

Глава 2. КВАНТОВЫЕ И ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВА

2.1. Экспериментальные обоснования структуры атомов

Атом – наименьшая часть химического элемента, являющаяся носителем его свойств. Само слово «атом» произошло от греческого слова *atomos* – неделимый.

Заслуга введения в теорию вещества идеи атомов принадлежит греческим философам (Демокрит, Эпикур). Нелегко понять, что подразумевали древние под термином “атом”, но основной проблемой, интересовавшей их, был вопрос о том, бесконечна ли делимость вещества. Греческие атомисты верили, что любое вещество построено из “атомов” и, вероятно, чувствовали, что бесконечное многообразие свойств вещества должно быть объяснено конфигурацией и движением атомов. Эти идеи довольно близки современным, но различия между нашими количественными теориями, основанными на опыте, и туманными размышлениями древних столь же огромны, как и отличие их “атомов” от того понимания, которое вкладывают в этот термин физики.

Постепенно само существование атомов и молекул, которое долгое время рассматривалось только как удобная рабочая гипотеза, было осознано как объективная реальность. В начале XIX века в результате установления основных химических законов и законов идеального газа сложились представления об атоме как о мельчайшей частице химического элемента. Вклад в развитие этих представлений внесли Дж. Дальтон, А. Авогадро, Я. Берцелиус. В середине XIX века была проведена четкая граница между атомом и молекулой. Важнейшее значение имело открытие в 1869 г. Д.И. Менделеевым *периодической системы элементов*.

Кратко перечислим великие открытия конца XIX в. В 1895 г В. Рентген открыл *рентгеновские лучи*, в 1896 г. А. Беккерель открыл *явление радиоактивности*. На следующий год (1897 г.) Дж.Дж. Томсон открыл *электрон*, а П. и М. Кюри представили результаты по исследованию радиоактивности. Эти открытия окончательно разрушили представление о неизменности и неделимости атома. Стало очевидным, что атом имеет сложное строение.

2.1.1. Распределение заряда в атомах. Модель Резерфорда.

В 1903 г. Дж.Дж. Томсон предложил модель, согласно которой атом представляет собой положительно заряженную сферу (или равномерно заряженный шар), внутрь которой “вкраплены” электроны. Положительный суммарный заряд сферы равен заряду электронов, т.е. атом в целом электронейтрален. Испускание света таким атомом – это следствие колебания

электронов около положения равновесия. Однако эта модель потерпела неудачу в объяснении опытов по рассеянию частиц на атоме.

Первую попытку изучения строения атома на опытах по рассеянию пучков заряженных частиц предпринял Э. Леннард с сотрудниками, используя катодные лучи. Оказалось, что быстрые электроны почти совершенно не тормозятся атомом, хотя в результате столкновений с “массивными шариками” размера с атом и соответствующей потери энергии электроны неизбежно должны бы были “остановиться”.

В 1911 г. Э. Резерфорд поставил опыты по изучению рассеяния положительно заряженных α -частиц (заряд $Z_\alpha = +2|e|$) при прохождении через тонкую металлическую фольгу (рис. 1.1). Резерфорд выбрал для своих экспериментов значительно более массивные α -частицы, а не сравнительно легкие электроны, в силу того, что α -частицы не отклоняются сколь-нибудь заметным образом при столкновениях с электронами атома и поэтому будут реагировать только на столкновения с более тяжелыми частицами. Разница в проникающих способностях электрона и α -частицы сравнима с разницей между легкой ружейной пулей и тяжелым снарядом. α -частицы испускались в результате радиоактивного распада ядер и имели скорость порядка 10^7 м/с.

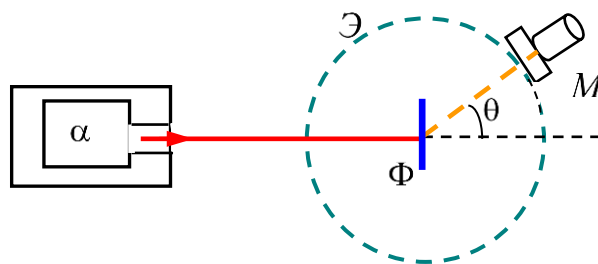


Рис. 1.1.

Узкий пучок α -частиц направлялся на мишень (Φ) из тонкой фольги. Рассеянные α -частицы регистрировались визуально – удар α -частицы об экран (Э) из сернистого цинка, окружавший мишень, вызывал сцинтилляцию (вспышку света), наблюдаемую в микроскоп (М). Весь прибор помещался в вакуумированную оболочку. Подавляющее число α -частиц рассеивалось на малые углы ($1 \div 3$)° (рис. 1.2), однако некоторое количество α -частиц отклонялось на очень большие углы (до 180°). Например, на платиновой фольге из 8000 падающих α -частиц 1 (одна) рассеивалась на угол больше 90° .

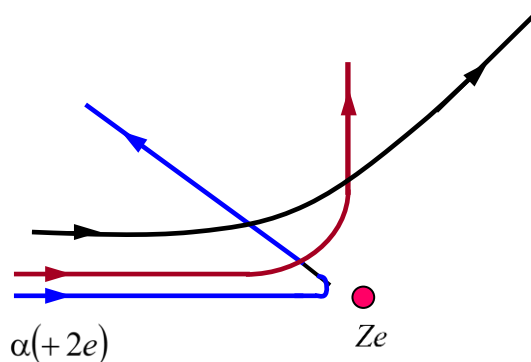


Рис. 1.2.

Анализируя результаты опыта, Резерфорд пришел к выводу, что столь сильное отклонение α -частиц вызывается чрезвычайно сильным электрическим полем, которое создается зарядом, обладающим большой

массой и сконцентрированным в очень малом объеме. Остальное внутриатомное пространство практически ничем не заполнено – результат, уже полученный ранее Леннардом. В отличие от Томсона, который отклонение на большие углы пытался объяснить множественными актами рассеяния, Резерфорд объяснил этот эффект однократным актом рассеяния на массивном положительном заряде и получил согласие с экспериментом.

На основе объяснения полученных результатов рождается планетарная модель атома (1911г., рис. 1.3). В центре атома находится *заряженное ядро* с зарядом Ze , имеющее размеры $< 10^{-12}$ см. Вокруг ядра распределены Z электронов, размер области распределения электронов $\sim 10^{-8}$ см. Масса атома практически вся сосредоточена в ядре.

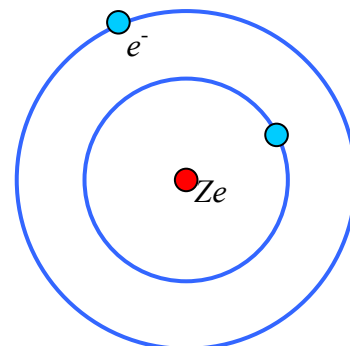


Рис. 1.3.

Примечание 1. “Опыт Резерфорда” был поставлен в 1909 году Х. Гейгером и Э. Марсденом, сотрудниками лаборатории Резерфорда. Они выполнили экспериментальное исследование прохождения α -частиц через тонкие пластинки из золота и других металлов.

Примечание 2. Планетарная модель впервые была выдвинута в 1901 году в лекции Ж. Перрена в Сорбонне. Положительно заряженная частица, окруженная некоторым количеством электронов (наподобие маленьких планет), компенсирующих заряд центральной частицы. Перрен предполагал, что под действием электромагнитных сил образуется динамически устойчивая система, периоды вращения в которой соответствуют частотам линий спектра атома.

Поскольку α - частицы, по Резерфорду, заметно отклоняются лишь ядром, можно вывести закон рассеяния из распределения α - частиц, отклоненных от первоначального направления пучка тонкой пленкой изучаемого образца. Тонкая пленка практически обеспечивала однократное рассеяние частиц на ядре. Таким путем получается однозначный вывод – эффективная рассеивающая сила представляет собой кулоновскую силу

$$2Ze^2/r^2,$$

где $2e$ – заряд α - частицы, а Ze – заряд ядра.

Траектории α - частиц имеют вид гипербол, в фокусе которых расположено ядро (см рис. 1.4). Эту задачу рассеяния при заданном прицельном параметре ρ ранее мы рассматривали в курсе классической механики (см [1], Глава 1 §1.15). Там же в пункте 1.15.4 было рассмотрено сечение рассеяния на кулоновском центре и получена формула Резерфорда (1.15.21) для дифференциального сечения рассеяния частиц под углом θ :

$$d\sigma = \left(\frac{Ze^2}{mv^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \theta/2} \quad (2.1.1)$$

где m и v - масса и скорость налетающей α - частицы. Формула (2.1.1) справедлива для любого телесного угла $d\Omega$, в который рассеиваются частицы (а не только для “кольца” как было рассмотрено при выводе формуле для сечения в §1.15 [1]).

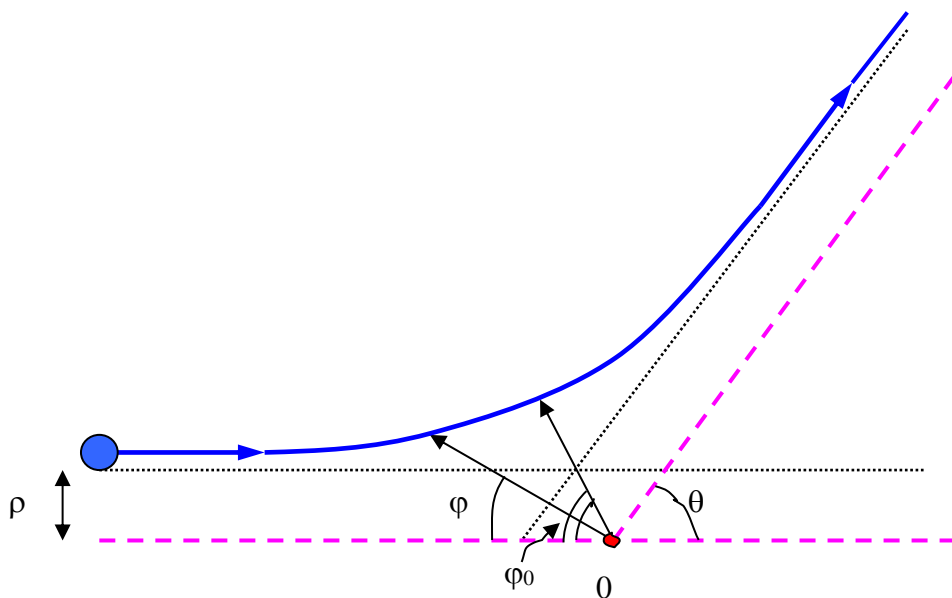


Рис. 1.4.

Примечание 3. Полное сечение рассеяния равно бесконечности, т.к. интеграл $\int d\sigma \Rightarrow \infty$, взятый по всем углам рассеяния, расходится. Формула Резерфорда неприменима при малых углах рассеяния.

С экспериментом сравнивалась немного измененная формула (2.1.1). Пусть I – интенсивность пучка α - частиц, т.е. число частиц, проходящих через единичную площадку в единицу времени. Будем считать, что акты рассеяния различными атомами независимы и n – число рассеивателей в 1 объеме, а V – рассеивающий объем. Тогда число α - частиц, рассеянных в 1 времени в телесный угол $d\Omega$, равно:

$$dN_\alpha = VnI \cdot d\sigma = VnI \left(\frac{Ze^2}{mv^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \theta/2} \quad (2.1.2)$$

Реально вычислялась и сравнивалась с экспериментом следующая величина

$$\frac{dN_\alpha}{d\Omega} \sin^4 \frac{\theta}{2} = const.$$

Эта закономерность была подтверждена в результате анализа измерений.

Отсюда и получила свое обоснование ядерная модель атома Резерфорда. Однако в предложенной модели появились противоречия с классической физикой (электродинамикой), а именно:

- 1). Если система зарядов, состоящая из электронов и ядра, неподвижна, то такая система неустойчива, на что указывала теорема Ирншоу.
- 2). Если заряды движутся в ограниченной размерами атома области, то тогда энергия тратится на излучение и электроны, теряя энергию, должны упасть на ядро.

Эти противоречия указывали на то, что в рамках классической физики такая модель не имеет места.

2.1.2. Оптические спектры атомов.

Накаленные твердые тела испускают *сплошные* спектры излучения. У газов наряду со сплошными спектрами наблюдались *линейчатые* и *полосатые* спектры. К 1900 году было в основном выяснено, что полосатые спектры происходят от излучения молекул, а линейчатые – от атомов и ионов.

Оказалось, что в атомных спектрах линии спектра расположены не хаотически, а в определенной закономерности, они объединялись в группы. Наилучшим образом эти закономерности прослеживались для атома водорода H и в меньшей степени для атомов щелочных металлов. Впервые спектр атома водорода в видимой области был измерен еще в 1862 году А. Ангстремом. Более детально изучал спектр атома водорода И. Бальмер в 1885 году и эмпирически записал простую зависимость для определения всех длин волн водородной серии (см рис. 1.5):

$$\lambda = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad (2.1.3)$$

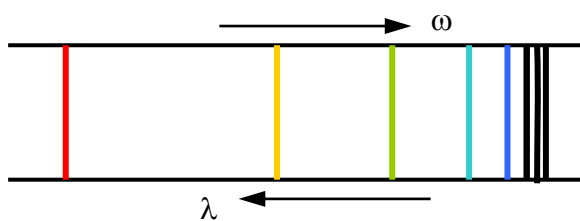


Рис. 1.5.

где λ_0 – некоторая постоянная длина волны, а параметр n принимает следующие целочисленные значения $n = 3, 4, 5, \dots$. Можно переписать эту формулу не для длин волн, а для частот линий, пользуясь соотношением $\omega = 2\pi c/\lambda$:

$$\omega = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (2.1.4)$$

Здесь $n = 3, 4, 5, \dots$, а R – постоянная И. Ридберга, которая равна

$$R = 2.07 \cdot 10^{16} \text{ рад/с.}$$

Примечание 4. Иногда вводят простую частоту, которую в спектроскопии часто измеряют в обратных сантиметрах:

$$\nu = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \text{и при этом} \quad R_H = \frac{R}{2\pi c} = 109678.76 \text{ см}^{-1}$$

Формулы (2.1.3) – (2.1.4) определяют в спектре так называемую серию линий И. Бальмера. В последующие года в спектре атома водорода были найдены другие серии. Если расположить эти серии в порядке уменьшения частоты, то получим следующую последовательность.

Серия Т. Лаймана (1906г.)

$$\omega = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \text{где } n = 2, 3, 4, 5, \dots \quad (2.1.5)$$

Серия И. Бальмера (1885г.)

$$\omega = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \text{где } n = 3, 4, 5, \dots \quad (2.1.6)$$

Серия Ф. Пашена (1908г.)

$$\omega = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \text{где } n = 4, 5, 6, \dots \quad (2.1.7)$$

Исходя из этих серий в 1908 году В. Ритц записал обобщенную формулу Бальмера:

$$\omega = R \left(\frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \text{где } n = n_0+1, n_0+2, n_0+3, \dots \quad (2.1.8)$$

Позже экспериментально были получены также последующие серии спектра атома водорода: серия Брэккета – $n_0 = 4$ (1922г.), серия А. Пфунда – $n_0 = 5$ (1924г.).

2.1.3. Боровская теория атома.

В 1913 году Нильс Бор сформулировал постулаты, с помощью которых он определил радиусы орбит и энергии электронных состояний в атоме водорода. Эти постулаты позволили объяснить наблюдаемые оптические спектры, энергетические уровни и стабильность атомов.

- 1). Электроны движутся в атоме по определенным стационарным орбитам, которые удовлетворяют определенным квантовым условиям. Электрон на этих орбитах не излучает и имеет дискретные значения энергии E_1, E_2, E_3, \dots Это стационарные орбиты.

2). При переходе из одного стационарного состояния в другое атомы испускают или поглощают излучение строго определенной частоты: $\hbar\omega = E_m - E_n$. Это так называемое правило частот Бора.

Бором были предложены правила квантования момента импульса. Для одномерного движения имеем следующее правило квантования:

$$\oint pdq = 2\pi\hbar n, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.1.9)$$

где p – обобщенный импульс, q – обобщенная координата, а интегрирование проводится по всей замкнутой орбите движения.

Яркий пример замкнутого одномерного движения – движение по круговой орбите в центральном поле. Для такого движения обобщенной координатой является угол φ , а обобщенным импульсом p – момент импульса

$$p_\varphi = mr^2\dot{\varphi} = mvr = \text{const},$$

поскольку при движении в центральном поле сохраняется момент импульса. Тогда из (2.1.9) имеем:

$$\begin{aligned} \oint p_\varphi d\varphi &= mvr \cdot 2\pi = 2\pi\hbar n \\ mvr_n &= n\hbar \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

Это правило квантования круговых орбит, радиус орбиты меняется с изменением целого числа n . Для того, чтобы определить радиусы орбит электронов в поле ядра необходимо добавить к условию квантования (2.1.10) 2-ой закон Ньютона, описывающий движение электрона в поле заряда Ze , т.е. решить систему уравнений:

$$\begin{cases} mvr_n = n\hbar \\ m\frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2} \end{cases} \quad (2.1.11)$$

Решая систему уравнений получаем радиусы круговых (Боровских) орбит:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{n^2}{Z} \quad (2.1.12)$$

Для атома водорода ($Z = 1$) радиус 1-ой Боровской орбиты определяется ($n = 1$):

$$r_1 = a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ \AA} = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ см} \quad (2.1.13)$$

Определим энергию электрона в атоме. Полная энергия электрона равна сумме кинетической и потенциальной энергий:

$$E = K + U = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} \quad (2.1.14)$$

Из второго уравнения в системе (2.1.11) выражаем кинетическую энергию $mv^2/2 = Ze^2/2r$, подставляем ее и радиус из (2.1.12) и тогда получаем набор дискретных уровней энергии:

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (2.1.15)$$

Отрицательные значения энергии говорят о связанном состоянии электрона в атоме (положительном ионе).

Для атома водорода набор уровней энергии определяется:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (2.1.16)$$

Итак, получаем бесконечное число дискретных уровней, сгущающихся к значению энергии $E = 0$ (см рис. 1.6).

Излучение и поглощение света сопровождается переходом электрона с одного уровня на другой (рис. 1.7). Энергия излученного кванта определяется разностью энергий этих уровней:

$$\hbar\omega = E_n - E_m \quad (2.1.17)$$

При этом частота излучения не связана с частотой обращения электрона вокруг орбиты, как предполагалось ранее. Пользуясь (2.1.16), для частоты излучения получаем обобщенную формулу Бальмера (2.1.8):

$$\omega = \frac{me^4}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

где постоянная Ридберга определяется через мировые константы:

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^3} \quad (2.1.18)$$

Можно определить скорость движения электрона по орбите:

$$v_n = \frac{e^2}{\hbar n} = \alpha \frac{c}{n} \quad (2.1.19)$$

где $\alpha = e^2/c\hbar \approx 1/137$ – постоянная тонкой структуры.

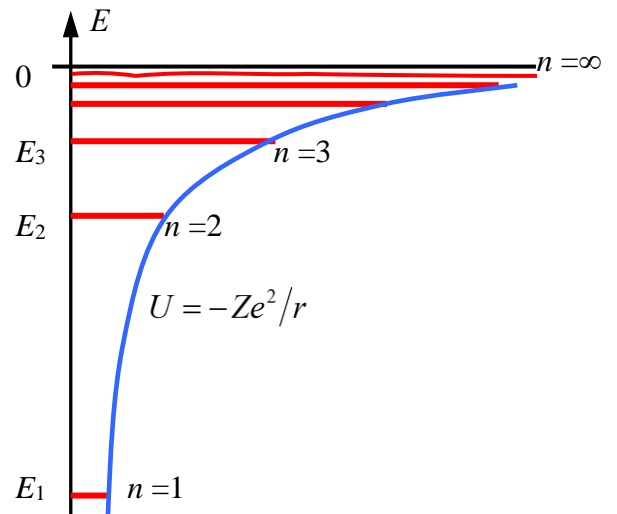


Рис. 1.6.

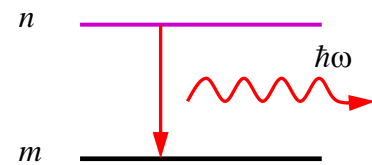


Рис. 1.7.

2.1.4. Опыты Д.Франка и Г.Герца.

Эти эксперименты были начаты Дж. Франком и Г. Герцем до выдвижения теории Бора с целью получить потенциал ионизации атомов, однако именно они привели к подтверждению постулатов Н. Бора.

Схема эксперимента представлена на рис. 1.8. Франк и Герц рассматривали прохождение ускоренных электронов через пары ртути (плотностью 1 мм рт. столба). Ускоряющая разность потенциалов $U_{СК}$ прикладывалась между катодом (К) и сеткой (С), которая менялась и измерялась вольтметром (V). Разность потенциалов между сеткой и анодом (А) – задерживающая, но малая по величине $U_{АС} = -0.5 В$.

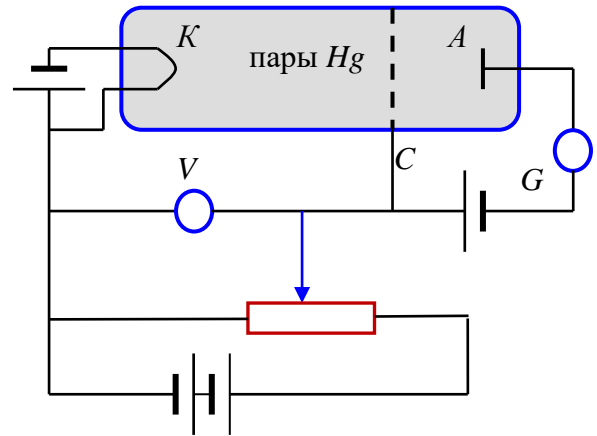


Рис. 1.8.

Быстрые электроны преодолевают задерживающий потенциал и попадают на анод и дают вклад в электронный ток (измеряемый гальванометром G). Электроны малых энергий задерживаются и не попадают на анод.

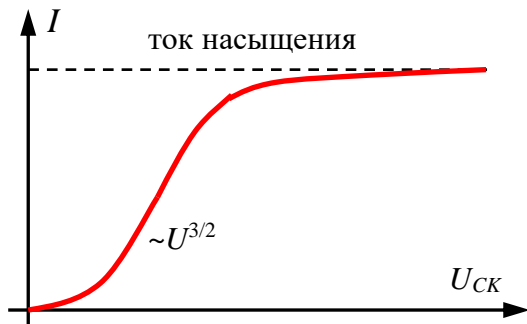


Рис. 1.9.

Если бы в баллоне был вакуум, то вольтамперная характеристика имела бы вид, изображенный на рис. 1.9. Закон $U^{3/2}$ на начальном этапе зависимости возникает из-за пространственного заряда вблизи катода.

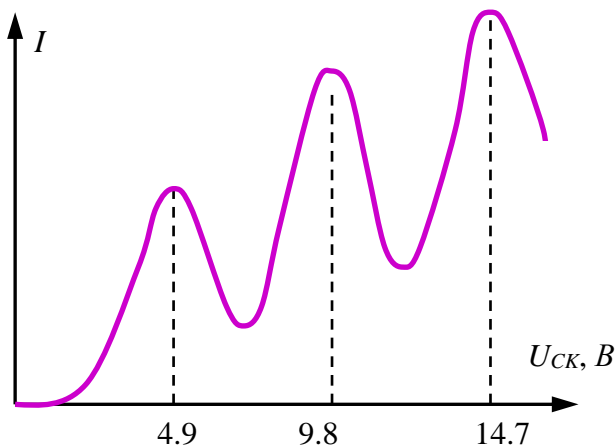


Рис. 1.10.

При наличии ртутных паров на эксперименте были получены резкие максимумы и минимумы. Примерная экспериментальная картина для зависимости тока от разности потенциалов изображена на рис. 1.10. Объяснение такой зависимости следующее: начальный рост кривой объясняется тем, что с ростом потенциала $U_{СК}$ все большее число электронов достигает анода и при этом они испытывают только упругие столкновения с атомами ртути, поскольку им не хватает кинетической энергии

на возбуждение атомов ртути. При достижении электронами энергии $E = 4.9$ эВ появляется возможность неупругого соударения с одновременным возбуждением атомов ртути. При потере этой энергии на возбуждение атомов электроны не в состоянии преодолеть задерживающий потенциал и ток падает. Дальнейший рост тока объясняется тем, что при достаточном увеличении ускоряющего потенциала электроны могут после первого неупругого столкновения и потери энергии набрать достаточную энергию, чтобы преодолеть задерживающий потенциал. Ток снова падает, когда электрон вторично набирает энергию в 4.9 эВ и снова испытывает неупругое столкновение с потерей кинетической энергии.

Эти эксперименты показали, что атомы имеют дискретную энергетическую структуру, т.е. не могут принять любую энергию, а только ту, которая соответствует разности энергетических уровней.

Примечание 5. Список имен упомянутых в этом параграфе физиков, внесших огромный вклад в развитие физики XIX-XX века:

Джон Дальтон, английский физик и химик, 1766–1844;

Амедео Авогадро, итальянский физик и химик, 1776–1856;

Йенс Якоб Берцелиус, шведский химик, 1779–1848;

Дмитрий Иванович Менделеев, русский ученый, 1834–1907, профессор Петербургского университета;

Вильгельм Конрад Рентген, немецкий физик, 1845–1923, первая Нобелевская премия в 1901г. за открытие X-лучей;

Антуан Анри Беккерель, французский физик, 1852–1908, Нобелевская премия 1903г. за открытие явления естественной радиоактивности урана;

Джозеф Джон Томсон, английский физик, 1856–1940, Нобелевская премия 1906г. за открытие электрона;

Пьер Кюри, французский физик, 1859–1906, Нобелевская премия 1903г. за исследования радиоактивности и открытие радия;

Эрнест Резерфорд, английский физик, 1871–1937, Нобелевская премия по химии 1908г. за исследования по превращению элементов;

Мария Склодовская-Кюри, польский и французский физик и химик, 1867–1934, Нобелевская премия 1903г. за исследования радиоактивности и открытие радия и 1911г. по химии за получение радия в металлическом состоянии;

Филипп Эдуард Антон Леннард, немецкий физик, 1862–1947, Нобелевская премия 1905г., “За исследование катодных лучей»;

Жан Батист Перрен, французский физик, 1870–1942, Нобелевская премия в 1926г.;

Нильс Хендрик Давид Бор, датский физик-теоретик, 1885–1962, Нобелевская премия 1922 г. за создание квантовой теории планетарного атома;

Ханс Вильгельм Гейгер, немецкий физик, 1882–1945;

Эрнест Марсден, новозеландский физик, 1889–1970;

Джеймс Франк, немецкий физик, 1882–1964, Нобелевская премия 1925г. за установление закономерностей в столкновениях электронов с атомами;

Густав Людвиг Герц, немецкий физик, 1887–1975, Нобелевская премия 1925г. за установление закономерностей в столкновениях электронов с атомами.

О физиках-оптиках:

Андерс Ионас Ангстрем, шведский физик, 1814–1874;

Йоганн Якоб Бальмер, швейцарский физик, 1825–1898;

Йоганнес Роберт Ридберг, шведский физик, 1854–1919;

Теодор Лайман, американский физик, 1874–1954;

Фридрих Пашен, немецкий физик, 1865–1947;

Вальтер Ритц, швейцарский физик - теоретик, 1878–1909;

Август Герман Пфунд, американский физик, 1879–1949.

2.2. Волны де Бройля.

2.2.1. Гипотеза де-Бройля.

В Главе 1 мы рассматривали корпускулярные свойства излучения, или иначе, как называли ранее, *дуализм* электромагнитных волн: “волна – частица”. В 1924 году Луи де Бройль выдвинул гипотезу, что *корпускулярно-волновой дуализм* не является особенностью только оптических явлений (т.е. электромагнитных волн), а носит универсальный характер. Он предположил, что материальные частицы должны проявлять волновые свойства.

К этой гипотезе его привела аналогия между геометрической оптикой и механикой Ньютона, которая еще ранее была замечена У. Гамильтоном. В самом деле, их основные законы математически представляются в одинаковой форме: движение частицы в поле с потенциалом $V(x, y, z)$ можно представить как движение световых лучей в среде с соответственно выбранным показателем преломления $n(x, y, z)$. Однако геометрическая оптика описывает далеко не все оптические явления, также как механика Ньютона – не все механические явления. Идея Луи де Бройля состояла в следующем: следует расширить аналогию механики и оптики, а именно волновой оптике сопоставить волновую механику.

Луи де Бройль перенес правила перехода от корпускулярной картины света к волновой и на частицы. Запишем эти правила перехода для волн и частиц.

| Свет (электромагнитная волна) | | Частицы (например, электроны) | |
|---|--|---|----------------------|
| Частота | ω | Энергия | E |
| Волновой вектор | \vec{k} | Импульс | $\vec{p} = m\vec{v}$ |
| Длина волны | $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi c}{\omega}$ | | |

| <i>Переход к фотонам</i> | | <i>Переход к волнам</i> | |
|--------------------------|---|-------------------------|--|
| Энергия | $E = \hbar\omega$ | Частота | $\omega = E/\hbar$ |
| Импульс | $\vec{p} = \hbar\vec{k} = \left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)$ | Длина волны | $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mv}$ |
| | | Волновой вектор | $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ |

Итак, в рамках этой гипотезы движению частицы массы m со скоростью v можно сопоставить волновой процесс с длиной волны λ , равной:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad (2.2.1)$$

где импульс p – релятивистский импульс:

$$\vec{p} = \frac{m_0\vec{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \quad (2.2.2)$$

Здесь m_0 – масса покоя, а $m = \frac{m_0}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ – релятивистская масса. Длина волны, определяемая из (2.2.1), – это *длина волны де Бройля*.

Далее продолжая сопоставление волн и частиц, можно получить волновой вектор для частицы:

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \quad (2.2.3)$$

Более того, функцию, определяющую распространение свободных монохроматических волн и движение свободных частиц можно записать аналогичным образом. Для описания монохроматической электромагнитной волны имеем следующую математическую запись

$$\psi = A \cos(\omega t - \vec{k}\vec{r})$$

или в комплексной форме

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$$

где $\psi(\vec{r}, t)$ означает либо напряженность электрического поля, либо напряженность магнитного поля.

Для свободной частицы записываем по аналогии

$$\psi = A e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})} \quad (2.2.4)$$

Проводя такую аналогию, необходимо теперь понять, каково физическое содержание функции $\psi(\vec{r}, t)$ из (2.2.4) и что она дает для описания частицы.

2.2.2. Свойства волн де-Бройля.

Определим основные свойства волн де Бройля, исходя из соотношений для обычных волн.

1). Фазовая скорость волн де Бройля определяется как обычно:

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{k}.$$

Для электромагнитных волн мы получали: $v_{\text{э/м}} = c$ или $v_{\text{э/м}} = c/\sqrt{\epsilon\mu} = c/n$. Для частиц поступаем аналогично:

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{m_0c^2}{m_0v} = \frac{c^2}{v} \quad (2.2.5)$$

где v – скорость частицы. Поскольку скорость частицы всегда меньше скорости света, то *фазовая скорость волн де Бройля всегда больше скорости света*:

$$v_{\phi} = \frac{c^2}{v} > c.$$

Это не противоречит физическому смыслу, поскольку фазовая скорость не определяет скорость распространения материального объекта (вспомним рассуждения в разделе СТО [1]).

2). Групповая скорость волн де Бройля определяется также аналогично групповой скорости электромагнитных волн. Она получалась из условия постоянства фазы амплитуды огибающей при сложении двух волн с близкими частотами и определялась из соотношения

$$v_{gp} = d\omega/dk.$$

Для частиц получаем:

$$v_{gp} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = v \quad (2.2.6)$$

что *групповая скорость волн де Бройля совпадает со скоростью самой частицы*. В самом деле, вспомним, что производная энергии по импульсу определяет скорость частицы:

$$\frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} = \frac{pc^2}{\sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2}} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{mc^2} = \frac{p}{m} = v$$

Или это же можно получить иначе

$$\frac{dE}{dp} = \frac{F ds}{dp} = \frac{dp}{dt} \frac{ds}{dp} = \frac{ds}{dt} = v$$

Произведение фазовой скорости (2.2.5) на групповую скорость (2.2.6) дает квадрат скорости света:

$$v_{gp} v_{ph} = c^2 \quad (2.2.7)$$

Отметим, что физический смысл волн де Бройля был понят не сразу. На основании факта, что групповая скорость равна скорости частицы, некоторое время частицу считали образованием волн де Бройля. Иначе говоря, считали, что волны первичны, а частицы представляют собой их образования – пакеты волн. Однако оказалось, что не так все просто: при такой интерпретации и подобном описании появляются явные противоречия. Приведем некоторые противоречия и следствия из такой интерпретации.

А). Фазовая скорость волн де Бройля зависит от скорости частицы v , т.е. зависит от волнового числа k или длины волны λ . Поскольку пакет волн – это суперпозиция монохроматических волн с различными λ , то волны де Бройля испытывают дисперсию в пустоте. Из-за этого пакет волн де Бройля расплывается с течением времени. Однако мы знаем из опыта, что частицы живут весьма долго, не расплываются и детектируются на эксперименте как частицы определенных размеров. Позже к дисперсии волн де Бройля мы вернемся позже, когда будем говорить о соотношении неопределенностей.

Б). Если считать частицы волнами де Бройля, то тогда они должны испытывать дифракцию. Их можно пустить на дифракционную решетку (или кристалл) и разложить волновой пакет на составляющие его волны, что приводит к уничтожению частицы. Это также противоречит опыту.

В дальнейшем обсудим интерпретацию и смысл волн де Бройля и разрешим эти противоречия.

3). Интересна связь между волнами де Бройля и стационарными орбитами. Из условия квантования Бора для круговых орбит (2.1.10) можно найти связь между стационарными орбитами и длинами волн де Бройля. В самом деле, имеем:

$$r = \frac{n\hbar}{mv} = \frac{n}{2\pi} \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{n}{2\pi} \lambda, \quad (2.2.8)$$

$$2\pi r = n\lambda$$

Последнее равенство означает, что на длине окружности орбиты укладывается целое число длин волн де Бройля, т.е. получаем стоячую волну на электронной орбите, которая не переносит и не излучает энергию. Таким образом, получаем красивую **интерпретацию стационарных состояний** в

атомах: им соответствует образование стоячих волн де Бройля, в которых, как известно, энергия не излучается.

Примечание 1. Луи де Бройль, французский физик-теоретик, 1892–1987, Нобелевская премия 1929 г. за открытие волновой природы электрона;
Уильям Роуан Гамильтон, ирландский физик и математик, 1805–1865

2.3. Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля.

2.3.1. Длина волны электрона.

Все, о чем говорилось в предыдущем параграфе, остается только предположениями, поскольку доказательством существования таких волн может служить только эксперимент. Самые яркие явления, характеризующие существование и распространение волны, – это явления интерференции и дифракции, в которых наблюдаемой величиной по сути дела является длина волны λ . Впервые такие эксперименты по исследованию волновых свойств частиц были поставлены с электронами, а позже и для других, более тяжелых частиц.

Оценим возможные значения длины волн де Бройля в реальных условиях. Пусть электроны разгоняются в вакуумной трубке и проходят некоторую разность потенциалов U , причем ограничимся нерелятивистским случаем. Тогда кинетическая энергия электрона равна $E = eU = \frac{1}{2}mv^2$, а импульс – $p = \sqrt{2meU}$. Такой электрон обладает длиной волны де Бройля равной:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}} \quad (2.3.1)$$

Если длину волны измерять в Ангстремах, а разность потенциалов в Вольтах, то формула (2.3.1) приобретает вид:

$$\lambda = \frac{12.25}{\sqrt{U}} \quad (2.3.2)$$

Итак, если электрон прошел разность потенциалов $U = 10 \text{ В}$, то его длина волны $\lambda \approx 3.9 \text{ \AA}$. Если $U = 100 \text{ В}$, то $\lambda \approx 1.2 \text{ \AA}$, и если $U = 200 \text{ В}$, то $\lambda \approx 0.86 \text{ \AA}$. При таких условиях длины волн электронов примерно такие же как длины волн рентгеновского излучения. Поэтому эксперимент по дифракции таких электронов можно ставить в тех же условиях, как для рентгеновских лучей, и использовать в качестве дифракционной решетки – кристалл.

Учитывать релятивистский характер движения электронов необходимо, начиная с разности потенциалов $U = 10^5 \div 10^6$ Вольт. В самом деле, при этом длина волны де Бройля определяется

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{m_0 v} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}, \quad (2.3.3)$$

а кинетическая энергия электрона равна

$$eU = m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right) = \left(\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2 \right).$$

Из этих соотношений можно получить точную формулу для длины волны де Бройля:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 eU (1 + eU/2m_0 c^2)}}, \quad (2.3.4)$$

а затем и приближенную формулу для определения длины волны (U в Вольтах, λ в Ангстремах):

$$\lambda = \frac{12.25}{\sqrt{U}} (1 - 0.489 \cdot 10^{-6} U)$$

В таблице сравниваются длины волн электрона, полученные в нерелятивистском и релятивистском приближениях для различных ускоряющих разностей потенциалов U .

| U (Вольт) | 1 | 100 | 10^3 | $4 \cdot 10^4$ | 10^5 | 10^6 |
|------------------------|-------|-------|--------|----------------|--------|--------|
| λ (нерел.) (Å) | 12.25 | 1.225 | 0.39 | 0.061 | 0.039 | 0.012 |
| λ (рел.) (Å) | | | 0.39 | 0.059 | 0.037 | 0.008 |

Из этой таблицы видно, при каких ускоряющих потенциалах для электронов необходимо учитывать релятивистские эффекты.

2.3.2. Опыты Девиссона и Джермера по дифракции электронных волн.

Еще в 1921-23 гг. К. Дэвиссон наблюдал при рассеянии пучка электронов на различные углы явление похожее на дифракцию, но тогда эти особенности не получили должного внимания и объяснения. Позже К. Дэвиссон и Л. Джермер использовали метод Вульфа-Брэгга для исследования *дифракции электронов*.

Примерная схема эксперимента изображена на рис. 3.1.

Параллельный пучок электронов одинаковой скорости направлялся на монокристалл никеля Ni, а рассеянные электроны фиксировались коллектором (цилиндр Фарадея) под разными углами. Фиксировались в основном упруго

отраженные электроны, неупруго рассеянные отсекались слабо отрицательным задерживающим потенциалом.

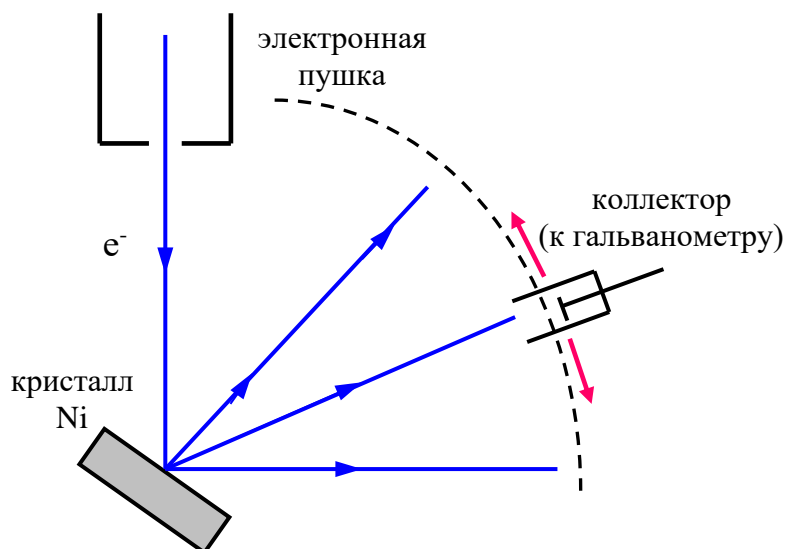


Рис. 3.1.

При разных ускоряющих потенциалах U были получены угловые зависимости – полярные диаграммы (см рис. 3.2). На этих диаграммах сила тока в гальванометре пропорциональна отрезку прямой, соединяющей в диаграмме

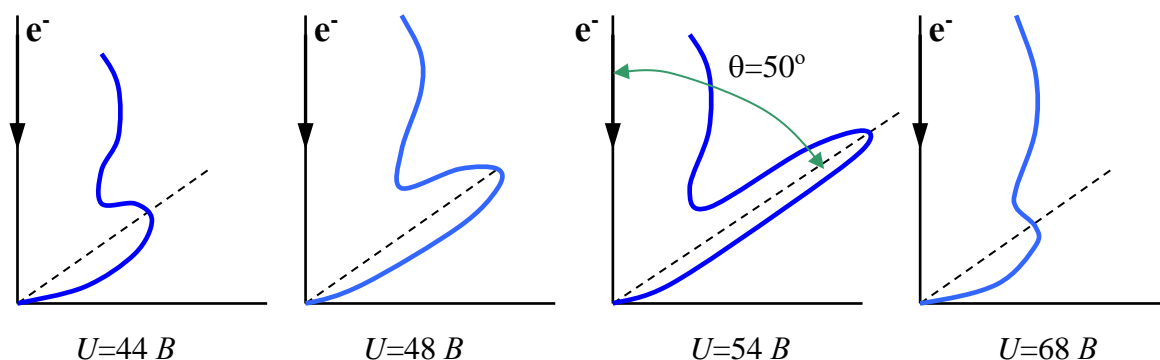


Рис. 3.2.

начало координат и точку на измеренной кривой. Наблюдалось различное количество рассеянных электронов в зависимости от угла рассеяния θ и от ускоряющей разности потенциалов U . При этом при определенном угле появлялся максимум в угловом распределении, величина которого менялась с изменением U , т.е. с длиной волны де Бройля.

Монокристалл никеля – это кристалл кубической системы, он был отшлифован вдоль плоскости с миллеровскими индексами (111). Пучок электронов падал перпендикулярно к этой плоскости, однако в методе Вульфа-Брэгга используется отражение от различных слоев кристалла. Так, в объеме кристалла никеля находились отражающие слои на расстоянии d ($=0.215\text{ нм}$) друг от друга (см рис. 3.3). Максимум отражения электронов

наблюдался под углом 50° (наиболее сильно выражено при ускоряющем потенциале $U = 54 \text{ В}$). Условие появления этого максимума определяется формулой Вульфа-Брэгга:

$$2d \sin \varphi = m\lambda, \quad (m = 1, 2, 3, \dots) \quad (2.3.5)$$

где φ – угол скольжения пучка. Так как длина волны де Бройля определяется из формулы (2.3.2), то, подставляя ее в (2.3.5), получаем соотношение (где d и λ в Ангстремах, U в Вольтах):

$$\sqrt{U} = m \frac{12.25}{2d \sin \varphi} \quad (2.3.6)$$

Из этого соотношения видно, что дифракцию электронов можно наблюдать двумя способами.

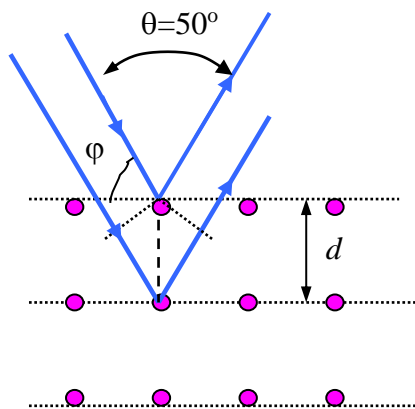


Рис. 3.3.

Способ (1): ускоряющую разность потенциалов U и длину волны λ держать постоянными, а менять угол φ , поворачивая кристалл или коллектор.

Способ (2): держать постоянным угол скольжения φ , а менять разность потенциалов U или, что то же, длину волны де Бройля λ .

Во втором случае полученные кривые имеют несколько максимумов, которые соответствуют различным значениям m в формуле Вульфа – Брэгга (см рис. 3.4). Теория дает равноотстоящие максимумы, что следует из

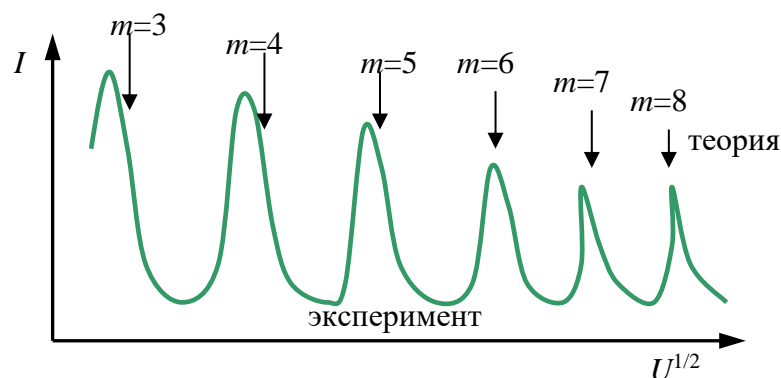


Рис. 3.4.

формулы (2.3.6). Если на этом же рисунке 3.4 отложить вычисленные по формуле (2.3.6) значения числа m , то для малых величин m получаются систематические отклонения расчетных значений m от экспериментальных положений максимумов.

Причина этого отклонения была объяснена и затем устранена Г.Бете. Для согласования с экспериментом электронным волнам необходимо приписать показатель преломления, как и в интерференции световых волн:

$$n = \frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{v_\phi}{v'_\phi} = \frac{\cos \varphi}{\cos \varphi'} \quad (2.3.7)$$

где λ , λ' и v_ϕ , v'_ϕ – длины волн и фазовая скорость в вакууме и внутри кристалла, соответственно. Фазовая скорость в вакууме определяется:

$$v_\phi = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2mE_k}} \quad (2.3.8)$$

Здесь рассматриваем нерелятивистский случай $E_k = \frac{1}{2}mv^2$.

Энергетическая диаграмма при прохождении электрона в металле представлена на рис. 3.5, где E_F – энергия Ферми, A – работа выхода, W_0 – глубина потенциальной ямы ($W_0 < 0$). Откуда фазовая скорость в металле определяется из соотношения:

$$v'_\phi = \frac{E}{\sqrt{2m(E_k - W_0)}}, \quad (2.3.9)$$

Тогда коэффициент преломления равен:

$$n = \frac{v_\phi}{v'_\phi} = \sqrt{1 - \frac{W_0}{E_k}} \quad (2.3.10)$$

Если ввести внутренний потенциал металла U_0 как

$$U_0 = -W_0/e,$$

а кинетическую энергию записать через ускоряющую разность потенциалов $E_k = eU$, то для относительного показателя преломления получаем:

$$n = \sqrt{1 + \frac{U_0}{U}}, \quad (2.3.11)$$

Показатель больше единицы ($n > 1$). Тогда разность хода, определяемая условием Вульфа–Брэгга, становится аналогичной разности хода оптического луча для тонкой пленки $2d\sqrt{n^2 - \sin^2 \theta} = m\lambda$, где θ – угол падения луча (см рис. 3.6). В самом

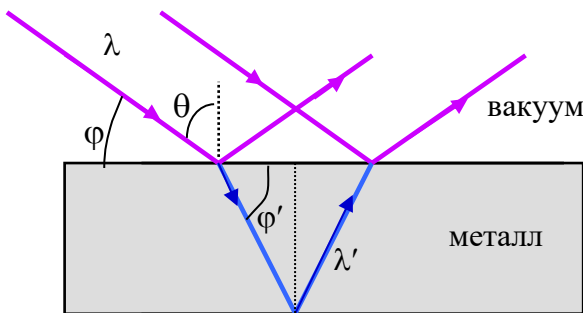


Рис. 3.6.

деле, подставляя угол скольжения, имеем:

$$2d\sqrt{n^2 - \cos^2 \varphi} = m\lambda \quad (2.3.12)$$

После учета показателя преломления в среде для волн де Бройля было получено полное согласие с экспериментом. Из экспериментов по дифракции электронов можно получить внутренний потенциал металлов U_0 .

2.3.3. Опыты Томсона и Тартаковского.

Начиная с 1928 года Д.П. Томсоном и независимо П.С. Тартаковским проводились измерения дифракции электронов методом Дебая - Шерера. Ранее П. Дебай и П. Шеррер разработали методику для получения дифракции рентгеновских лучей.

В методе Дебая - Шерера Томсон использовал поликристаллические пленки (толщиной $10^{-5} \div 10^{-6}$ см) или порошки. Монохроматический пучок электронов создавался при ускорении электростатическим потенциалом $U \sim 17.5 \div 56.5$ кВ, при этом соответствующие длины волн де Бройля находятся в диапазоне $\lambda \sim 0.092 \div 0.052$ нм. Электроны проходили через пленку, рассеивались и попадали на фотопластинку (рис. 3.7). Поликристалл –

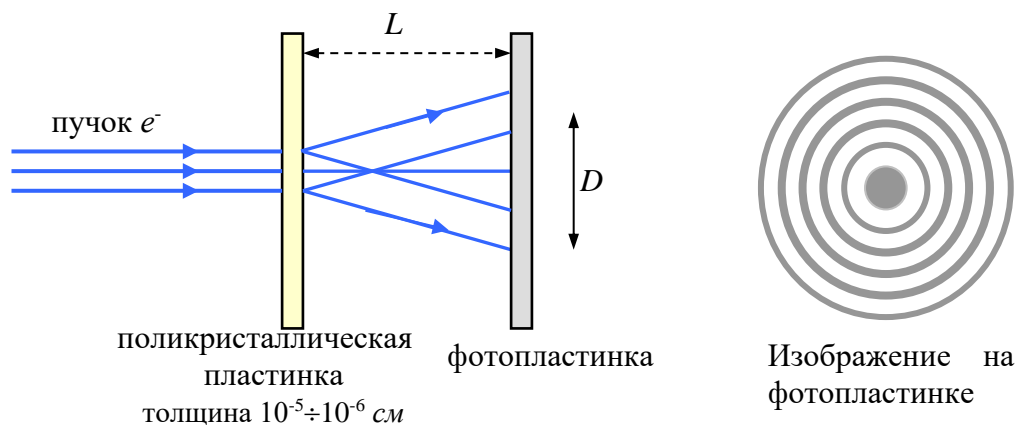


Рис. 3.7.

множество беспорядочно ориентированных кристалликов. При фиксированной длине волны λ среди множества кристалликов находятся такие, при отражении от которых выполняется условие Вульфа–Брэгга

$$2d \sin \varphi = m\lambda .$$

Здесь, как и ранее, φ – угол скольжения пучка. Совокупность малых кристалликов с определенной ориентировкой симметрична относительно направления падающего пучка, вследствие этого на экране наблюдаются кольца. Зная диаметр колец D и расстояние до экрана L можно найти расстояние между слоями кристаллической решетки d :

$$d \cdot \frac{D}{2L} = m\lambda \quad (2.3.13)$$

Эксперимент показал ожидаемую дифракционную картину, что независимо подтвердило существование волновых свойств электрона.

Тартаковский рассматривал рассеяние более медленных электронов на алюминиевой фольге при постоянном угле рассеяния. Меняя скорость электронов, он получил ряд максимумов, появляющихся при выполнении условия Вульфа-Брэгга.

2.3.4. Дифракция атомов и молекул, нейтронов.

Частицы более тяжелые, чем электроны, также обладают волновыми свойствами, которые характеризуются определенными длинами волн де Бройля. Следовательно, можно попытаться наблюдать их дифракцию.

О. Штерн в 1930 году наблюдал *дифракцию легких атомов и молекул*, а именно He и H₂. Легкие атомы и молекулы нужны для того, чтобы их длина волны де Бройля была достаточно велика для наблюдения явления дифракции. Так при комнатной температуре длина волны атома гелия равна $\lambda_{He} \sim 0.1$ нм, т.е. порядка постоянной кристаллической решетки.

Схема опыта показана на рис. 3.8. Пучок атомов бросается на кристалл, и отраженные атомы фиксируются чувствительным манометром. Чтобы избавиться от теплового разброса скоростей используется селектор скоростей (зубчатое колесо, как в оптических экспериментах Физо).

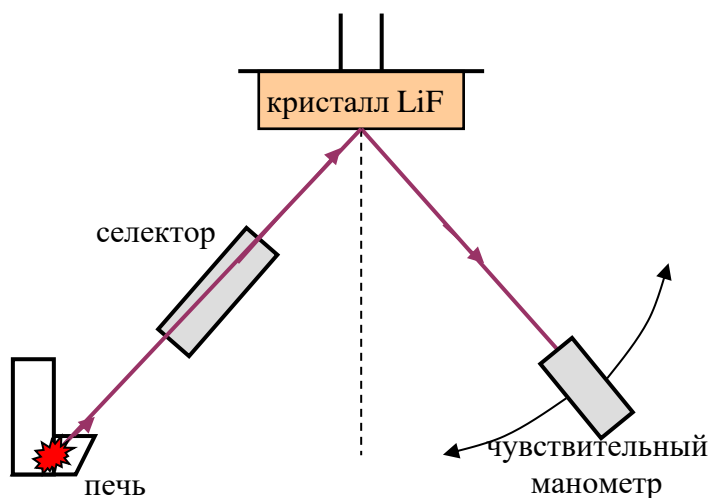


Рис. 3.8.

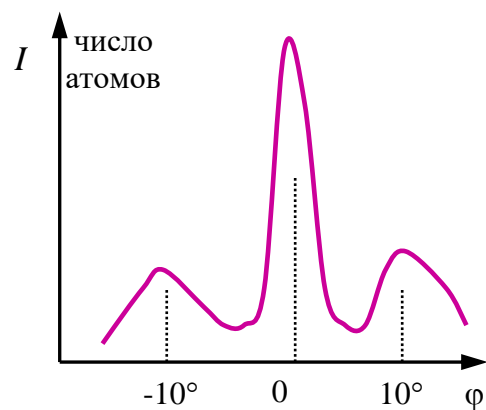


Рис. 3.9.

Кристалл действует на пучки атомов как плоская двумерная отражательная решетка. В картине углового распределения дифрагированных атомов наблюдается большой максимум под углом отражения, равным углу падения, а при других углах — вторичные максимумы (см рис. 3.9). Отметим, что положение вторичных максимумов меняется с температурой падающих атомов, т.е. с длиной волны λ .

Дифракция нейтронов в настоящее время используется для целей рентгеноструктурного анализа вещества. Для наблюдения дифракции нейтронов чаще всего используется метод М. Лауэ, хотя дифракция может наблюдаться и в методах Вульфа - Брэгга, Дебая – Шеррера.

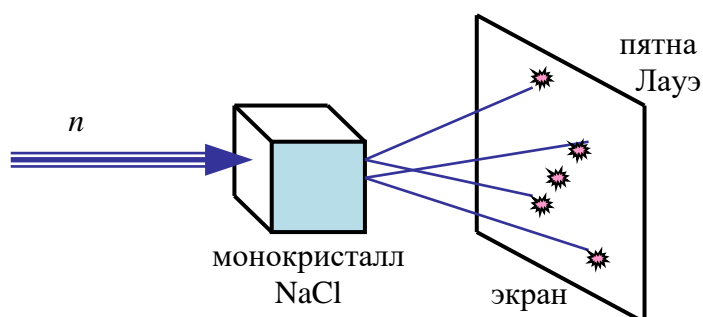


Рис. 3.10.

Для регистрации нейтронов используются ядерные реакции. В методе Лауэ в качестве налетающих частиц используется “белый” пучок тепловых нейтронов, который падает на монокристалл. На экране за монокристаллом (рис. 3.10) проявляются дифракционные

максимумы в виде пятен Лауэ: центральное пятно и система симметричных пятен вокруг центрального.

Итак, можно сделать вывод, что явление дифракции имеет всеобщий характер, т.е. волновые свойства присуще всем материальным объектам.

Примечание 1.

Клинтон Джозеф Дэвиссон, американский физик, 1881–1958, Нобелевская премия 1937 г. за экспериментальное подтверждение волновых свойств материи;

Лестер Халберт Джермер, американский физик, 1896–1971;

Георгий Викторович Вульф, русский-советский физик, 1863–1925;

Лоуренс Брэгг, английский физик, 1890–1971, Нобелевская премия 1915г.;

Ханс Альбрехт Бете, немецкий и американский физик-теоретик, 1906–2005, Нобелевская премия 1967г. за открытие циклов термоядерных реакций, являющихся источником энергии звезд;

Джордж Паджет Томсон, английский физик, 1892–1975, Нобелевская премия 1937г. за открытие волновой природы электрона;

Петер Йозеф Вильгельм Дебай, швейцарско-немецкий физик, 1884–1966, Нобелевская премия по химии 1936г.;

Пауль Шерер, швейцарский физик, 1890–1970;

Тартаковский Петр Саввич, советский физик 1895-1940, работал в ФТИ, в Томске, в ЛПИ;

Отто Штерн, немецкий физик, 1888–1969, Нобелевская премия 1943г. за развитие молекулярно-лучевого метода и открытие магнитного момента протона;

Макс Феликс Теодор фон Лауэ, немецкий физик-теоретик, 1879–1960, Нобелевская премия 1914г. за открытие дифракции рентгеновских лучей;

2.4. Статистическое толкование волн де Бройля и соотношение неопределенностей.

2.4.1. Волны вероятности.

В §2.2 отмечалось, что из равенства групповой скорости волн де Бройля и скорости частицы, было заманчиво предполагать, что частица – это волновые образования, т.е. пакет волн де Бройля. Однако от этого положения довольно быстро отказались, поскольку такая “частица” получается нестабильной и за время порядка 10^{-24} секунды расплывается из-за дисперсии волн де Бройля в вакууме. Кроме того, в результате интерференции и дифракции волн такие частицы должны также делиться или разрушаться.

Что же такое представляют собой волны де Бройля, описываемые функцией $\psi(\vec{r}, t)$?

Рассмотрим интерференционный опыт (см рис. 4.1): пучок электронов направляется на экран с двумя щелями. На некотором расстоянии от щелей на другом экране измеряется число электронов, попавших в различные точки экрана. Пучок может быть такой малой интенсивности, что электроны летят и падают на экран со щелями поочередно. Это делалось для того, чтобы понять обладает ли единичный электрон волновыми свойствами.

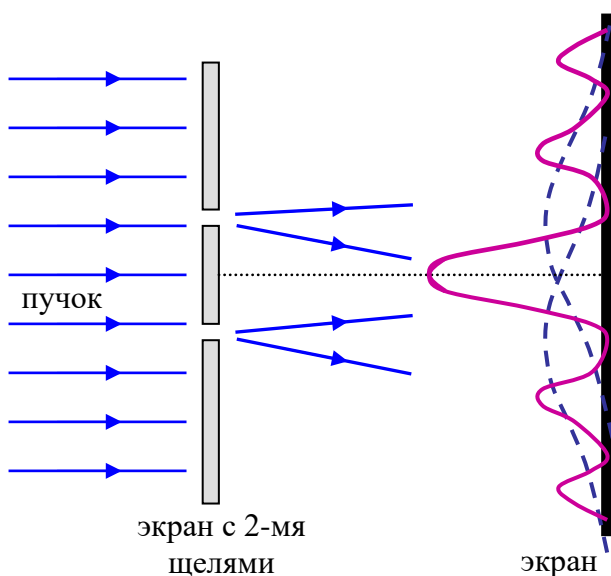


Рис. 4.1.

Прямые измерения с “единичными” электронами – пучками малой интенсивности – были проведены в 1949 г. Л.М. Биберманом, Н.Г Сушкиным и В.А. Фабрикантом: пучок электронов слабой интенсивности направлялся на дифрагирующий объект. В качестве последнего брались кристаллики окиси магния, нанесённые на коллоидную плёнку. С помощью таких кристаллов получали дифракционную картину. Есть сведения, что эти же авторы проводили также эксперименты по дифракции слабого пучка электронов на двух щелях и также

получили дифракцию. (Однако часть физиков не признает достоверность измерений, проведенных этими авторами).

В 1961 г. эксперименты по дифракции электронов на двух щелях были проведены Йёнсенсом, а еще позже была получена дифракционная картина от

одной до пяти щелей (см публикацию [C. Jönsson, D. Brandt, S. Hirschi. Electron diffraction at multiple slits. // Am. J. Phys., v. 42, 1974, p. 4-11](#)).

Существовавшая ранее точка зрения, что волновые свойства проявляются и существуют в среде с большим числом частиц (электронов), оказалась неверной. Оказалось, что даже единичные электроны, когда взаимодействие между электронами не играет никакой роли, дают интерференционную картину. Отсюда следует вывод: *отдельные электроны обладают волновыми свойствами*.

Если закрывать одну или другую щель, то получаем на экране расширенное изображение щели – пунктир на рисунке 4.1. Но когда падают одиночные электроны на обе открытые щели, то получаем интерференционную картину.

Однако электрон не делится: он проходит либо через одну, либо через другую щель. Если поставим счетчик на фиксирующем экране, то он “срабатывает” в определенном месте от “целого” электрона и никакой интерференции не увидим. Просто следующий электрон будет зафиксирован в другом месте, за ним другой снова в другом месте и т.д. И там, где амплитуда волнового поля максимальна, там чаще будут регистрироваться электроны, там вероятность нахождения электрона максимальна. Иногда говорят, что как и в случае фотона, электрон интерферирует сам с собой, если не фиксировать его пролет через определенную щель.

Вероятность всегда связывают с квадратом модуля амплитуды волны $|A|^2$. Сама амплитуда имеет различные знаки (плюс-минус) и она является неудобной характеристикой для описания интенсивности поля.

Исходя из этого, М. Борном была предложена статистическая интерпретация волн де Бройля. Волны де Бройля следует рассматривать как волны вероятности:

Интенсивность волн де Бройля в данный момент времени и в данном месте определяет вероятность обнаружить частицу в данное время и в данном месте. А интенсивность волн пропорциональна квадрату амплитуды.

Но статистические свойства частицы могут быть проверены на опыте не с одной частицей, а лишь со многими частицами (или с одной, если он может быть повторен многократно). То есть могут быть проверены при использовании “квантового ансамбля” – большого числа тождественных частиц.

Итак, при прохождении щелей однозначно предсказать, куда попадет электрон, невозможно. Можно лишь определить вероятность этого попадания. Пусть $\psi(\vec{r}, t)$ дает амплитуду волн де Бройля или, иначе говоря, $\psi(\vec{r}, t)$ –

волновая функция, описывающая поведение частицы. Для свободной частицы мы ее уже знаем – это плоская волна:

$$\psi(\vec{r}, t) = A \cdot \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})\right\} \quad (2.4.1)$$

Вероятность обнаружить частицу в какой-либо точке пространства \vec{r} и в момент времени t равна:

$$W \sim |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^* \psi \quad (2.4.2)$$

Для свободной частицы получаем вероятность, не зависящую от координат и времени $W \sim |A|^2$, т.е. в любом месте пространства нахождение частицы равновероятно.

Если частица находится в силовом поле, то волновая функция частицы $\psi(\vec{r}, t)$ не есть плоская волна, однако и в этом случае волновая функция дает амплитуду вероятности, причем можно записать $dW \sim |\psi(\vec{r}, t)|^2$ или более точно:

$$dW(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV, \quad (2.4.3)$$

где dW – вероятность обнаружить частицу в элементе объема dV . Плотность вероятности записывается обычным образом:

$$w = \frac{dW}{dV} = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (2.4.4)$$

Сама волновая функция – ненаблюдаемая величина, она рассматривается как вспомогательная величина. Физический смысл связывается с квадратом ее модуля: $\psi^* \psi$.

Если частица существует, то где-то она с достоверностью находится, следовательно, должно выполняться условие нормировки:

$$\int dW = \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \quad (2.4.5)$$

Отметим, что в некоторых случаях такая нормировка невозможна, например, как в случае свободной частицы. В этом случае волновые функции нормируют другим способом.

Примечание 1.

Валентин Александрович Фабрикант, советский физик, 1907–1991;

Леонид Михайлович Биберман, советский и российский физик, член-корреспондент РАН, 1915–1998;

Николай Гаврилович Сушкин, советский и российский физик-изобретатель, 1911;

Макс Борн, немецкий физик-теоретик, 1882–1970, Нобелевская премия 1954 г. за статистическую интерпретацию волновой функции.

2.4.2. Соотношение неопределенностей.

В 1927 году В. Гейзенбергом было получено соотношение неопределенностей.

Свободная частица – нелокализованная частица, ее волновая функция определяется формулой (2.4.1) и плотность вероятности равна постоянной величине $|A|^2$. Частицу можно локализовать, если описывать ее пакетом волн. Рассмотрим волновой пакет частицы, локализованной по оси x , при этом амплитуда отлична от 0 на отрезке Δx (см рис. 4.2):

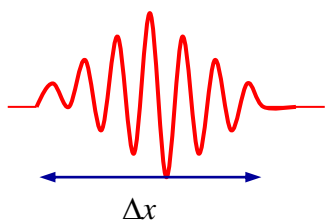


Рис. 4.2.

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} a(k) \cos\{\omega(k)t - kx\} dk \quad (2.4.6)$$

Соотношение (2.4.6) представляет собой разложение локализованной функции по волнам с определенной частотой. Итак, локализация частицы описывается пакетом или суперпозицией волн де Бройля.

Вспомним, что, изучая оптику ([4], см Глава 1, §1.8), для пакета волн мы получали следующее соотношение неопределенностей:

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq 1 \quad (2.4.7)$$

или

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq 2\pi$$

Здесь Δx – ширина пакета, а Δk – разброс волновых чисел тех волн, суперпозиция которых образует данный пакет. Пример с цугом волны и выводом соотношения неопределенностей был ранее разобран в указанном выше разделе Оптика [4], еще один подобный пример приведен ниже в Приложении 1.

Тогда для волнового пакета частицы, умножая (2.4.7) на постоянную Планка \hbar , получаем соотношение неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar, \quad (2.4.8)$$

где Δx – неопределенность координаты частицы, Δp_x – неопределенность проекции импульса на ось x . Их произведение не может быть меньше постоянной Планка \hbar . При рассмотрении конкретных примеров в правой части неравенства (2.4.8) могут стоять различные значения, такие как $\hbar = 2\pi\hbar$, $4\pi\hbar$ и т.д. Это зависит от того, как определяем величины неопределенностей Δx и Δp_x . Физически это означает, что *чем точнее пытаемся определить положение (координату) микрочастицы, тем менее определенным является ее импульс и наоборот.*

Однако если под неопределенностью понимать строгое определение ее как среднеквадратичные отклонения физических величин от их среднего значения, т.е. следующие определения

$$\begin{aligned}\Delta x &= \sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle} = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}, \\ \Delta p &= \sqrt{\langle \Delta p^2 \rangle} = \sqrt{\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle},\end{aligned}\quad (2.4.9)$$

тогда соотношения неопределенностей принимают вид:

$$\begin{aligned}\Delta p_x \Delta x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta p_y \Delta y &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta p_z \Delta z &\geq \frac{\hbar}{2}\end{aligned}\quad (2.4.10)$$

Итак, существует предел в точности одновременного измерения координаты и соответствующей компоненты импульса. Таким образом, *нет понятия траектории частицы*, и это есть следствие особой природы частиц микромира (корпускулярно-волновой дуализм). Отметим, что в то же время можно измерить одновременно и с любой точностью координату x , например, и перпендикулярную компоненту импульса p_y (или p_z), т.е. формально можно записать

$$\Delta x \Delta p_y \geq 0$$

Известно, что x и p_x *канонически сопряженные величины*, так же как и соответствующие пары по другим осям: $y \leftrightarrow p_y$ и $z \leftrightarrow p_z$. Кроме них имеются и другие канонически сопряженные величины, например: $(E \leftrightarrow t)$ – энергия и время, $(\varphi \leftrightarrow L_z)$ – угол и соответствующая проекция момента импульса. Оказывается, что соотношение неопределенностей всегда верно для любой пары канонически сопряженных (дополнительных друг другу) величин. Так, например, если имеем пару канонически сопряженных величин $(A \leftrightarrow B)$, тогда произведение неопределенностей значений двух сопряженных переменных не может быть меньше $\hbar/2$:

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \hbar/2 \quad (2.4.11)$$

Так как энергия и время являются тоже канонически сопряженными величинами, то имеем еще одно соотношение неопределенностей:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2 \quad (2.4.12)$$

Соотношение (2.4.12) имеет более сложное физическое содержание из-за того, что имеются как стационарные, т.е. постоянные во времени, состояния, так и нестационарные состояния, время жизни которых конечно.

1). Если частица находится *в стационарном состоянии*, то определение энергии с точностью ΔE должно *занять время, по меньшей мере* $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$. Т.е. здесь имеем дело с процессом измерения или наблюдения стационарного состояния: чем меньше время наблюдения, тем меньше точность определения энергии.

2). Если система (или частица) находится в нестационарном состоянии, например в возбужденном состоянии, то получаем следующую интерпретацию соотношения (2.4.12): неопределенность энергии ΔE соответствует разбросу энергии этого состояния, иначе, его энергетической ширине, а неопределенность времени $\Delta t = \tau$ – времени жизни этого нестационарного возбужденного состояния.

Из соотношений неопределенностей следует важный вывод: при абсолютном нуле температуры $T = 0$ движение все равно не прекращается, поскольку всегда $\Delta p \neq 0$. Движение при абсолютном нуле температуры – это «нулевое» движение.

Примечание 2. Вернер Карл Гейзенберг, немецкий физик-теоретик, 1901–1976, Нобелевская премия 1932 г. за создание матричной квантовой механики.

Примечание 3. В волновой теории получали аналогичное соотношение для разброса частоты и длительностью импульса $\Delta\omega \cdot \Delta t \geq 1$. С другой стороны (2.4.12) можно получить из (2.4.10) с помощью следующих простых рассуждений:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x = p_x \Delta p_x \cdot \frac{\Delta x}{p_x} = \frac{p_x \Delta p_x}{m} \frac{\Delta x}{v_x} = \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Соотношение (2.4.12) позволяет говорить о виртуальных состояниях и возбуждениях. Система за короткое время существования имеет большой разброс в энергии и может бывать во всех энергетических состояниях, т.е. состояниях с любой энергией. Это не реальные возбуждения, это состояния “временные”, связанные с временным нарушением закона сохранения энергии.

2.4.3. Примеры и выводы.

Рассмотрим несколько примеров, которые иллюстрируют волновые свойства частиц и в которых проявляются соотношения неопределенностей.

Пример 1. На щель размером Δx , изображенной на рис. 4.3, падает пучок электронов определенной энергии и импульса. До щели электрон описывается плоской монохроматической волной де Бройля с определенным значением проекции поперечного импульса $p_x = 0$, при этом его x -ая координата не определена (любая величина). После прохождения щели

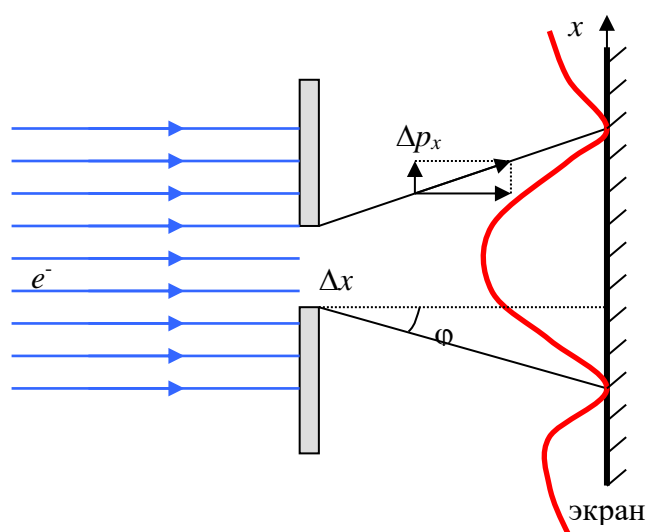


Рис. 4.3.

получаем, что координата прошедшего электрона известна с точностью до Δx – ширины щели. Определим границы дифракционного максимума, т.е. расстояние между ближайшими минимумами. Условие первого минимума (условие минимумов в дифракции Фраунгофера на щели получали в Разделе Оптика §2.5):

$$\Delta x \cdot \sin \varphi = \lambda$$

Но при этом p_x изменяется вследствие дифракции волн де Бройля на щели:

$$\Delta p_x = p \cdot \sin \varphi = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \sin \varphi \quad (2.4.13)$$

Тогда получаем соотношение неопределенностей в виде:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \sin \varphi \cdot \frac{\lambda}{\sin \varphi} = 2\pi\hbar > \frac{\hbar}{2} \quad (2.4.14)$$

Пример 2. Рассмотрим мысленный опыт В. Гейзенберга об измерении координаты электрона. Чтобы определить положение электрона, нужно его осветить, т.е. послать фотон и «поймать» рассеянный фотон. Тогда неопределенность в измерении координаты порядка длины волны используемого света $\Delta x \sim \lambda$. При взаимодействии с электроном свет передает ему импульс. Чтобы уменьшить передаваемый импульс можно ослабить интенсивность света так, чтобы с электроном взаимодействовал один фотон. Передаваемый электрону импульс будет порядка импульса кванта: $\Delta p \sim p = 2\pi\hbar/\lambda$. Тогда снова получаем произведение "неточностей" в измерении, удовлетворяющее соотношению неопределенностей:

$$\Delta p \cdot \Delta x = p \cdot \lambda = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \cdot \lambda \sim 2\pi\hbar \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.4.15)$$

Какие основные выводы следуют из этого параграфа?

1. Принципиально (т.е. независимо от способа измерения) существует граница в точности одновременного измерения сопряженных переменных. Отсюда следует: *движение при абсолютном нуле температуры существует*. Состояния, в котором частица находится в полном покое, не существует.
2. Понятие *“траектории частицы”* не существует. Однако понятие траектории можно вводить в зависимости от степени необходимой точности измерения. В самом деле, перепишем соотношение неопределенностей в виде:

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m}$$

Откуда видно, что чем больше масса частицы, тем точнее можно использовать понятие траектории. В связи с этим утверждением рассмотрим некоторые примеры.

а). Рассмотрим рентгеновскую трубку или телеэкран, на котором фиксируются падающие электроны. Оценим разброс координаты появления электрона на экране: скорость электрона $v_e \sim 10^7 \text{ см/с}$, разброс скоростей $\Delta v_x \sim 10^4 \text{ см/с}$, тогда получаем неопределенность координаты электрона ($\hbar = 1.054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг}\cdot\text{с}$, $m = 0.9 \cdot 10^{-27} \text{ г}$)

$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{m\Delta v_x} \sim \frac{1.05 \cdot 10^{-27}}{10^4 \cdot 0.9 \cdot 10^{-27}} \sim 10^{-4} \text{ см}$$

т.е. положение электрона на экране фиксируется с хорошей точностью.

б). Рассмотрим электрон, находящийся в атоме (атом Бора). Скорость электрона в атоме $v_e \sim 10^8 \text{ см/с}$. Размеры атома определяют неопределенность координаты электрона $\Delta x \sim 10^{-8} \text{ см}$. Тогда из соотношения неопределенностей для неопределенности скорости электрона имеем

$$\Delta v_e \sim \frac{\hbar}{m \cdot \Delta x} \sim 10^8 \text{ см/с} \sim v_e.$$

Итак, получаем, что скорость электрона на орбите по порядку величины совпадает с ее неопределенностью. Таким образом, строго говоря, в атоме нельзя говорить об орбите (траектории) электрона.

в). При регистрации микрочастиц в камере Вильсона размер капель, возникающих после прохождения частицы, составляет величину $\Delta x \sim 10^{-4} \text{ см}$. Подсчитаем разброс по импульсам регистрируемой частицы

$$\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{1.054 \cdot 10^{-27}}{10^{-4}} \sim 10^{-23} \frac{\text{см}\cdot\text{г}}{\text{с}}.$$

Поэтому с хорошей точностью можно определять импульс и энергию частицы в камере Вильсона.

3. Теряет смысл деление полной энергии на кинетическую $K(\vec{v})$ и потенциальную $U(\vec{r})$ энергии, т.к. из-за соотношения неопределенностей для координаты и импульса и кинетическая и потенциальная энергии по отдельности не имеют определенного значения.

Примечание 4. Чарлз Томсон Рис Вильсон, английский физик, 1869–1959, Нобелевская премия 1927 г. за экспериментальное обнаружение реликтового фонового излучения;

Приложение 1. Имеем волновой пакет (2.4.6). Рассмотрим пакет в начальный момент $t = 0$ и для определенности положим $a(k) = a(k_0) = \text{const}$ во всем интервале $(k_0 - \Delta k) \div (k_0 + \Delta k)$. Тогда вычисляем интеграл:

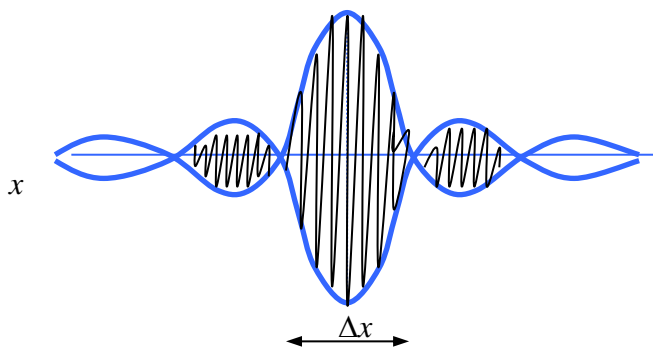


Рис. 4.4.

$$\begin{aligned}
 \psi(\vec{r}, t = 0) &= a(k_0) \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \cos kx dk = \\
 &= a(k_0) \frac{\sin kx}{x} \Big|_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} = \\
 &= \frac{a(k_0)}{x} (\sin(k_0 + \Delta k)x - \sin(k_0 - \Delta k)x) = \\
 &= \frac{2a(k_0)}{x} \sin \Delta kx \cdot \cos k_0 x
 \end{aligned}$$

Множитель перед косинусом дает медленно меняющуюся амплитуду, которая изображена на рисунке 4.4. Основной максимум расположен около точки $x = 0$ в области

между ближайшими к этой точке нулями функции Ψ . Ближайшие нули определяются соотношениями

$$\sin \Delta kx = 0 \text{ и } \Delta kx = \pm \pi.$$

Тогда размер области основной локализации пакета равен $\Delta x = 2\pi/\Delta k$ и при этом снова получаем соотношение неопределенностей:

$$\Delta x \Delta k \geq 2\pi \geq 1.$$

2.5. Уравнение Шредингера.

2.5.1. Уравнение Шредингера.

Вопрос, который встает перед физиками: как определить волновую функцию $\psi(\vec{r}, t)$? В предыдущем параграфе для свободной частицы мы определили волновую функцию, но как ее найти в других случаях?

Основное уравнение *нерелятивистской квантовой механики* – *уравнение Шредингера*. Уравнение Шредингера не выводится, а вводится как новый принцип, или постулат, и затем следствия, вытекающие из него, проверяются на эксперименте.

Примем во внимание следующие рассуждения:

- 1) плоские волны соответствуют свободной частице, следовательно, они должны быть частным решением уравнения для определения $\psi(\vec{r}, t)$;
- 2) для определения волнового движения известно волновое уравнение; однако, оно не годится для описания частиц, т.к. оно справедливо для «чистых» волн (упругих, электромагнитных), в нем не отражено никаких свойств частицы, оно не содержит фундаментальных констант.

Чтобы получить уравнение для определения $\psi(\vec{r}, t)$ необходимо понять и разобрать, какие требования необходимо предъявить к этому уравнению? Исходя из физических соображений, запишем эти требования:

- 1) Уравнение должно быть линейным, т.к. должен выполняться принцип суперпозиции.
- 2) Уравнение должно содержать только фундаментальные константы в качестве коэффициентов, например такие константы как e , m , \hbar .
- 3) В уравнение не должны явно входить параметры движения, например, координата или скорость v .

Продолжим рассуждения в простейшем случае: для свободной нерелятивистской частицы имеет связь между энергией и импульсом:

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (2.5.1)$$

А с другой стороны по гипотезе де Бройля для такой частицы имеем соотношения $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ и волновую функцию:

$$\psi(x,t) = A \exp[-i(\omega t - kx)] = A \exp[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)] \quad (2.5.2)$$

Далее применим следующие соображения. Возьмем первую производную по времени и вторую производную по координате от $\psi(\vec{r},t)$:

$$\text{а) } \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = A \left(-\frac{i}{\hbar} E \right) e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} = -\frac{i}{\hbar} E \psi(x,t) \quad (2.5.3)$$

$$\text{б) } \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p \psi(x,t); \quad \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi(x,t) \quad (2.5.4)$$

И сравнивая эти соотношения с формулой (2.5.1), получаем, что этому выражению можно сопоставить следующее равенство:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \quad (2.5.5)$$

Важно, что уравнение (2.5.5) удовлетворяет выше сформулированным условиям.

Это **уравнение Шредингера** – уравнение, описывающее *свободное одномерное движение в квантовой механике*. Прделанная процедура не есть вывод уравнения, а просто наводящие соображения для его написания. Э. Шредингер написал это уравнение в 1926 году, а в 1933 году ему была присуждена Нобелевская премия "за открытие новых плодотворных направлений атомной теории".

Обобщение уравнения на *трехмерный случай*, для которого свободная частица описывается волновой функцией

$$\psi = A \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})\right],$$

получается достаточно тривиально:

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z, t) &= i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t} \\
-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z, t) &= i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}
\end{aligned} \tag{2.5.6}$$

Итак, уравнение (2.5.6) – *трехмерное уравнение Шредингера* для определения волновой функции свободного движения.

Обобщим теперь уравнение (2.5.6) для описания *движения во внешних полях*. Исходим из того, что полная энергия частицы равна:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}, t) \tag{2.5.7}$$

где $U(\vec{r}, t)$ – потенциальная энергия частицы (потенциал). Тогда аналогично (2.5.5) можно написать следующее обобщающее уравнение для определения волновой функции частицы, движущейся во внешнем поле

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \tag{2.5.8}$$

Итак, *уравнение Шредингера – основное динамическое уравнение нерелятивистской волновой механики*, играет такую же важную роль, как уравнения Ньютона в классической механике и уравнения Максвелла в теории электромагнитного поля. Уравнение Шредингера описывает изменение во времени поведения микрообъектов, характеризующихся волновой функцией $\psi(\vec{r}, t)$.

Обычно вводят оператор Гамильтона – *гамильтониан*:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t) \tag{2.5.9}$$

и тогда уравнение Шредингера запишется в символическом виде:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \tag{2.5.10}$$

Уравнения (2.5.9) – (2.5.10) – *нестационарные уравнения Шредингера*.

2.5.2. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.

Если силовое поле $U(\vec{r}, t)$ не зависит от времени t , то такое поле $U = U(\vec{r})$ называется стационарным. При этом можно разделить уравнение Шредингера на 2 отдельных уравнения – для *координатной* и *временной* частей волновой функции. В самом деле, представим волновую функцию в виде произведения:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot \varphi(t) \tag{2.5.11}$$

и будем искать ее в таком виде. Подставим (2.5.11) в уравнение Шредингера:

$$i\hbar\varphi'_t(t) \cdot \psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi(t) \cdot \Delta\psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r})\varphi(t) \quad (2.5.12)$$

Делим обе части уравнения (2.5.12) на полную функцию Ψ из (2.5.11):

$$i\hbar \frac{\varphi'_t(t)}{\varphi(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + U(\vec{r}) = \text{const} = E \quad (2.5.13)$$

Левая часть уравнения зависит только от времени t , правая часть зависит только от пространственных координат, и поскольку это равенство справедливо при произвольных значениях независимых переменных, то обе части уравнения равны константе – *константе разделения*, которую в (2.5.13) мы обозначили через E . Тогда уравнение (2.5.13) разделяется на 2 уравнения.

Первое уравнение – *временное уравнение*:

$$i\hbar \frac{\partial\varphi(t)/\partial t}{\varphi(t)} = E \quad (2.5.14)$$

Его общее решение легко получить в следующем виде:

$$\varphi(t) = A \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \quad (2.5.15)$$

где $A = \text{const}$.

Второе уравнение – *для координатной части волновой функции*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.5.16)$$

или иначе

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.5.17)$$

Уравнения (2.5.16) - (2.5.17) и есть *стационарные уравнения Шредингера*.

Итак, полная волновая функция частицы или системы частиц, находящихся в стационарном внешнем поле, имеет вид:

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(\vec{r}) \quad (2.5.18)$$

Отсюда видно, что, когда силовое поле $U(\vec{r})$ не зависит от времени, распределение плотности вероятности также не зависит от времени, т.е. оно стационарно.

Примечание 1. *Эрвин Шредингер, австрийский физик-теоретик, 1887–1961*, Нобелевская премия 1933г. за создание волновой механики.

2.6. Волновая функция. Интерпретация и нормировка.

2.6.1. Интерпретация и свойства.

Итак, состояние квантовой системы может быть описано определенной, вообще говоря, комплексной функцией координат и времени $\psi(\vec{r}, t)$, называемой *волновой функцией* системы.

Знание волновой функции позволяет в принципе вычислить вероятности различных результатов измерений физических величин, как измерения координат, импульса, энергии, так и вообще всякого измерения. Так как квадрат модуля волновой функции $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ пропорционален вероятности того, что система находится в окрестности координаты \vec{r} , тогда вероятности обнаружения всех физических величин, зависящих от координат, будут определяться выражениями, билинейными по ψ и ψ^* . Например, выражением

$$\iint \psi^*(\vec{r}')\psi(\vec{r})f(\vec{r}, \vec{r}')d\vec{r}d\vec{r}' \quad (2.6.1)$$

где $f(\vec{r}, \vec{r}')$ – некоторая функция, зависящая от рода и результата измерения.

Волновая функция зависит от времени t , т.е. состояние системы с течением времени меняется. Если волновая функция известна в начальный момент t_0 , то по смыслу полного описания состояния она определена и во все будущие времена t . Зависимость волновой функции от времени t определяется уравнением Шредингера.

Однако волновая функция – не физическое поле, а поле информации. Отсюда проистекает много особенностей квантовой механики. Чтобы приписать системе волновую функцию, над системой должен быть произведен максимально полный опыт. То есть необходимо создать состояние, в котором каждая из полного набора одновременно измеримых величин, определяющих поведение системы, имеет определенное значение. Если опыт не полон, теория позволяет сделать определенные предсказания.

В квантовой механике задавать “координаты и скорости” всех частиц, как это делается в классической механике, невозможно. Самое большое, что можно сделать – задать в начальный момент волновую функцию. *Волновая функция есть максимально полное допустимое описание состояния квантовой частицы или системы частиц.*

Итак, главное открытие квантовой механики – вероятностный характер законов микромира. Н. Бор писал: “Причина вероятностного описания предсказаний в том, что свойства микроскопических объектов нельзя изучать, отвлекаясь от способа наблюдения”.

Конечно, существуют свойства, независимые от способа наблюдения: масса, заряд, спин, магнитный момент и другие. Но всякий раз, когда

одновременно измеряются дополнительные друг другу величины, результаты будут зависеть от способа наблюдения. Это свойство В.А Фок назвал “относительностью к средствам наблюдения”.

Рассмотрим, какие **свойства и требования предъявляются к волновой функции** $\psi(\vec{r}, t)$. Учтем при этом, что волновая функция $\psi(\vec{r}, t)$ – величина комплексная. Итак:

- 1). $\psi(\vec{r}, t)$ – непрерывная функция.
- 2). производная $\psi'(\vec{r}, t)$ – непрерывная функция.
- 3). $\psi(\vec{r}, t)$ – ограниченная функция.
- 4). $\psi(\vec{r}, t)$ – нормирована:
$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1. \quad (2.6.2)$$

Плотность вероятности определяется:

$$\frac{dW}{dV} = |\psi(\vec{r}, t)|^2.$$

Вероятность обнаружить частицу в элементе объема dV равна:

$$dW = |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV. \quad (2.6.3)$$

Для связанных состояний, полная энергия которого меньше 0, что соответствует финитному движению по классической механике, нормировочный интеграл (2.6.2) всегда сходится, и функция нормируется на единицу. Для несвязанных состояний интеграл часто расходится

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV \rightarrow \infty,$$

и волновые функции нельзя нормировать в обычном смысле. Пример: волновая функция свободной частицы, для нее имеем:

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = \int \left| A \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (Et - \vec{p}\vec{r}) \right\} \right|^2 dV = A^2 \int dV \rightarrow \infty$$

Такие функции нормируют на **специальную функцию – δ -функцию**.

2.6.2. Плотность тока вероятности.

Если волновая функция нормирована, то нормировка не меняется во времени:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV \right) = 0 \quad (2.6.4)$$

Покажем это, рассмотрев подробнее производную от интеграла по некоторому произвольному объему V (обозначим ее за N):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) dV = \int_V \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) dV \equiv N \quad (2.6.5)$$

Пусть волновые функции подчиняются уравнению Шредингера с гамильтонианом $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r})$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi; \quad -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H}\psi^* \quad (2.6.6)$$

Выражая отсюда производные по времени, подставим их в (2.6.5):

$$\begin{aligned} N &= \int_V \left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}\psi^* \cdot \psi - \psi^* \cdot \frac{i}{\hbar} \hat{H}\psi \right) dV = \frac{i}{\hbar} \int_V \left(\psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* \right) - \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \right) \right) dV = \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \int_V (\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi) dV = -\frac{i\hbar}{2m} \int_V \text{div}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) dV = -\int_V \text{div} \vec{j} dV \end{aligned} \quad (2.6.7)$$

Здесь введен вектор *плотности потока вероятности* \vec{j} :

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (2.6.8)$$

Далее пользуясь теоремой Остроградского-Гаусса, имеем:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = -\int_V \text{div} \vec{j} dV = -\oint_S \vec{j} d\vec{S}$$

В итоге, получаем, что **изменение вероятности нахождения частицы (системы) в объеме V равно потоку вероятности через ограничивающую объем поверхность.**

Рассмотрим случай бесконечного объема $V \rightarrow \infty$. Если волновая функция ограничена в пространстве (движение частицы ограничено), т.е. $\psi \rightarrow 0$ при $|\vec{r}| \rightarrow \infty$, то, очевидно, что поток через замкнутую поверхность равен 0:

$$\oint_{S \rightarrow \infty} \vec{j} d\vec{S} \Rightarrow 0.$$

Таким образом, получаем:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 0 \quad (2.6.9)$$

и нормировочный интеграл не меняется во времени.

С другой стороны, рассматривая произвольный объем V , получаем *уравнение неразрывности*:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial w}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (2.6.10)$$

где согласно (2.4.4) квадрат модуля волновой функции определяет плотность вероятности $|\psi|^2 = w$. Уравнение неразрывности определяет закон сохранения числа частиц в системе или, если рассматривать одну частицу, закон сохранения вероятности. Изменение плотности вероятности нахождения частицы в системе $\partial w/\partial t$ определяется плотностью тока вероятности $\vec{j}(\vec{r}, t)$ через поверхность, ограничивающую эту систему.

Примечание 1. Волновая функция свободного движения, т.е. плоская волна, может быть нормирована так, чтобы она описывала поток частиц с плотностью потока вероятности, равной единице: поток, в котором через единицу площади ее поперечного сечения, проходят в среднем по одной частице в 1 времени. При этом получаем: $\psi = \sqrt{m/p} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}$. Действительно, сосчитав плотность тока вероятности (2.6.8), получим $|\vec{j}| = 1$.

2.6.3. Еще раз об интерпретации волновой функции.

В 20-30х годах разгорелся научный спор Н. Бора и А. Эйнштейна о вероятностной интерпретации волновой функции и соотношении неопределенностей.

Н. Бор и А. Эйнштейн встретились впервые в 1920г. в Берлине. Наиболее сильно научный спор разгорелся на V Сольвеевском конгрессе в 1927 году. Эйнштейн предлагал Бору каждое утро очередное доказательство нарушения соотношения неопределенностей в придуманном им опыте, а Бор вечером показывал, что при более тщательном рассмотрении соотношение неопределенностей подтверждается. Эйнштейн не смог найти слабого места в логике квантовой механики, однако, по его убеждению, эта точка зрения не может быть окончательным решением: "...Господь Бог не играет в кости...".

Однако в 1935 году дискуссия разгорелась с новой силой, т.к. появилась работа Эйнштейна, Розена и Подольского "Может ли квантово - механическое описание физической реальности считаться полным?".

Допустим, что 2 подсистемы взаимодействовали друг с другом, а потом разошлись на большое расстояние. Поскольку эти системы уже не взаимодействуют, то в результате каких бы то ни было операций или воздействий на 1-ую систему, во второй уже не может получиться никаких реальных изменений. Между тем, согласно квантовой механике, с помощью измерений в первой системе можно изменить волновую функцию второй системы.

Рассмотрим следующий пример. Допустим, знаем импульсы двух частиц до столкновения, и пусть после столкновения одна частица летит к Земле, а другая летит на Луну. До того, как произведем измерение над одной из частиц,

мы не знаем точную волновую функцию частиц, она будет суперпозицией возможных различных состояний. Если земной наблюдатель произведет измерение и получит определенное значение импульса частицы на Земле, он по закону сохранения импульса может рассчитать импульс частицы на Луне. Следовательно, волновая функция этой частицы в результате измерения на Земле определится однозначным образом – она будет также соответствовать определенному импульсу.

Если понимать волновую функцию как физическое поле, то получаем совершенную бессмыслицу: результат измерения на Земле влияет на результат измерения на Луне. Если же учесть, что волновая функция – это волна информации, то результат естественен. Это есть обычное изменение вероятности предсказания с появлением новой информации. Таким образом, ставится вопрос: какова вероятность, что лунный экспериментатор найдет то или иное значение импульса при дополнительном условии, что на Земле найден импульс другой частицы? Это означает, что нужно взять весь набор многократных измерений импульса в обеих лабораториях и отобрать из этого набора те случаи, когда на Земле получится заданный импульс. При этом условии лунные измерения будут давать определенный и известный импульс согласно закону сохранения импульса.

Влияние измерений в одной подсистеме на предсказания о поведении другой подсистемы нужно понимать именно в смысле отбора случаев, соответствующих определенному условию.

Две подсистемы, находящиеся на больших расстояниях, физически никак не связаны, независимы, но условная вероятность, конечно, зависит от того, какое состояние одной из подсистем мы выбираем. Предсказание скачком изменяется при изменении условий отбора событий.

Нужно ли искать другую интерпретацию квантовой механики?

*Примечание 2. Владимир Александрович Фок, советский физик-теоретик, 1898–1974, работал в Ленинградском университете, ФТИ, ГОИ;
Борис Подольский, американский физик-теоретик, 1896–1966.*
