

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

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

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

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

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

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

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

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

## Приближённые методы К. м.

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

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

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

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

## Парадоксы К. м.

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

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