векторы нормированными (как и собственные функции невозмущенного гамильтониана), то, раскрывая условие  $(\psi_n, \psi_n) = 1$  в первом порядке по  $\varepsilon$  и учитывая ортонормированность системы  $\{\psi_n^{(0)}\}$ , получим

$$\left( c_{nn}\psi_n^{(0)} + \varepsilon \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(1)}\psi_m^{(0)}, c_{nn}\psi_n^{(0)} + \varepsilon \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(1)}\psi_m^{(0)} \right) = |c_{nn}|^2 + O(\varepsilon^2) = 1,$$

откуда следует, что можно положить просто  $c_{nn} = 1$ , т.е.

$$c_{nn}^{(0)} = 1, \quad c_{nn}^{(1)} = 0.$$

Аналогичным образом можно получить поправки высших порядков. Найдем, например, поправку второго порядка к энергии. Сравнивая квадратичные по  $\varepsilon$  члены в уравнении (12.5) с  $k = n$ , находим

$$c_{nn}^{(0)}E_n^{(2)} + c_{nn}^{(1)}E_n^{(1)} = \sum_m V_{nm}c_{mn}^{(1)},$$

откуда, учитывая полученные выше выражения первого порядка,

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{nm}V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (12.12)$$

Хотя матричные элементы возмущения, вообще говоря, комплексны, найденные поправки к энергии вещественны. Действительно, правая часть равенства (12.9) вещественна, как среднее значение эрмитова оператора, а  $V_{mn} = (\psi_m^{(0)}, \hat{V}\psi_n^{(0)}) = (\hat{V}\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(0)}) =$

$(\psi_n^{(0)}, \hat{V}\psi_m^{(0)})^* = (V_{nm})^*$ , так что  $V_{nm}V_{mn} = |V_{nm}|^2$ , и поэтому правая часть равенства (12.12) также вещественна.

Найдем, наконец, условие применимости метода. Возмущение может рассматриваться как малое, если оно приводит к относительно малой поправке к волновой функции системы. Это значит, что второй член в выражении (12.11) должен быть мал по сравнению с первым. Эта малость пока что обеспечивается малостью параметра  $\varepsilon$ , но если величины  $|c_{kn}^{(1)}|$  малы сами по себе, то необходимости в том, чтобы  $\varepsilon$  был мал, на самом деле нет, и его можно устремить к единице, не нарушив при этом условия допустимости разложения. Таким образом, искомое условие имеет вид

$$|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|.$$

### В. Вырожденные собственные значения

Рассмотрим теперь случай, когда значение  $E_n^{(0)}$  вырождено, т.е. ему соответствуют несколько независимых собственных функций  $\psi_n^{(0)}$ . Для того чтобы выделить эти функции из полного набора  $\{\psi_n^{(0)}\}$ , договоримся нумеровать их буквами  $a, b, c$  из начала латинского алфавита (а буквы  $k, n, m$  из середины алфавита по-прежнему пробегают все возможные значения). Итак, векторы  $\psi_a^{(0)}$  соответствуют одному и тому же значению  $E_n$ . Тогда, уравнение (12.8) при  $k = a, n = b$  дает

$$c_{ab}^{(0)} E_n^{(1)} = \sum_c V_{ac} c_{cb}^{(0)}. \quad (12.13)$$

Здесь учтено, что  $c_{ka}^{(0)} = 0$ , если  $E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$ , и поэтому суммирование в правой части производится лишь по взаимно-вырожденным состояниям. Уравнения (12.13) представляют собой систему линейных однородных уравнений для коэффициентов  $c_{ab}^{(0)}$ . Для каждого фиксированного значения  $b$  эти уравнения утверждают, что вектор  $c_{ab}^{(0)}$  является собственным вектором матрицы  $V_{ab}$ , соответствующим собственному значению  $E_n^{(1)}$ . Условие совместности этой системы есть

$$\det(V_{ab} - E_n^{(1)} \delta_{ab}) = 0. \quad (12.14)$$

Это уравнение называют *секулярным*. Оно является алгебраическим уравнением относительно  $E_n^{(1)}$ , порядок которого равен степени вырождения уровня  $E_n^{(0)}$ . Решив его, мы найдем выражения для подуровней энергии, на которые расщепляется уровень  $E_n^{(0)}$  под действием возмущения, а затем из системы (12.13) найдем соответствующие им векторы  $c_{ab}^{(0)}$ , которые по формуле

$$\tilde{\psi}_a = \sum_b c_{ba}^{(0)} \psi_b^{(0)} \quad (12.15)$$

определяют в нулевом приближении собственные векторы гамильтониана, соответствующие расщепленным уровням энергии. Эти векторы называются *правильными собственными векторами нулевого приближения*.

Пример 49. Уровни энергии ангармонического осциллятора. Найдем поправки к энергии осциллятора, возникающие при учете нелинейности колебаний. Они определяются членами третьего и более высоких порядков в разложении потенциальной энергии

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4 + \dots,$$

где  $\alpha, \beta$  – некоторые постоянные коэффициенты. В этом случае  $\hat{V} = \alpha x^3 + \beta x^4$ . Согласно формуле (12.9)

$$E_n^{(1)} = \alpha (x^3)_{nn} + \beta (x^4)_{nn}.$$

Эти средние значения могут быть найдены с помощью выражения (10.14) для матричных элементов координаты осциллятора и правила (10.3) умножения матриц операторов. Имеем

$$(x^3)_{nn} = \sum_{k,l} x_{nk} x_{kl} x_{ln}.$$

Поскольку отличны от нуля лишь элементы  $x_{n,n\pm 1}$ , а  $n \pm 1 \pm 1 \pm 1 \neq n$ , то  $(x^3)_{nn} \equiv 0$ . Далее, среднее значение четвертой степени удобно записать как

$$(x^4)_{nn} = \sum_k (x^2)_{nk} (x^2)_{kn}$$

и вычислить сначала матрицу  $(x^2)_{nk}$ . Имеем

$$(x^2)_{nk} = \sum_l x_{nl} x_{lk}.$$

Поскольку должно быть  $l = n \pm 1$ ,  $k = l \pm 1$ , то у матрицы  $(x^2)_{nk}$  отличными от нуля могут быть лишь элементы  $(x^2)_{nn}$  и  $(x^2)_{n,n\pm 2}$ , для которых находим, используя (10.14) и учитывая, что  $x_{nk} = x_{kn}$ ,

$$\begin{aligned} (x^2)_{nn} &= x_{n,n-1} x_{n-1,n} + x_{n,n+1} x_{n+1,n} = (x_{n,n-1})^2 + (x_{n+1,n})^2 = \frac{n\hbar}{2m\omega} + \frac{(n+1)\hbar}{2m\omega} = \frac{(2n+1)\hbar}{2m\omega}, \\ (x^2)_{n,n-2} &= x_{n,n-1} x_{n-1,n-2} = \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{n(n-1)} = (x^2)_{n-2,n}, \\ (x^2)_{n,n+2} &= x_{n,n+1} x_{n+1,n+2} = \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{(n+1)(n+2)} = (x^2)_{n+2,n}. \end{aligned}$$

Поэтому

$$\begin{aligned} (x^4)_{nn} &= (x^2)_{nn} (x^2)_{nn} + (x^2)_{n,n-2} (x^2)_{n-2,n} + (x^2)_{n,n+2} (x^2)_{n+2,n} \\ &= [(x^2)_{nn}]^2 + [(x^2)_{n,n-2}]^2 + [(x^2)_{n,n+2}]^2 \\ &= \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 [(2n+1)^2 + n(n-1) + (n+1)(n+2)] \\ &= \frac{3}{2} \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 \left( n^2 + n + \frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

Таким образом,

$$E_n^{(1)} = \frac{3\beta}{2} \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 \left( n^2 + n + \frac{1}{2} \right).$$

В применении к колебаниям двухатомной молекулы, как мы знаем из §9.6, коэффициенты  $\alpha, \beta$  определяются разложением эффективной потенциальной энергии  $U_{\text{eff}}^{(l)}(r) = U(r) + l(l+1)/(2mr^2)$  около значения  $r_0$  – точки ее минимума, которое неявно зависит от  $l$ , а потому от него зависят и параметры  $\alpha, \beta$ . Однако, если пренебречь взаимодействием вращения и ангармоничности колебаний (то есть пренебречь очень малыми поправками к малым поправкам), то тогда будет просто

$$\beta = \frac{1}{4!} \frac{d^4 U}{dr^4}(r_e),$$

а выражение для уровней энергии молекулы с учетом ангармоничности колебаний можно записать в виде

$$E_{vl} = U_e + \hbar\omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right) - \hbar x_e \omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + B_v l(l+1) - D_e l^2(l+1)^2, \quad v, l = 0, 1, 2, \dots,$$

где

$$x_e \equiv -\frac{3\beta}{2\hbar\omega_e} \left(\frac{\hbar}{m\omega_e}\right)^2,$$

а независимый от вибрационного числа  $v$  член  $3\beta\hbar^2/(8m^2\omega_e^2)$  включен в слагаемое  $U_e$ . Как показывает опыт, коэффициент  $x_e$  всегда положителен и для большинства молекул является величиной порядка  $10^{-2}$ . Найденная поправка нарушает эквидистантность колебательных уровней – с ростом  $v$  расстояние между соседними уровнями уменьшается, или, как говорят, *колебательные уровни сходятся*.

**Пример 50.** Поляризуемость основного состояния двухатомной молекулы. В нормальном вращательном состоянии свободная молекула имеет  $l = 0$ . Волновая функция этого состояния  $Y_{00}(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi}$  не зависит от  $\theta, \phi$ , т.е. все направления молекулы в пространстве в нормальном состоянии равновероятны. Однако при помещении молекулы в электрическое поле эта симметрия нарушается. Пусть, например, молекула обладает электрическим дипольным моментом (величина дипольного момента особенно велика у молекул с резко выраженной гетерополярной связью атомов, таких как NaF, HCl). Поскольку на разноименные заряды действуют противоположно направленные силы, поле создает момент сил, стремящийся развернуть вектор дипольного момента по направлению вектора напряженности поля. Это приводит к появлению предпочтительного направления оси молекулы, или, как говорят, к ее *поляризации*. Определим связанную с этим поправку к энергии молекулы в приближении жесткого ротатора. Для этого установим сначала вид оператора возмущения. Обозначив через  $q$  электрический заряд первого атома, возникающий в результате обмена валентными электронами, запишем классическое выражение для потенциальной энергии молекулы в однородном электрическом поле напряженности  $\mathbf{E}$

$$U = q\varphi(\mathbf{r}_1) - q\varphi(\mathbf{r}_2) = -q(\mathbf{E}, \mathbf{r}_1) + q(\mathbf{E}, \mathbf{r}_2) = -(\mathbf{E}, \mathbf{d}), \quad (12.16)$$

где

$$\mathbf{d} = q\mathbf{r}_1 - q\mathbf{r}_2 = q\mathbf{r}$$

есть электрический дипольный момент системы. Поскольку  $U$  зависит лишь от радиус-векторов частиц, в соответствии с постулатом III оператор возмущения  $\hat{U}$  имеет тот же

вид (12.16). В приближении жесткого ротатора вектор  $\mathbf{d}$  остается постоянным по величине и может менять лишь свое направление. Поэтому, направляя ось сферической системы координат параллельно вектору  $\mathbf{E}$ , находим

$$\hat{U} = -\mathcal{E}d \cos \theta, \quad \mathcal{E} = |\mathbf{E}|, \quad d = |\mathbf{d}| = qr_e.$$

Таким образом, полный гамильтониан возмущенного ротатора есть

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{U} = B_e \hat{l}^2 - \mathcal{E}d \cos \theta, \quad (12.17)$$

а невозмущенные волновые функции стационарных состояний [см. конец §9.6]

$$\psi_n^{(0)} = Y_{lm}(\theta, \phi).$$

Поскольку они нумеруются двумя числами  $l, m$ , индекс  $n$  является двойным:  $n = \{l, m\}$ . Согласно формуле (12.9) поправка первого порядка к энергии нормального состояния равна

$$E_{00}^{(1)} = (Y_{00}, \hat{U}Y_{00}) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (-\mathcal{E}d \cos \theta) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = 0.$$

Обратимся к поправке второго порядка. В обозначениях данной задачи формула (12.12) принимает вид

$$E_{00}^{(2)} = \sum_{\{l,m\} \neq \{0,0\}} \frac{|U_{00,lm}|^2}{E_{00}^{(0)} - E_{lm}^{(0)}}. \quad (12.18)$$

Для того чтобы вычислить матричный элемент

$$U_{00,lm} = \int d\omega Y_{00}^* (-\mathcal{E}d \cos \theta) Y_{lm}$$

воспользуемся тем, что [см. (9.40)]

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad \cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\theta, \phi).$$

С помощью этих выражений рассматриваемый матричный элемент можно переписать так

$$U_{00,lm} = -\frac{\mathcal{E}d}{\sqrt{3}} \int d\omega Y_{10}^* Y_{lm}.$$

Ввиду ортонормированности системы функций  $\{Y_{lm}(\theta, \phi)\}$  находим отсюда

$$U_{00,lm} = \begin{cases} -\mathcal{E}d/\sqrt{3}, & l=1, m=0, \\ 0, & \{l, m\} \neq \{1, 0\}. \end{cases} \quad (12.19)$$

Подставляя также выражения для уровней энергии невозмущенного ротатора из (9.51) в формулу (12.18), получаем

$$E_{00}^{(2)} = -\frac{\mathcal{E}^2 d^2}{6B_e}. \quad (12.20)$$

С помощью этой формулы можно найти величину  $\bar{\mathbf{d}}$ , т.е. средний дипольный момент молекулы, индуцированный внешним полем (в основном состоянии свободный ротатор имеет  $\bar{\mathbf{d}} = 0$ , поскольку все направления в пространстве равновероятны). Для этого докажем следующую формулу дифференцирования по параметру:

$$\left( \psi_n, \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n \right) = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}, \quad (12.21)$$

где  $E_n$  – собственные значения гамильтониана  $\hat{H}$ ,  $\psi_n$  – соответствующие им нормированные собственные функции, а  $\lambda$  – некоторый параметр, от которого зависит гамильтониан, а следовательно, и  $\psi_n, E_n$ . Дифференцируя равенства  $(\psi_n, \hat{H} \psi_n) = E_n$ ,  $(\psi_n, \psi_n) = 1$  по  $\lambda$ , имеем

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}, \hat{H} \psi_n \right) + \left( \psi_n, \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n \right) + \left( \psi_n, \hat{H} \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \right) &= \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}, \\ \left( \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}, \psi_n \right) + \left( \psi_n, \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (12.22)$$

Используя уравнение  $\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n$  и эрмитовость гамильтониана, находим из первого равенства

$$E_n \left( \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}, \psi_n \right) + \left( \psi_n, \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n \right) + E_n \left( \psi_n, \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \right) = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda},$$

и с учетом второго равенства приходим к формуле (12.21).

В применении к ротатору в электрическом поле выбираем в этой формуле в качестве параметра  $\lambda$  вектор  $\mathbf{E}$  и подставляем  $n = \{00\}$ ,  $E_{00} \approx E_{00}^{(0)} + E_{00}^{(1)} + E_{00}^{(2)} = 0 + 0 - \mathbf{E}^2 d^2 / (6B_e)$ . Имеем

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{E}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}} (B_e \hat{\mathbf{l}}^2 - (\mathbf{E}, \mathbf{d})) = -\mathbf{d}, \quad \frac{\partial E_{00}}{\partial \mathbf{E}} = -\frac{\partial \mathbf{E}^2 d^2}{\partial \mathbf{E} 6B_e} = -\frac{\mathbf{E} d^2}{3B_e},$$

и поэтому

$$\bar{\mathbf{d}} = \alpha \mathbf{E}, \quad \alpha \equiv \frac{d^2}{3B_e}.$$

Коэффициент  $\alpha$  в полученном выражении определяет степень поляризации молекулы внешним полем и называется ее *поляризуемостью*.

**Пример 51. Взаимодействующие осцилляторы.** Рассмотрим систему, состоящую из двух одинаковых гармонических осцилляторов, слабо взаимодействующих друг с другом. Пусть  $x, y$  обозначают их декартовы координаты,  $m, \omega_0$  – их массы и частоту невозмущенных колебаний, а взаимодействие описывается потенциалом  $U = \alpha xy$ , где  $\alpha$  – малый постоянный параметр. Малость  $\alpha$  означает, что выполняется условие

$$\frac{\alpha}{m\omega^2} \ll 1.$$

Функция Гамильтона системы имеет вид

$$H(x, y, p_x, p_y) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \frac{m\omega^2 y^2}{2} + \alpha xy,$$

поэтому, согласно постулату III, гамильтониан системы есть

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m\omega^2 y^2}{2}, \quad \hat{V} = \alpha xy.$$

Поскольку гамильтониан  $\hat{H}_0$  разбивается на сумму двух гамильтонианов, то согласно правилам, полученным в §9.1, невозмущенные волновые функции стационарных состояний системы можно выбрать в виде

$$\psi_{nm}^{(0)}(x, y) = \psi_n(x)\psi_m(y), \quad n, m = 1, 2, \dots,$$

где  $\psi_n(x)$  – собственные функции стационарных состояний осциллятора, найденные в §8.5. При этом собственные значения  $\hat{H}_0$  равны сумме энергий двух осцилляторов:

$$E_{nm}^{(0)} = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left( m + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega (n + m + 1).$$

Эти собственные значения, исключая нормальное  $E_{00} = \hbar\omega$ , являются вырожденными. Например, энергия первого возбужденного состояния системы равна  $2\hbar\omega$ , и ему соответствуют две линейно-независимых собственных функции  $\psi_{10}(x, y) = \psi_1(x)\psi_0(y)$  и  $\psi_{01}(x, y) = \psi_0(x)\psi_1(y)$ , т.е. данное значение энергии является двукратно вырожденным. Аналогично, второе возбужденное значение  $3\hbar\omega$  трехкратно вырождено, поскольку ему соответствуют три линейно-независимых собственных функции  $\psi_{20}(x, y)$ ,  $\psi_{02}(x, y)$ ,  $\psi_{11}(x, y)$ , и т.д. Определим расщепление первого возбужденного уровня. Согласно результатам §12.1В, для этого нужно решить уравнение (12.14). Индексы  $a, b$  в этом уравнении в данном случае являются двойными, т.к. они нумеруют состояния двух осцилляторов. Каждый из них пробегает два значения – 01 и 10. Поэтому матричные элементы оператора возмущения имеют вид

$$\begin{aligned} V_{10,10} &= (\psi_{10}, \hat{V}\psi_{10}) = \iint_{-\infty}^{+\infty} dx dy \psi_1^*(x)\psi_0^*(y)\alpha xy\psi_1(x)\psi_0(y) \\ &= \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_1^*(x)x\psi_1(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dy \psi_0^*(y)y\psi_0(y) = \alpha x_{11}y_{00} \end{aligned}$$

и аналогично для  $V_{10,01}$ ,  $V_{01,01}$ ,  $V_{01,10}$ . Используя выражение (10.14), получаем

$$V_{10,10} = V_{01,01} = 0, \quad V_{10,01} = V_{01,10} = \alpha x_{10}y_{01} = \alpha(x_{10})^2 = \frac{\alpha\hbar}{2m\omega}.$$

Поэтому секулярное уравнение принимает вид

$$\det \begin{pmatrix} -E^{(1)} & \alpha\hbar/2m\omega \\ \alpha\hbar/2m\omega & -E^{(1)} \end{pmatrix} = 0, \quad (12.23)$$

откуда  $E_{\pm}^{(1)} = \pm\alpha\hbar/2m\omega$ . Нижние индексы  $\pm$  здесь отличают два найденных значения  $E^{(1)}$ . Подставляя поочередно эти два решения в уравнения (12.13), найдем соответствующие им собственные векторы матрицы возмущения, которые также удобно отличать знаком плюс или минус (эти знаки заменяют второй индекс матрицы  $c_{ab}$ )

$$c_{a+} = \begin{pmatrix} c_{10,+} \\ c_{01,+} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad c_{a-} = \begin{pmatrix} c_{10,-} \\ c_{01,-} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Эти векторы выбраны нормированными, а верхний индекс (0) для краткости опущен. Подставляя эти выражения в формулу (12.15), находим правильные собственные функции нулевого приближения

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_+(x, y) &= c_{10,+}\psi_{10}^{(0)}(x, y) + c_{01,+}\psi_{01}^{(0)}(x, y) = \frac{\psi_1(x)\psi_0(y) + \psi_0(x)\psi_1(y)}{\sqrt{2}}, \\ \tilde{\psi}_-(x, y) &= c_{10,-}\psi_{10}^{(0)}(x, y) + c_{01,-}\psi_{01}^{(0)}(x, y) = \frac{\psi_1(x)\psi_0(y) - \psi_0(x)\psi_1(y)}{\sqrt{2}}.\end{aligned}$$

Как и векторы  $c_{a\pm}$ , эти функции нормированы.

### §12.2. Возмущения, зависящие от времени

Рассмотрим теперь ситуацию, когда оператор возмущения  $\hat{V}$  зависит от времени (невозмущенный же гамильтониан  $\hat{H}_0$  по-прежнему предполагается независимым от времени). Стационарных состояний возмущенной системы в этом случае, конечно, уже не существует, и следует решать общее нестационарное уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t))\Psi. \quad (12.24)$$

Так же как и в предыдущем параграфе, разложим функцию  $\Psi(\mathbf{r}_i, t)$  по собственным функциям гамильтониана  $\hat{H}_0$ :

$$\Psi(\mathbf{r}_i, t) = \sum_n c_n(t)e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}\psi_n^{(0)}(\mathbf{r}_i), \quad \hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}. \quad (12.25)$$

В коэффициентах разложения здесь явно выделен множитель  $e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}$ , определяющий временную зависимость невозмущенных волновых функций стационарных состояний. При подстановке в уравнение (12.24) производная по времени от этого множителя сокращает вклад члена с  $\hat{H}_0$  в правой части, так что получается

$$\sum_n \left( i\hbar\frac{dc_n}{dt} \right) e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}\psi_n^{(0)} = \sum_n c_n(t)e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}\hat{V}(t)\psi_n^{(0)}.$$

Умножая скалярно обе части этого уравнения слева на  $\psi_m^{(0)}$ , получаем уравнение для неизвестных коэффициентов  $c_n(t)$ :

$$\left( i\hbar\frac{dc_m}{dt} \right) e^{-iE_m^{(0)}t/\hbar} = \sum_n c_n(t)e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}V_{mn}(t), \quad V_{mn}(t) = (\psi_m^{(0)}, \hat{V}(t)\psi_n^{(0)}),$$

или

$$\frac{dc_m}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n(t)e^{i\omega_{mn}t}V_{mn}, \quad \omega_{mn} = \frac{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar}. \quad (12.26)$$

Заменяя, как и ранее,  $\hat{V}(t) \rightarrow \varepsilon\hat{V}(t)$ , ищем решение этого уравнения в виде разложения по степеням  $\varepsilon$ :

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + \varepsilon c_n^{(1)}(t) + \varepsilon^2 c_n^{(2)}(t) + \dots$$

и сразу получаем следующую цепочку уравнений

$$\frac{dc_m^{(0)}}{dt} = 0, \quad (12.27)$$

$$\frac{dc_m^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n^{(0)}(t) e^{i\omega_{mn}t} V_{mn}(t), \quad (12.28)$$

$$\frac{dc_m^{(2)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n^{(1)}(t) e^{i\omega_{mn}t} V_{mn}(t), \quad (12.29)$$

и т.д. Из уравнения (12.27) следует, что  $c_m^{(0)}$  не зависят от времени. Их значения определяются из начальных условий задачи. Пусть, например, при  $t = -\infty$  возмущение отсутствовало, а система находилась в  $l$ -ом стационарном состоянии. Тогда

$$c_n(-\infty) = \delta_{nl}.$$

С другой стороны, по определению

$$c_n(-\infty) = c_n^{(0)}(-\infty) + \varepsilon c_n^{(1)}(-\infty) + \varepsilon^2 c_n^{(2)}(-\infty) + \dots.$$

Отсюда следует, что

$$c_n^{(0)}(-\infty) = \delta_{nl}, \quad c_n^{(1)}(-\infty) = 0, \quad c_n^{(2)}(-\infty) = 0, \dots$$

Подстановка этих значений в уравнение (12.28) дает

$$\frac{dc_m^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} e^{i\omega_{ml}t} V_{ml}(t).$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющее начальному условию, есть

$$c_m^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau e^{i\omega_{ml}\tau} V_{ml}(\tau). \quad (12.30)$$

Подставляя его в правую часть уравнения (12.29) и интегрируя с учетом начального условия, находим выражение для поправки второго порядка

$$c_m^{(2)}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_n \int_{-\infty}^t d\tau' V_{mn}(\tau') e^{i\omega_{mn}\tau'} \int_{-\infty}^{\tau'} d\tau e^{i\omega_{nl}\tau} V_{nl}(\tau). \quad (12.31)$$

Аналогично могут быть выписаны решения для поправок высших порядков.

**Пример 52.** Возбуждение двухатомной молекулы переменным электрическим полем. Рассмотрим свободную двухатомную молекулу в нормальном состоянии, на которую в момент времени  $t = 0$  начинает действовать однородное электрическое поле, напряженность  $\mathbf{E}$  которого изменяется со временем как  $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-t/\tau_0}$ , где  $\tau_0 > 0$  – некоторая постоянная. Найдем вероятности возбуждения различных вращательных состояний молекулы этим полем, т.е. распределение вероятностей различных вращательных уровней энергии при

$t = +\infty$ . В приближении жесткого ротатора, как мы знаем из примера 50, гамильтониан молекулы с дипольным моментом  $\mathbf{d}$  в однородном электрическом поле имеет вид

$$\hat{H} = B_e \hat{\mathbf{l}}^2 - \mathcal{E} d \cos \theta, \quad (12.32)$$

где теперь  $\mathcal{E}$  зависит от времени:

$$\mathcal{E} = \begin{cases} 0, & t \leq 0 \\ |\mathbf{E}_0| e^{-t/\tau_0}, & t > 0 \end{cases}$$

Матричные элементы возмущения были уже вычислены в примере 50 [см. формулу (12.19)]. Подставляя их в формулу (12.30), находим значения коэффициентов  $c_{lm}^{(1)}$  при  $t \rightarrow +\infty$ :

$$c_{lm}^{(1)}(+\infty) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\omega_{lm,00}\tau} V_{lm,00}(\tau) = \begin{cases} \frac{id|\mathbf{E}_0|}{\hbar\sqrt{3}} \int_0^{+\infty} d\tau e^{i\omega_{lm,00}\tau - \tau/\tau_0}, & l = 1, m = 0, \\ 0, & \{l, m\} \neq \{1, 0\}. \end{cases}$$

Учитывая, что  $\omega_{10,00} = (E_{10}^{(0)} - E_{00}^{(0)})/\hbar = (2B_e - 0)/\hbar$ , получаем

$$c_{10}^{(1)}(+\infty) = \frac{id|\mathbf{E}_0|}{\hbar\sqrt{3}} \frac{\tau_0}{1 - 2iB_e\tau_0/\hbar}.$$

Таким образом, в первом порядке теории возмущений ротатор из нормального состояния может перейти лишь в состояние с  $l = 1$  и  $m = 0$ , причем вероятность этого перехода

$$w(E_{00} \rightarrow E_{10}) = |c_{10}^{(1)}(+\infty)|^2 = \frac{d^2 \mathbf{E}_0^2}{3\hbar^2} \frac{\tau_0^2}{1 + 4B_e^2\tau_0^2/\hbar^2}.$$

Вероятность же того, что ротатор останется в нормальном состоянии, есть

$$w(E_{00} \rightarrow E_{00}) = 1 - w(E_{00} \rightarrow E_{10}).$$

Вероятность перехода должна быть мала, поэтому условие применимости теории возмущений в данном случае есть

$$d|\mathbf{E}_0| \ll B_e.$$

## Рекомендуемая литература

### Теоретическая механика

1) Исчерпывающее изложение основ теоретической механики содержится в классической монографии:

*Голдстейн Г.* Классическая механика. – М.: Наука, 1975. – 416 с.

2) Более краткое изложение механики дано в первом томе Курса теоретической физики:  
*Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. – М.: Наука, 1988. – 216 с.

3) Задачи для семинарских занятий и самостоятельной работы студентов Химфака:

*Форш П.А.* Задачи по теоретической механике для химиков. – М.: Издательство МГУ, 2008. – 144 с.

4) Большое количество задач с подробными решениями собрано в:

*Коткин Г.Л., Сербо В.Г.* Сборник задач по классической механике. – М.: Наука, 1969. – 240 с.

### Квантовая механика

1) Вторую часть данной книжки можно рассматривать как элементарное введение к учебнику:

*Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М.: Наука, 1989. – 768 с.

2) Прекрасное наглядное изложение основ квантовой механики со множеством детально разобранных примеров дано в книге:

*Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике, тт. 8,9. – М.: Мир, 1978. – 524 с.

3) Основы квантовой механики с приложениями к квантовой химии можно найти в учебнике:

*Степанов Н.Ф.* Квантовая механика и квантовая химия. – М.: Мир, 2001. – 519 с.

4) Большое количество задач с подробными решениями собрано в:

*Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. – М.: Наука, 1981. – 648 с.