

ЛЕКЦИЯ №20

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Корпускулярно-волновой дуализм вещества

До 20^{ых} годов XX века просуществовал взгляд на природу частиц и волн как на категории, имеющие принципиальное различие.

Классическая частица – это комочек материи, чаще всего – материальная точка, имеющая массу m , размер $\Delta\zeta \Rightarrow 0$, импульс $p = mv$, причем, зная ΣF , можно, используя классический принцип причинности, определить траекторию и положение на ней частицы в любой момент времени.

Волна – объект, занимающий в пространстве конечный, зачастую очень большой объем ($\Delta\zeta \Rightarrow \infty$), любой волне свойствен импульс $p = h/\lambda$, который при $\lambda = \text{const}$ (мономатическая волна) строго определен. Волны в случае их когерентности могут интерферировать, а частицы к этому в принципе неспособны.

Однако в 1900 году для излучения Планком, а в 1923 году для вещества Луи де Бройлем был открыт фундаментальный закон природы – корпускулярно-волновой дуализм или дуализм волн и частиц.

Французский ученый Луи де Бройль (1892—1987), осознавая существующую в природе симметрию и развивая представления о двойственной корпускулярно-волновой природе света, выдвинул в 1923 г. гипотезу об *универсальности корпускулярно-волнового дуализма*. Де Бройль утверждал, что не только фотоны, но и электроны и любые другие частицы материи наряду с корпускулярными обладают также волновыми свойствами.

Итак, согласно де Бройлю, с каждым микрообъектом связываются, с одной стороны, *корпускулярные* характеристики - энергия E и импульс p , а с другой — *волновые характеристики* — частота ν и длина волны λ . Количественные соотношения, связывающие корпускулярные и волновые свойства частиц, такие же, как для фотонов:

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad E = h\nu. \quad (20.1)$$

Смелость гипотезы де Бройля заключалась именно в том, что соотношение (20.1) постулировалось не только для фотонов, но и для других микрочастиц, в частности для таких, которые обладают массой покоя. А дерзость состояла в том, что

никаких экспериментальных фактов в подтверждение гипотезы не было. Таким образом, любой частице, обладающей импульсом, сопоставляют волновой процесс с длиной волны, определяемой по формуле **де Бройля**:

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (20.2)$$

Это соотношение справедливо для любой частицы с импульсом p .

Интересно отметить, что представления о волнах де Бройля позволили получить логически самый противоречивый 1-ый постулат Бора. Естественно предположить, что электрон может бесконечно долго двигаться лишь по траектории, на длине которой укладывается целое число волн де Бройля, образуя стоячую волну, как известно, энергии не переносящей:

$$2\pi r_n = n\lambda,$$

где $\lambda = \frac{h}{mv}$, λ - длина волны де Бройля для электрона, v - его скорость, а m - масса.

Но тогда $2\pi r_n = n \frac{h}{mv_n} \Rightarrow mv_n r_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$.

Формула де Бройля экспериментально подтвердилась в опытах К. Дэвиссона и Л. Джермера (1927 г.), наблюдавших рассеяние электронов монокристаллом никеля. Схема опытов изображена на рис. 20.1.

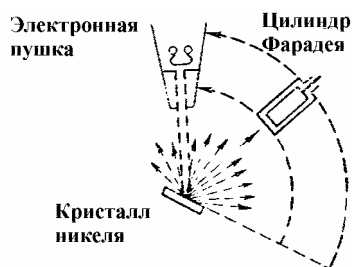


Рис.20.1. Схема опыта Дэвиссона и Джермера.

Пучок электронов направлялся из электронной пушки на поверхность заземленного кристалла никеля и отражался от него. Устройство пушки позволяло задавать электронам, вылетающим из нее, определенную скорость. Электроны, рассеянные монокристаллом, улавливали приемником - цилиндром Фарадея, который перемещали в плоскости, проходящей через падающий и отраженный пучки электронов, так что приемник мог фиксировать электроны, рассеянные под различными углами. Ток в детекторе изменялся в зависимости от изменения энергии электронов и углов их рассеяния. Количество электронов, попадавших в цилиндр Фарадея, регистрировалось по величине тока в электрической цепи цилиндра (на рис. 20.1 не показана). С классической точки зрения электроны, обладающие произвольной кине-

тической энергией, могут рассеиваться под всевозможными углами в соответствии с законами отражения геометрической оптики.

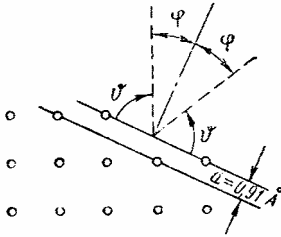


Рис.20.2. Атомные плоскости кристалла никеля.

На рис. 20.2 изображена кристаллическая решетка никеля, на котором производился опыт по рассеянию электронов под углом $\vartheta = 65^\circ$. На рис. 20.3 приведена для этого случая зависимость числа рассеянных электронов от их кинетической энергии. Мерой числа электронов является сила тока I в приемнике, видно, что при энергии $W = 54$ эв наблюдался максимум числа отраженных электронов, совершенно неожиданный с классической точки зрения. Из результатов опыта следует, что рассеяние электронов монокристаллом никеля напоминает отражение таким кристаллом рентгеновских лучей.

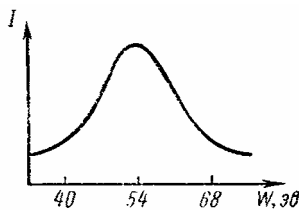


Рис.20.3. Зависимость тока в приборе Дэвиссона-Джермера от энергии электронов.

Ранее мы видели, что отражение рентгеновских лучей происходит лишь для определенных длин волн, удовлетворяющих условию Вульфа — Брэгга

$$n\lambda = 2d \sin \vartheta. \quad (20.3)$$

На рис. 20.4 показаны полученные в опытах Дэвиссона и Джермера максимумы интенсивности рассеянных электронов, соответствующие определенным значениям их кинетических энергий.

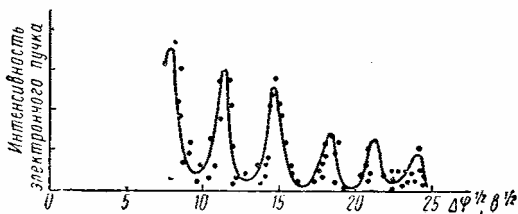


Рис. 20.4. Некоторые результаты опытов Дэвиссона и Джермера.

Количественная определенность энергии электронов, при которой наблюдается отражение, обусловлена тем, что рассеяние электронов связано с их волновыми свойствами и длина волны, связанной с движущимся электроном, определяется его кинетической энергией. Для электронов расчет длины волны по формуле (20.3) при не слишком больших скоростях электронов (без релятивистского изменения массы) может быть произведен по простой формуле

$$\lambda = \frac{12,25}{\sqrt{\Delta\phi}} \text{ \AA}, \quad (20.4)$$

где $\Delta\phi$ ускоряющее электроны напряжение, в вольтах.

Из формулы (20.4) при $\Delta\phi = 54\text{В}$ имеем $\lambda = 1,67\text{\AA}$. По формуле Вульфа — Брэгга при $n = 1$ (см. рис. 20.2) получаем

$$\lambda = 2 \cdot 0,91 \sin 65^\circ = 1,65\text{\AA}.$$

Это совпадение подтвердилось при других значениях энергий электронов и углов рассеяния. Некоторое расхождение между длинами волн, вычисленными по формулам (20.3) и (20.4), объясняется тем, что волны, соответствующие движущимся электронам, испытывают преломление на границе кристалла. Расчеты, учитывающие этот эффект, привели к полному согласию формулы де Бройля с экспериментальными данными.

Вскоре после опытов Дэвиссона и Джермера волновые свойства электронов были обнаружены в экспериментальных исследованиях П. С. Тартаковского в Ленинградском и Г. Томсона в Эбердинском университетах. Опыты эти состояли в прохождении пучков электронов сквозь тонкие пленки (толщиной порядка 10^{-5} см) поликристаллической структуры. По своей постановке эти опыты были аналогичны осуществлению дифракции рентгеновских лучей по методу Дебая – Шеррера.

На рис. 20.5 представлена фотография дифракционной картины, полученной при рассеянии рентгеновских лучей пластинкой золота.

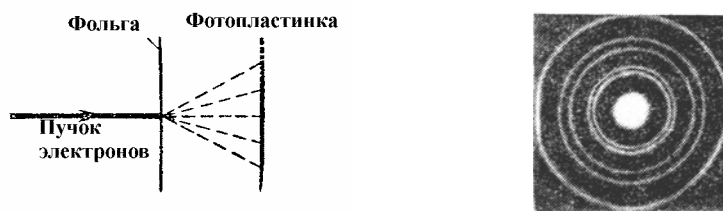


Рис. 20.5. Схема съемки и электронограмма от фольги поликристаллического золота.

Пользуясь подобными фотографиями, Г. Томсон проверил формулу де Бройля (20.2) и определил по полученным значениям и формуле (20.3) период кристаллической решетки металла, через который проходили электроны. Результаты совпали с известными ранее данными рентгеноструктурного анализа.

В 1949 г. в Москве Л. М. Биберманом, Н. Г. Сушкиным и В. А. Фабрикантом были осуществлены опыты по дифракции одиночных, поочередно летящих электронов. Интенсивность электронного пучка в этих опытах была столь малой, что на тонкую пленку вещества одновременно попадал только один электрон. Результат наблюдения после многократного «обстрела» оказался аналогичным результату, полученному в опытах по дифракции поочередно летящих фотонов и по виду вполне совпадал с представленным на рис. 20.5.

Следовательно, волновые свойства частиц не являются свойством их коллектива, а присущи каждой частице в отдельности.

Для исследования структуры вещества наряду с рентгеноструктурным анализом в настоящее время широко используется **метод электронографии**. Он основан на том, что дифракционные эффекты для электронов наблюдаются лишь при условии, что длина волны, связанной с электронами, имеет порядок величины межатомного расстояния в веществе. В связи с тем, что электроны имеют значительно меньшую проникающую способность, чем рентгеновские лучи, электронография чаще применяется для исследования структуры поверхностей твердых тел, например при изучении коррозии и катализа. Для молекул газов, адсорбированных на поверхности твердого тела, с помощью дифракции электронов могут быть найдены межатомные расстояния, моменты инерции и получены другие сведения, характеризующие структуру молекул. Минимальная погрешность электронографического определения межплоскостного расстояния в кристаллах составляет около $0,0002\text{Å}$.

Убедительное доказательство справедливости формулы де Бройля и наличия волновых свойств у частиц было получено в опытах по дифракции нейтронов на кристаллах. Опыты показывают, что отражение нейтронов от кристаллов твердых тел и их рассеяние в веществе происходит в соответствии с условием Вульфа — Брэгга (20.4), где λ - длина волны, связанная с движущимся нейтроном и удовлетворяющая формуле де Бройля (20.2). В ряде случаев с помощью дифракции нейтронов можно успешнее, чем с помощью рентгеновских лучей или электронов, исследовать строение веществ и спектр тепловых колебаний решетки. Этот **метод** носит название **нейтронографии**.

Нейтроны *не обладают электрическим зарядом* и не испытывают электрических сил взаимодействия с электронами и ядрами. Рентгеновские же лучи рассеиваются на атомных электронах, а пучки электронов, падающих на вещество, взаимодействуют как с атомными электронами, так и с ядрами. Поэтому для исследования структуры вещества, содержащего легкие атомы, рентгеновские лучи и электроны оказываются

малопригодными. Так, для веществ, содержащих водород (например, органических кристаллов, различных пластмасс), дифракция рентгеновских лучей и электронов не позволяет обнаружить расположение атомов водорода, ибо на них рассеяние рентгеновских лучей и электронов незначительно. Наоборот, нейтроны весьма сильно взаимодействуют с ядрами атомов водорода посредством ядерных сил и благодаря наличию у нейтрона и ядра водорода магнитных моментов. Это приводит к сильному рассеянию нейтронов на водороде и дифракция нейтронов дает возможность исследовать структуру веществ, содержащих водород.

Правда, для этих интереснейших исследований требуется достаточно производительный источник нейтронов, каковым является атомный реактор...

Впоследствии дифракционные явления обнаружили также для протонов, атомных и молекулярных пучков. Это окончательно послужило доказательством наличия волновых свойств микрочастиц и позволило описывать движение микрочастиц в виде волнового процесса, характеризующегося определенной длиной волны, рассчитываемой по формуле де Бройля.

Экспериментальное доказательство наличия волновых свойств микрочастиц привело к выводу о том, что перед нами универсальное явление, общее свойство материи. Но тогда волновые свойства должны быть присущи и макроскопическим телам. Почему же они не обнаружены экспериментально? Например, частице массой 1 грамм, движущейся со скоростью 1 м/с, соответствует волна де Бройля с $\lambda = 6,62 \cdot 10^{-31}$ м. Такая длина волны лежит за пределами доступной наблюдению области (периодических структур с периодом $d \approx 10^{-31}$ м не существует). Поэтому считается, что макроскопические тела проявляют только одну сторону своих свойств — корпускулярную — и не проявляют волновую.

Подтвержденная экспериментально гипотеза де Бройля о корпускулярно-волновом дуализме свойств вещества коренным образом изменила представления о свойствах микрообъектов. Всем микрообъектам присущи и корпускулярные, и волновые свойства; в то же время любую из микрочастиц нельзя считать ни частицей, ни волной в классическом понимании. Современная трактовка корпускулярно-волнового дуализма может быть выражена словами академика В. А. Фока (1898—1974): «Можно сказать, что для атомного объекта существует потенциальная возможность проявлять себя, в зависимости от внешних условий, либо как волна, либо как частица, либо промежуточным образом. Именно в этой *потенциальной возможности* различных проявлений свойств, присущих микрообъекту, и состоит дуализм волна - частица. Всякое иное, более буквальное, понимание этого дуализма в

виде какой-нибудь модели неправильно». (в сб.: Философские вопросы современной физики. — М.: Изд-во АН СССР, 1959).

Соотношения неопределенностей Гейзенберга.

Согласно двойственной корпускулярно-волновой природе частиц вещества, для описания микрочастиц используются то волновые, то корпускулярные представления. Поэтому приписывать им все свойства частиц и все свойства волн нельзя. Естественно, что необходимо внести некоторые ограничения в применении к объектам микромира понятий классической механики.

В классической механике всякая частица движется по определенной траектории, так что в любой момент времени точно фиксированы ее координата и импульс. Микрочастицы из-за наличия у них волновых свойств существенно отличаются от классических частиц. Одно из основных различий заключается в том, что нельзя говорить о движении микрочастицы по определенной траектории и неправомочно говорить о **точных одновременных** значениях ее координаты и импульса. Это следует из корпускулярно-волнового дуализма. Так, понятие «длина волны в данной точке» лишено физического смысла, а поскольку импульс выражается через длину волны (см. (20.2)), то отсюда следует, что микрочастица с определенным импульсом имеет полностью неопределенную координату. И наоборот, если микрочастица находится в состоянии с точным значением координаты, то ее импульс является полностью неопределенным.

Вернер Гейзенберг, учитывая волновые свойства микрочастиц и связанные с волновыми свойствами ограничения в их поведении, пришел в 1927 г. к выводу, что объект микромира **невозможно одновременно** с любой наперед заданной точностью характеризовать и координатой и импульсом. Согласно соотношению неопределенностей Гейзенбергу микрочастица (микрообъект) не может иметь одновременно и определенную координату (x, y, z), и определенную соответствующую проекцию импульса (p_x, p_y, p_z), причем неопределенности этих величин удовлетворяют условиям

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq h, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq h, \quad (20.5)$$

т. е. произведение неопределенностей координаты и соответствующей ей проекции импульса не может быть меньше величины порядка h .

Из соотношения неопределенностей (20.5) следует, что, например, если микрочастица находится в состоянии с точным значением координаты ($\Delta x=0$), то в этом состоянии соответствующая проекция ее импульса оказывается совершенно неопределенной ($\Delta p_x \rightarrow \infty$), и наоборот. Таким образом, для микрочастицы не существует состояний, в которых ее координаты и импульс имели бы одновременно точные значения. Отсюда вытекает и фактическая невозможность одновременно с любой наперед заданной точностью измерить координату и импульс микрообъекта.

Поясним, что соотношение неопределенностей действительно вытекает из волновых свойств микрочастиц. Пусть поток электронов проходит через узкую щель шириной Δx , расположенную перпендикулярно направлению их движения (рис. 20.6). Так как электроны обладают волновыми свойствами, то при их прохождении через щель, размер которой сравним с длиной волны де Бройля λ электрона, наблюдается дифракция. Дифракционная картина, наблюдаемая на экране (Э), характеризуется главным максимумом, расположенным симметрично оси Y , и побочными максимумами по обе стороны от главного (их не рассматриваем, так как основная доля интенсивности приходится на главный максимум).

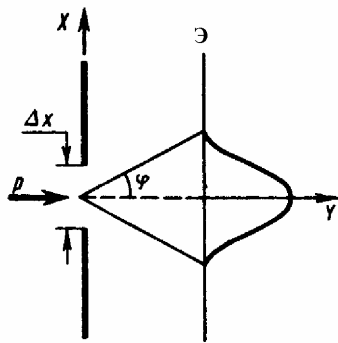


Рис. 20.6. Дифракция электронов на щели.

До прохождения через щель электроны двигались вдоль оси Y , поэтому составляющая импульса $p_x = 0$, так что $\Delta p_x = 0$, а координата x частицы является совершенно неопределенной. В момент прохождения электронов через щель их положение в направлении оси X определяется

с точностью до ширины щели, т. е. с точностью Δx . В этот же момент вследствие дифракции электроны отклоняются от первоначального направления и будут двигаться в пределах угла 2φ (φ — угол, соответствующий первому дифракционному минимуму). Следовательно, появляется неопределенность в значении составляющей импульса вдоль оси X , которая, как следует из рис. 20.6 и формулы (20.1), равна

$$\Delta p_x = p \sin \varphi = \frac{h}{\lambda} \sin \varphi. \quad (20.6)$$

Для простоты ограничимся рассмотрением только тех электронов, которые попадают на экран в пределах главного максимума. Из теории дифракции известно, что первый минимум соответствует углу φ , удовлетворяющему условию

$$\Delta x \cdot \sin \varphi = \lambda, \quad (20.7)$$

где Δx — ширина щели, а λ — длина волны де Бройля. Из формул (20.6) и (20.7) получим

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = h, \quad (20.8)$$

где учтено, что для некоторой, хотя и незначительной, части электронов, попадающих за пределы главного максимума, величина $\Delta p_x \geq p \sin \varphi$. Следовательно, получаем выражение

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h,$$

т. е. соотношение неопределенностей (20.5).

Из-за большой «непривычности» соотношений неопределенностей рассмотрим их еще с одной позиции — с помощью так называемых «мысленных опытов» В. Гейзенберга.

Предположим, что положение электрона в пространстве определяется с помощью микроскопа; электрон освещается монохроматическим светом частоты ν . Дифракционная теория разрешающей способности микроскопа устанавливает предел наименьших размеров Δx , которые могут быть определены с помощью микроскопа. Они определяются длиной волны λ и углом α (рис. 20.7):

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\sin \alpha}.$$

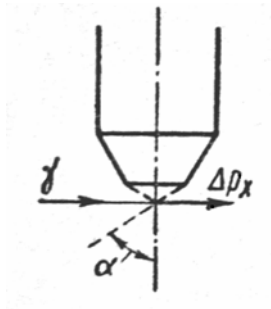


Рис. 20.7. Схема «мысленного опыта» Гейзенберга.

При освещении электрона возможно более коротковолновым светом можно уменьшить Δx . Однако коротковолновый свет, как известно, проявляет в сильной степени квантовые свойства. Рассеяние на электроне кванта с импульсом $\frac{h\nu}{c}$ приведет к передаче электрону от кванта некоторого импульса Δp_x вдоль оси, перпендикулярной к оси микроскопа. Величина этого импульса

$$\Delta p_x = \frac{h\nu}{c} \sin \alpha.$$

Перемножив Δx и Δp_x соответствии с соотношением (20.8) получим

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = h.$$

Важно усвоить, что невозможность одновременно точно определить координату и соответствующую проекцию импульса не связана с несовершенством методов измерения или измерительных приборов, а является *следствием специфики микрообъектов*, отражающей особенности их *объективных свойств*, а именно двойственной корпускулярно-волновой природы. Соотношение неопределенностей получено при одновременном использовании классических характеристик движения частицы (координаты, импульса) и наличия у нее волновых свойств. Так как в классической механике принимается, что измерение координаты и импульса может быть произведено с любой точностью, *то соотношение неопределенностей является, таким образом, квантовым ограничением применимости классической механики к микрообъектам.*

Соотношение неопределенностей, отражая специфику физики микрочастиц, позволяет оценить, например, в какой мере можно применять понятия классической механики к микрочастицам, в частности, с какой степенью точности можно говорить о траекториях микрочастиц. Известно, что движение по траектории характеризуется в любой момент времени определенными значениями координат и скорости. Выразим соотношение неопределенностей (20.5) в виде

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq h/m. \quad (20.9)$$

Из этого выражения следует, что чем больше масса частицы, тем меньше неопределенности ее координаты и скорости и, следовательно, с тем большей точностью можно применять к этой частице понятие траектории. Так, например, уже для пылинки массой 10^{-12} кг и линейными размерами 10^{-6} м, координата которой определена с точностью до 0,01 ее размера ($\Delta x = 10^{-8}$ м), неопределенность скорости, по (20.9),

$$\Delta v_x = \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \text{ М}}{10^{-8} \cdot 10^{-12} \text{ с}} = 6,62 \cdot 10^{-14} \frac{\text{М}}{\text{с}},$$

т. е. не будет сказываться при всех скоростях, с которыми пылинка может двигаться.

Таким образом, для макроскопических тел их волновые свойства не играют никакой роли; координата и скорость макротел могут быть одновременно измерены достаточно точно. Это означает, что для описания движения макротел с абсолютной достоверностью можно пользоваться законами классической механики.

Предположим, что пучок электронов движется вдоль оси X со скоростью $v = 10^8$ м/с, определяемой с точностью до 0,01% ($\Delta v_x \approx 10^4$ м/с). Какова точность определения координаты электрона? По формуле (20.9),

$$\Delta x = \frac{h}{m \cdot \Delta v_x} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{9,11 \cdot 10^{-31} \cdot 10^4} = 7,27 \cdot 10^{-6} \text{ м},$$

т. е. положение электрона может быть определено с точностью до тысячных долей миллиметра. Такая точность достаточна, чтобы можно было говорить о движении электронов по определенной траектории, иными словами, описывать их движение законами классической механики.

Применим соотношение неопределенностей к электрону, движущемуся в атоме водорода. Допустим, что неопределенность координаты электрона $\Delta x \approx 10^{-10}$ м (порядка размеров самого атома, т. е. можно считать, что электрон принадлежит данному атому).

Тогда, согласно (20.9), $\Delta v_x = \frac{h}{m \cdot \Delta x} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{9,11 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-10}} = 7,27 \cdot 10^6 \frac{\text{м}}{\text{с}}$. Используя законы

классической физики, можно показать, что при движении электрона вокруг ядра по круговой орбите радиуса $\approx 0,5 \cdot 10^{-10}$ м его скорость $v \approx 2,3 \cdot 10^6$ м/с. Таким образом,

неопределенность скорости $\frac{\Delta v}{v} \approx \frac{7,27 \cdot 10^6}{2,3 \cdot 10^6} = 3,16$ - в несколько раз больше самой

скорости. Очевидно, что в данном случае нельзя говорить о движении электрона в атоме по определенной траектории, иными словами, для описания движения электрона в атоме нельзя пользоваться законами классической физики.

В квантовой теории рассматривается также соотношение неопределенностей для энергии E и времени t , т. е. неопределенности этих величин удовлетворяют условию

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h. \quad (20.10)$$

Подчеркнем, что ΔE — неопределенность энергии некоторого состояния системы, Δt — промежуток времени, в течение которого оно существует. Следовательно, система, имеющая среднее время жизни Δt , не может быть охарактеризована определенным

значением энергии; разброс энергии $\Delta E = \frac{h}{\Delta t}$ возрастает с уменьшением среднего

времени жизни. Из выражения (20.10) следует, что частота излученного фотона также

должна иметь неопределенность $\Delta \nu = \frac{\Delta E}{h}$, т. е. линии спектра должны характеризоваться

частотой, равной $\Delta \nu \pm \frac{\Delta E}{h}$. Опыт действительно показывает, что все спектральные

линии размыты; измеряя ширину спектральной линии, можно оценить порядок времени существования атома в возбужденном состоянии.

Соотношение (20.10) определяет возможность существования виртуальных частиц. В течение малого времени Δt энергия системы может измениться на ΔE без нарушения закона сохранения энергии. Так, энергия покоя частиц электрона и позитрона составляет по $0,51 \text{ МэВ} = 0,816 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$; в соответствии с соотношением неопределенностей (20.10), если время наблюдения составляет менее

$$\Delta t \leq \frac{h}{\Delta E} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 0,816 \cdot 10^{-19}} = 4 \cdot 10^{-15} \text{ с},$$

то можно предполагать, что из кванта соответствующей величины – $1,02 \text{ МэВ}$ – родилась и быстро исчезла электронно-позитронная пара.

Эти размышления породили гипотезу «кипящего» вакуума, в котором, при наличии соответствующей энергии или вследствие распада ядер, соударений частиц рождаются виртуальные частицы. При этом взаимодействие реальных частиц с виртуальными может приводить к существованию весьма нетривиальных образований. Например, взаимодействие реального электрона с виртуальной электрон-позитронной парой приводит к эффекту поляризации вакуума. Виртуальные позитроны притягиваются к реальному электрону, а виртуальные электроны – отталкиваются. Наблюдается экранирование заряда электрона по отношению к другим реальным заряженным частицам. Около реального электрона существует «шуба» из виртуальных частиц, поэтому такой электрон называют «физическим».

Лишенный «шубы» вакуумной поляризации электрон называют «голым» или истинным, его заряд больше заряда физического электрона и, по соответствующей оценке, составляет $\approx 3,0 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$.

Волновая Ψ -функция и ее статистический смысл

Экспериментальное подтверждение идеи де Бройля об универсальности корпускулярно-волнового дуализма, ограниченность применения классической механики к микрообъектам, диктуемая соотношением неопределенностей, а также противоречие целого ряда экспериментов с применяемыми в начале XX в. теориями привели к новому этапу развития квантовой теории — созданию **квантовой механики**, описывающей законы движения и взаимодействия микрочастиц с учетом их волновых свойств. Ее создание и развитие охватывает период с 1900 г. (формулировка Планком квантовой гипотезы) до 20-х годов XX в.; оно связано прежде всего с работами

австрийского физика Эрвина Шредингера (1887—1961), немецкого физика Вернера Гейзенберга и английского физика Поля Дира́ка (1902—1984).

На данном этапе развития (в 20-ых годах XX века) возникли новые принципиальные проблемы, в частности проблема физической природы волн де Бройля. Для выяснения этой проблемы сравним дифракцию световых волн и микрочастиц. Дифракционная картина, наблюдаемая для световых волн, характеризуется тем, что в результате наложения дифрагирующих волн друг на друга в различных точках пространства происходит усиление или ослабление амплитуды колебаний. Согласно волновым представлениям о природе света, интенсивность дифракционной картины пропорциональна квадрату амплитуды световой волны. По представлениям фотонной теории, интенсивность определяется числом фотонов, попадающих в данную точку дифракционной картины. Следовательно, число фотонов в данной точке дифракционной картины задается квадратом амплитуды световой волны, в то время как для одного фотона квадрат амплитуды определяет вероятность попадания фотона в ту или иную точку.

Дифракционная картина, наблюдаемая для микрочастиц, также характеризуется неодинаковым распределением потоков микрочастиц, рассеянных или отраженных по различным направлениям, — в одних направлениях наблюдается большее число частиц, чем в других. Наличие максимумов в дифракционной картине с точки зрения волновой теории означает, что эти направления соответствуют наибольшей интенсивности волн де Бройля. С другой стороны, интенсивность волн де Бройля оказывается больше там, где имеется большее число частиц, т. е. интенсивность волн де Бройля в данной точке пространства определяет число частиц, попавших в эту точку. Таким образом, дифракционная картина для микрочастиц является проявлением статистической (вероятностной) закономерности, согласно которой частицы попадают в те места, где интенсивность волн де Бройля наибольшая.

Необходимость вероятностного подхода к описанию микрочастиц является важнейшей отличительной особенностью квантовой теории. Можно ли волны де Бройля истолковывать как волны вероятности, т. е. считать, что вероятность обнаружить микрочастицу в различных точках пространства меняется по волновому «синусоидальному» закону? Такое толкование волн де Бройля неверно уже хотя бы потому, что тогда вероятность обнаружить частицу в некоторых точках пространства может быть отрицательна, что не имеет смысла.

Чтобы устранить эти трудности, немецкий физик М. Борн (1882—1970) в 1926 г. предположил, что по волновому закону меняется не сама вероятность, а величина,

названная **амплитудой вероятности** и обозначаемая $\Psi(x, y, z, t)$. Эту величину называют также **волновой функцией** (или **Ψ -функцией**). Амплитуда вероятности может быть комплексной величиной, и вероятность W пропорциональна квадрату ее модуля:

$$W \sim |\Psi(x, y, z, t)|^2 \quad (20.11)$$

($|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$, Ψ^* — функция, комплексно сопряженная с Ψ). Таким образом, описание состояния микрообъекта с помощью волновой функции имеет **статистический, вероятностный характер**: квадрат модуля волновой функции (квадрат модуля амплитуды волн де Бройля) определяет вероятность нахождения частицы в момент времени t в области с координатами x и $x+dx$, y и $y+dy$, z и $z+dz$.

Итак, в квантовой механике состояние микрочастиц описывается принципиально по-новому — с помощью волновой функции, которая является **основным носителем информации** об их корпускулярных и волновых свойствах. Вероятность нахождения частицы в элементе объемом dV равна

$$dW = |\Psi|^2 dV. \quad (20.12)$$

Величина

$$|\Psi|^2 = \frac{dW}{dV}$$

(квадрат модуля Ψ -функции) имеет смысл **плотности вероятности**, т. е. определяет вероятность нахождения частицы в единичном объеме в окрестности точки с координатами x, y, z . Таким образом, физический смысл имеет не сама Ψ -функция, а квадрат ее модуля $|\Psi|^2$, которым задается **интенсивность волн де Бройля**.

Вероятность найти частицу в момент времени t в конечном объеме V , согласно теореме сложения вероятностей, равна

$$W = \int_V dW = \int_V |\Psi|^2 dV.$$

Так как $|\Psi|^2 dV$ определяется как вероятность, то необходимо волновую функцию Ψ нормировать так, чтобы вероятность достоверного события обращалась в единицу, если за объем V принять бесконечный объем всего пространства. Это означает, что при данном условии частица должна находиться где-то в пространстве (вспомните задачу о поимке льва в пустыне: «берем пустыню, песок просеиваем...»). Следовательно, **условие нормировки вероятностей**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dV = 1, \quad (20.13)$$

где данный интеграл (20.13) вычисляется по всему бесконечному пространству, т. е. по координатам x, y, z от $-\infty$ до $+\infty$. Таким образом, условие (20.13) говорит об объективном существовании частицы в пространстве.

Чтобы волновая функция являлась объективной характеристикой состояния микрочастиц, она должна удовлетворять ряду ограничительных условий, обычных с точки зрения математики. Функция Ψ , характеризующая вероятность обнаружения действия микрочастицы в элементе объема, должна быть *непрерывной* (вероятность не может изменяться скачком), *непрерывными* должны быть и её *первые производные*; *конечными* должны быть вторые производные (вероятность не может быть больше единицы), *однозначной* (вероятность не может быть неоднозначной величиной).

Волновая функция удовлетворяет **принципу суперпозиции**: если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n, \dots$, то она также может находиться в состоянии Ψ , описываемом линейной комбинацией этих функций:

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n,$$

где C_n ($n = 1, 2, \dots$) - произвольные, вообще говоря, комплексные числа. Сложение *волновых функций* (амплитуд вероятностей), а не *вероятностей* (определяемых квадратами модулей волновых функций) принципиально отличает квантовую теорию от классической статистической теории, в которой для независимых событий справедлива *теорема сложения вероятностей*.

Волновая функция Ψ , являясь основной характеристикой состояния микрообъектов, позволяет в квантовой механике вычислять средние значения физических величин, характеризующих данный микрообъект. Например, среднее расстояние $\langle r \rangle$ электрона от ядра вычисляют по формуле

$$\langle r \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} r |\Psi|^2 dV,$$

где интегрирование производится, как и в случае (20.13).