

Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 4

ТВЕРЬ 2012

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензенты:

Доктор технических наук, профессор, заслуженный деятель науки Российской Федерации,
проректор по научной работе Тверского государственного технического университета

В.А. Тихомиров

Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики пьезо-
и сегнетоэлектриков Тверского государственного университета

Н.Н. Большакова

Редакционная коллегия:

Самсонов Владимир Михайлович – заведующий кафедрой теоретической физики
ТвГУ, профессор, д.ф.-м.н. (ответственный редактор);

Созаев Виктор Адыгеевич – заведующий кафедрой физики факультета электронной
техники Северо-Кавказского горно-металлургического института, профессор, д.ф.-м.н.;

Гафнер Юрий Яковлевич – заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики
Хакасского государственного университета, профессор, д.ф.-м.н.;

Сдобняков Николай Юрьевич – доцент, к.ф.-м.н. (зам. ответственного редактора,
ответственный секретарь);

Базулев Анатолий Николаевич – доцент, к.ф.-м.н.;

Комаров Павел Вячеславович – доцент, к.ф.-м.н.;

Скопич Виктор Леонидович – доцент, к.ф.-м.н.;

Соколов Денис Николаевич – технический редактор.

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и
наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией
В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2012. – Вып. 4. –
364 с.

ISBN 978-5-7609-0560-4

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных
технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ
ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и
экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области
изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и
наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник
предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей
вузов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре теоретической
физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-0560-4

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2012

© Тверской государственный
университет, 2012

УДК 530.145.7:530.131:531.62

ЗАКОН СОХРАНЕНИЯ ЭНЕРГИИ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

В.Л. Скопич

Тверской государственный университет, 170002 Тверь, Садовый переулок, 35
nsdobnyakov@mail.ru

Аннотация: В работе показано, что использование некоторых формул в рамках первого приближения теории возмущений является необоснованным. Кроме того, нет оснований утверждать, что при малом времени перехода из начального в конечное состояние закон сохранения энергии в квантовой теории столкновений не выполняется.

Ключевые слова: сохранение энергии, квантовая механика, теория возмущений.

Рассмотрим поведение системы, состоящей из двух слабо взаимодействующих частей. К категории рассматриваемых явлений относятся, например, различные столкновения; при этом система в начальном и конечном состояниях представляет собой совокупность свободных частиц, а роль возмущения играет взаимодействие между ними.

Вероятность перехода из первоначального (i) стационарного состояния в конечное (f) стационарное состояние равна [1]

$$w_{fi} = \frac{1}{h^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} v_{fi} e^{i\omega_{fi} t} dt \right|^2. \quad (1)$$

Здесь и далее h – постоянная Планка. Если интеграл в формуле (1) взять по частям, то он разбивается на два слагаемых (поскольку на нижнем пределе значение первого члена исчезает):

$$a_{fi} = -\frac{i}{h} \int_{-\infty}^t v_{fi} e^{i\omega_{fi} t} dt = -\frac{v_{fi} e^{i\omega_{fi} t}}{h\omega_{fi}} + \int_{-\infty}^t \frac{\partial v_{fi}}{\partial t} \frac{e^{i\omega_{fi} t}}{h\omega_{fi}} dt. \quad (2)$$

Далее будем рассматривать случай быстрого, внезапного включения взаимодействия (в момент $t=0$), при котором $v=0$ для $t<0$, и $\partial v/\partial t=0$ для $t>0$. При этом в [1] рассматривается только второе слагаемое, хотя первое никуда не исчезает. Учет первого слагаемого дает для вероятности w_{fi} следующее выражение:

$$w_{fi} = |a_{fi}|^2 = \frac{|v_{fi}|^2}{h^2 \omega_{fi}^2} 4 \sin^2 \frac{\omega_{fi} t}{2}. \quad (3)$$

Использование одного из представлений δ -функции [2]

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi t \alpha^2} = \delta(\alpha) \quad (4)$$

позволяет записать при больших t выражение (3) в следующем виде:

$$w_{fi} = \frac{2\pi t}{h} |v_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (5)$$

Здесь возникает вопрос: а что на практике означает $t \rightarrow \infty$? По определению δ -функции, для любой функции $V(x)$ справедливо следующее равенство:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} V(x) \delta(x-a) dx = V(a) \quad (6)$$

Это означает, что можно взять $\delta_a(x)$ в качестве приближенной δ -функции ($\delta_a(x) \approx \delta(x)$), если

$$\delta_a(x) = \begin{cases} \Delta x^{-1}; & 0 \leq x \leq \Delta x \\ 0; & x < 0, x > \Delta x \end{cases} \quad (7)$$

и, при этом, $V(x)$ слабо меняется на отрезке Δx . И вообще, в интервале Δx $\delta_a(x)$ может быть любой, лишь бы $\int_0^{\Delta x} \delta_a(x) dx = 1$. Пусть Δx_{ch} – интервал, на котором $V(x)$ заметно меняется. Тогда должно быть $\Delta x \ll \Delta x_{ch}$.

В правую часть выражения (3) входит функция энергии

$$f(E_f) \equiv \frac{1}{(E_f - E_i)^2} \sin^2\left(\frac{E_f - E_i}{2h} t\right), \text{ причем } \lim_{t \rightarrow \infty} f(E_f) = \frac{t\pi}{2h} \delta(E_f - E_i).$$

Эта функция имеет максимум при $E_f = E_i$ и затухает при $\left| \frac{(E_f - E_i)t}{2h} \right| \geq M$, где M – достаточно большое число ($M \geq 10$).

Любой процесс, происходящий в системе, есть некое взаимодействие между частями этой системы, с характерной для каждого процесса энергией взаимодействия $\overline{V_{int}}$. Для атомных процессов эта энергия $\overline{V_{int}} \geq 10$ эв, для ядерных процессов – $\overline{V_{int}} \geq 10$ Мэв. Понятно, что $f(E_f)$ можно представить в виде δ -функции, если V_{fi} слабо меняется на отрезке $E_f - E_i$, т. е. если $|E_f - E_i| \ll \overline{V_{int}}$. А так как $|E_f - E_i| \geq \frac{2hM}{t}$, то отсюда получаем условие на время, при котором можно представить $f(E_f)$ в виде δ -функции:

$$t \gg \frac{2hM}{\overline{V_{int}}}. \quad (8)$$

Посмотрим, как совместимо это условие с условием применимости первого приближения теории возмущений. Для этого запишем вероятность w_{ii} того, что после включения взаимодействия система останется в начальном состоянии:

$$w_{ii} = |a_{ii}|^2, \text{ где } a_{ii} = 1 - \frac{i v_{ii}}{h} t. \quad (9)$$

Переход из определенного начального в какое-либо конечное состояние есть достоверное событие. Это означает, что должно быть $\sum_f |a_{fi}|^2 = 1$. Однако, при малых t в первом приближении $\sum_f |a_{fi}|^2 = 1 + \frac{t^2}{h^2} \sum_f |v_{fi}|^2$, т.е. левая часть больше 1. Чтобы устранить это противоречие, необходимо добавить к выражению для a_{ii} малый действительный параметр $\beta \ll 1$. Легко видеть, что $\beta = -\frac{t^2}{2h^2} \sum_f |v_{fi}|^2$. Заметим, что в первом приближении, как и должно быть, $\beta = 0$. Отсюда следует, что первое приближение теории столкновений справедливо при

$$t \ll \frac{h}{\sqrt{\sum_f |v_{fi}|^2}} \quad (10)$$

Сравнивая (10) с (8), видим, что полученные неравенства несовместимы (их знаменатели являются величиной одного порядка). Другими словами, представление $f(E_f)$ в виде δ -функции возможно лишь при таких больших t , при которых первое приближение теории возмущений уже не работает.

Далее, соотношение (3) используется в [1] для обоснования возможности нарушения закона сохранения энергии при малых t . На основании (3) утверждается, что наиболее вероятное значение разности $E_f - E_i$ порядка величины h/t . Здесь почему-то молчаливо подразумевается, что конечное состояние отличается от начального. Однако вероятность того, что система останется в том же начальном состоянии при $t \rightarrow 0$, стремится к 1, и, в то же время, вероятность обнаружения отличного от нуля изменения энергии $E_f - E_i \neq 0$ при малых t , пропорциональна t^2 , т. е. по сути равна нулю. Другими словами, наиболее вероятное значение разности $E_f - E_i = 0$, а не h/t .

Если же говорить не о наиболее вероятном значении разности, а о среднеквадратичном отклонении $\sqrt{(E_f - E_i)^2} \equiv \Delta(E_f)$, то из (3) и (9) очевидно, что $\Delta(E_f)$ прямо пропорционально величине возмущения V , и, значит, при сколь угодно малом взаимодействии V между обеими частями системы, отклонение $\Delta(E_f)$ будет стремиться к нулю (изменение энергии при измерении не будет обнаружено).

Таким образом, нет оснований допускать возможность нарушения закона сохранения энергии в первом приближении теории возмущений при малых t . Такой же вывод, по существу, содержится и в работе [3], – правда

на основании рассмотрения других аспектов рассматриваемой проблемы. Главными из этих аспектов являются отсутствие последовательности и согласованности между конкретными случаями применения закона сохранения энергии и общим формализмом квантовой механики, вопрос о природе времени (время – это оператор или параметр), об общем выражении соотношения неопределенности для энергии и времени. Иначе говоря, в [3] рассмотрение носит методологический характер, здесь же подход осуществляется с более строгих математических позиций.

Библиографический список

1. **Ландау, Л.Д.** Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Наука, 1974. – 752 с.
2. **Блохинцев, Д.И.** Основы квантовой механики / Д.И. Блохинцев. – 5-е изд., перераб. – М.: Наука, 1976. – 664 с.
3. **Мандельштам, Л.И.** Соотношение неопределённости энергия-время в нерелятивистской квантовой механике / Л.И. Мандельштам, И.Е. Тамм // Известия АН СССР. Серия физическая. – 1945. – Вып. 9. – С. 122-128.