

Глава 1

1. Экспериментальные основания квантовой механики

1.1. Разрешение “ультрафиолетовой катастрофы”

В конце XIX в. экспериментально было установлено, что излучение абсолютно черного тела подчиняется законам Вина, Стефана-Больцмана, Кирхгофа. График зависимости плотности излучения u от частоты ν , основанный на экспериментальных данных, изображен на рис.1.

Теория явления, основанная на классических представлениях - теория Релея-Джинса - давала иную зависимость, которая на графике изображена пунктирной линией: чем больше частота излучения ν , тем больше плотность энергии излучения u . При неограниченном увеличении частоты, плотность энергии излучения также растет неограниченно. Этот вывод классической

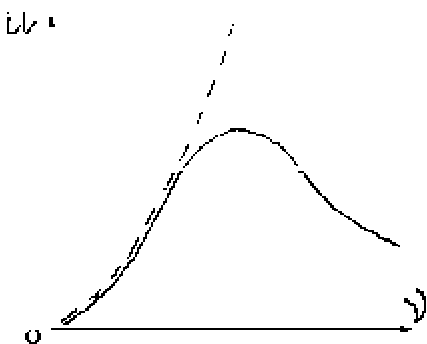


Рис. 1.

теории и получил название “ультрафиолетовая катастрофа”.

Выход из кризисной ситуации, в котором оказалась классическая физика, был найден немецким физиком Максом Планком. На заседании немецкого физического общества он доложил (это было в самом конце XIX в., 14 декабря 1900г), что нашел выход из “ультрафиолетовой катастрофы”. Он сделал революционное предположение: атомы нагретого тела излучают энергию не непрерывно, как всегда считалось в классической физике, а порциями, дискретно. Причем, наименьшая порция излучения пропорциональна частоте излучения:

$$E = h\nu,$$

где величина h являлась постоянной величиной, впоследствии она стала называться постоянной Планка и вошла в число мировых констант, определяющих существование нашей Вселенной. 14 декабря 1900 г. вошло в историю человечества как дата рождения квантовой физики.

В 1905 г. А. Эйнштейн обобщил идею Планка, используя (применив) ее для объяснения явления фотоэффекта. Он предположил, что электромагнитная энергия не только излучается и поглощается порциями, квантами, но и распространяется вне атомов локальными образованиями, квантами. В 1927 году американский физик Льюис дал имя кванту электромагнитной энергии, назвав его фотоном.

1.2. Модели строения атома и квантовая теория Н.Бора

После открытия первой элементарной частицы-электрона в 1897 г., были предложены модели строения атомов. В 1901 г. Томсон предложил такую модель: атом представляет собой положительно заряженное облако, внутри которого вкраплены электроны. Так как атом в нормальном состоянии нейтрален, то суммарный заряд электронов должен равняться заряду положительно заряженного облака. Несмотря на то, что такая модель могла объяснить некоторые явления, она была физически несостоятельной. В классической электродинамике Максвелла доказывается (теорема Ирншоу), что статическая система зарядов не может находиться в устойчивом равновесии. А атомы существуют миллиарды лет. В следующем году другой физик лорд Кельвин “усовершенствовал” эту модель: в положительно заряженном облаке электроны располагаются по оболочкам и находятся в движении. Однако, и эта модель оказалась физически несостоятельной: ускоренно движущейся заряд, утверждает классическая электродинамика, должен излучать электромагнитные волны и, в конечном счете, потеряв энергию, останется.

Несколько лет английский физик Э. Резерфорд изучал рассеяние радиоактивных излучений при прохождении через тонкую металлическую фольгу. Наряду с частицами, рассеянными в направлении первоначального движения, были обнаружены частицы, рассеянные в противоположном направлении. В 1911 г. Резерфорд предложил новую модель внутреннего строения атома, позволившая ему объяснить парадоксальные результаты его опытов. Свою модель он назвал “планетарной”, так как она напоминала ему солнечную систему планет: в центре атома находится положительно заряженное ядро, в котором практически сосредоточена вся масса атома, вокруг ядра вращаются (как планеты вокруг Солнца) электроны (сегодня мы назвали бы эту модель ядерной, а не планетарной, так как модель Резерфорда только внешне похожа на солнечную систему). И эта модель, по той же причине, что и модель Кельвина, физически несостоятельна.

Модель Резерфорда была “спасена” в 1913 г. датским физиком Нильсом Бором благодаря введению в классическую физику парадоксальных для нее утверждений-постулатов. Их два:

1. *В атоме существуют стационарные электронные орбиты, находясь на которых электрон не излучает энергию.*

2. *Только при переходе с одной орбиты на другую электрон поглощает или излучает энергию.*

Первоначально в теории Бора было еще одно утверждение: момент количества движения электрона при переходе с одной орбиты на другую изменяется дискретно. Немецкий физик Зоммерфельд усложнил модель Бора, введя наряду с круговыми орбитами и эллиптические орбиты. Благодаря этому состояние электрона в атоме стало определяться двумя квантовыми числами: главным (введенным еще Бором) и орбитальным.

В том же 1913 г. немецкие физики Франк и Герц экспериментально установили существование в атомах дискретных энергетических состояний, тем самым гипотеза Н. Бора перешла в ранг теории (хотя и не понятной с позиций классической физики).

В 1921 г. теория Бора получила еще одно экспериментальное подтверждение: в опытах Штерна и Герлаха было обнаружено новое квантование энергетического состояния электронов в атоме (мы не рассматриваем эти факты подробно, так как это делается в курсе общей физики, наша задача - наметить этапы развития физики, приведшие ее к созданию квантовой механики - основному объекту данного курса).

1.3. Волновые и корпускулярные свойства света

К началу XIX в соперничестве двух теорий света (корпускулярной и волновой) вверх одержала волновая теория. У света были обнаружены такие явления, как интерференция, дифракция и поляризация, которые могли быть объяснены непротиворечиво с одних позиций только исходя из теории, что свет-это волновой процесс, свет имеет волновую природу. Дж. Максвелл в своей электродинамике показал, что свет является электромагнитными волнами. В 1887 г. Г. Герц экспериментально обнаружил электромагнитные волны.

Но в том же году тот же Г. Герц обнаружил новое физическое явление, названное фотоэффектом: под воздействием света металлическая пластинка приобретает положительный заряд. Российский физик А.Столетов установил два закона этого явления:

1. *Величина фототока зависит от интенсивности падающего светового потока;*

2. *Энергия вылетающих зарядов от интенсивности падающего света не зависит.*

Второй закон не мог быть объяснен с точки зрения волновой теории. И только в 1905 г. А.Эйнштейн, исходя из корпускулярных представлений о свете, смог объяснить все особенности обнаруженного Герцем явления. Предполагая, что электромагнитная энергия распространяется в виде корпускул - квантов, Эйнштейн написал следующее выражение:

$$h\nu = A + \frac{mv^2}{2}, \quad (1)$$

которое выражает закон сохранения и превращения энергии при фотоэффекте. Слева стоит величина энергии кванта света (по гипотезе Планка), - справа-первый член определяет работу по вырыванию заряда(в данном случае электрона) из металлической пластинки,второй член определяет кинетическую энергию свободного электрона.

В 1923 г американский физик А. Комптон экспериментально изучил рассеяние света на неподвижных электронах. В результате рассеяния уменьшалась частота света. Волновая теория не могла объяснить этот эффект. Согласно классической теории частота рассеянного света должна остаться прежней. Только рассматривая свет как поток корпускул, квантов, применяя формулы специальной теории относительности и решая задачу на столкновение, можно было объяснить все особенности эффекта Комптона.

Итак, существуют явления (интерференция, дифракция, поляризация), в которых свет проявляет волновые свойства, в других (фотоэффект, комптон-эффект) – корпускулярные. Но очень важно отметить, что не существует эксперимента, в котором волновые и корпускулярные свойства у света проявлялись бы одновременно.

1.4. Корпускулярные и волновые свойства элементарных частиц

К началу 20-х годов XXв. были известны три элементарные частицы: электрон, протон и фотон. В явлении Комптона, в фотоэффекте, в опытах по рассеянию атомов (опыты Резерфорда) при наблюдении отклонения заряженных частиц в электрическом и магнитном полях элементарные частицы проявляли корпускулярные свойства.

Но в 1921 г. двумя физиками Рамзауэром и Таунсендом был поставлен опыт по рассеянию электронов на атомах инертных газов. Результат опыта оказался неожиданным и представлен на графике (рис.2.), по осям координат отложены v -скорость электронов, σ -эффективное сечение рассеяния.

При больших скоростях движения электронов мало их время взаимодействия с центрами рассеяния, поэтому большинство электронов не изменит направление своего движения, эффективное сечение рассеяния будет малым. При уменьшении скорости электронов сечение рассеяния должно возрасти, это соответствует классическим законам соударений. Однако, вопреки ожиданиям, при определенной скорости движения электронов происходило резкое падение эффективного сечения рассеяния, и только затем оно снова стало нарастать. Исходя из представлений, что электроны являются корпускулами, опыт Рамзауэра-Таунсенда объяснить было нельзя.

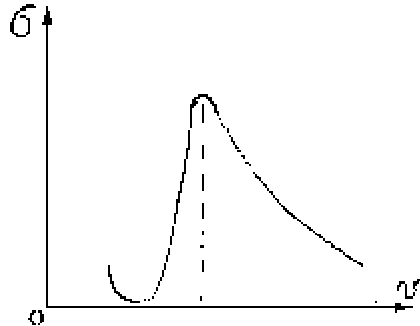


Рис. 2.

Чтобы объяснить то новое, что физики увидели в опытах Рамзауэра-Таунсенда, забежим немного вперед. В 1923г. французский физик Луи де-Бройль, занимаясь историей физики, обратил внимание на двойственность проявления свойств света: в одних опытах свет проявляет волновые свойства, в других - корпускулярные (мы обсуждали это выше). Де-Бройлю пришла на ум “безумная” идея: а не обладают ли и частицы вещества (электроны и протоны) не только корпускулярными, но и волновыми свойствами? Волновые свойства света характеризуются длиной волны λ . Поэтому, решил де-Бройль, нужно ввести длину волны для частиц, чтобы характеризовать их волновые свойства. И он постулирует следующую формулу:

$$\lambda = \frac{h}{mv}, \tag{2}$$

где h -постоянная Планка, m -масса частицы, λ - характеристика волновых свойств частицы, v -скорость ее движения. Объясним опыт по рассеянию электронов на атомах инертных газов, опираясь на гипотезу де-Бройля. Если электроны обладают волновыми свойствами, то, встречая пре-

пятстве, электроны должны испытывать явление дифракции. Но при этом очень важно, чтобы размеры препятствия были сравнимы с длиной волны. Из формулы видно, что это может осуществиться при определенной скорости движения электронов. В этом случае волна огибает препятствие и заходит в область “геометрической тени”. При этом должно резко уменьшится рассеяние электронов, что и наблюдалось в опыте Рамзауэра-Таунсенда, а на графике – соответствует резкому падению кривой рассеяния. Таким образом, чтобы объяснить рассматриваемый опыт, нужно было выйти за пределы классических представлений и признать, что электроны обладают не только корпускулярными, но и волновыми свойствами. Однако, утверждение о том, что *электроны обладают волновыми свойствами не эквивалентно утверждению, что элементарная частица-это волна*. Ниже мы неоднократно будем останавливаться на важном различии этих понятий.

2. Гипотеза де-Бройля

Сформулируем еще раз суть гипотезы де-Бройля и проанализируем следствия из нее.

Помимо соотношения для длины волны $\lambda = \frac{h}{mv}$, де-Бройль постулирует для частиц еще два соотношения, которые являются не чем иным, как формулами А. Эйнштейна, использованных им для объяснения явления фотоэффекта:

$$E = \hbar \omega = \hbar \nu \quad (3)$$

и

$$p = \frac{h\nu}{c} = \hbar k,$$

где $\omega = 2\pi\nu$ - циклическая частота, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ - волновое число, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Первоначально де-Бройль вкладывал в свою гипотезу прямой смысл- частица является волной.

Потребовалось значительное время, глубокое осмысление этой гипотезы крупнейшими физиками XX в. (Бор, Шредингер, Гейзенберг, Борн, Дирак и др.), чтобы прийти к современному толкованию гипотезы де - Бройля.

Для описания волновых свойств частиц де-Бройль использует формулу волновой функции плоской волны:

$$\Psi = Ae^{-i(wt-kx)}. \quad (4)$$

Так как волновая функция является комплексной величиной, то физического смысла она иметь не может. Ниже мы покажем, что познавательное значение имеет не сама волновая функция де-Бройля, а квадрат ее модуля.

Применительно к описанию дуалистических свойств элементарных частиц эти формулы (2), (3) называют формулами де-Бройля.

В этих формулах связываются корпускулярные и волновые характеристики свойств элементарных частиц. Действительно, в левых частях формул стоят чисто механические характеристики, справа же - характеристика волнового процесса - частота. Здесь прослеживается диалектическое единство корпускулярно - волновых свойств элементарных частиц. Воспользуемся этими уравнениями и преобразуем выражение для волны де-Бройля (4):

$$w = \frac{E}{h} \quad \text{и} \quad k = \frac{p}{h}.$$

Тогда волновую функцию можно записать так:

$$\Psi = Ae^{\frac{i(Et-px)}{h}}.$$

Выражение, стоящее в скобках в экспоненте - $(Et - px)$, называется фазой волны де-Бройля.

Определим, с какой скоростью перемещается геометрическое место точек (ГМТ), имеющих одну и ту же фазу. Поскольку у этих ГМТ фаза одна и та же, можем написать равенство:

$$wt - kx = const$$

Составим производную по t:

$$w - k(dx/dt) = 0$$

Обозначим: $dx/dt = U_\phi$ где: U_ϕ - фазовая скорость волны де-Бройля (скорость перемещения постоянной фазы). Откуда: $w/k = U_\phi$.

Покажем, что фазовая скорость может быть больше скорости света. Следовательно, фазовая скорость - это чисто математическое понятие. Поскольку элементарные частицы могут двигаться со скоростями, близкими к скорости света, то необходимо воспользоваться формулами СТО. Проведем элементарные преобразования формулы для U_ϕ : Воспользуемся формулами (3):

$$U_{\phi} = \frac{w}{k} \cdot \frac{\mathbf{h}}{\mathbf{h}} = \frac{E}{p} = \frac{\frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{n^2}{c^2}}}}{\frac{m\mathbf{n}}{\sqrt{1-\frac{n^2}{c^2}}}} = \frac{mc^2}{m\mathbf{n}} = \frac{c^2}{\mathbf{n}} > c$$

Этот результат указывает на то, что с фазовой скоростью волны де-Бройля не связан материальный процесс, который, согласно специальной теории относительности, не может перемещаться в пространстве со скоростью, большей скорости света в вакууме.

Установим так называемый закон дисперсии. В физике под этим законом понимают зависимость какой-либо величины от \mathbf{l} или k . Мы установим закон дисперсии для фазовой скорости. Воспользуемся полученным выше выражением. Заменим E в числителе с помощью второй формулы Эйнштейна:

$$U_{\phi} = \frac{E}{p} = \frac{\sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}}{\mathbf{h}k} = \sqrt{c^2 + \frac{m^2 c^4}{\mathbf{h}^2 k^2}}$$

Из приведенных расчетов следует, что U_{ϕ} - сложная функция волнового числа. Это выражение получило название закона дисперсии для фазовой скорости. Из этой формулы следует, что для разных k и U_{ϕ} - разная.

Проведенный выше анализ показывает, что волновая функция де-Бройля не имеет непосредственного физического смысла. Кроме того, к тому, что было сказано выше, можно сделать дополнение: формула для волновой функции де-Бройля имеет вид плоской волны, а плоская волна безгранична по своему определению. Элементарная же частица всегда локализована в пространстве. Последнее еще раз указывает на то, что волновая функция де-Бройля не описывает физического процесса.

Воспользуемся вторым уравнением де-Бройля и получим ту формулу, которую де-Бройль первоначально написал как самостоятельную, независимую, постулируемую:

$$p = \frac{\mathbf{h}\mathbf{n}}{c} = \frac{\mathbf{h}w}{c}$$

Переходя от частоты к длине волны, можно записать импульс p и в такой форме:

$$p = \hbar k = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{l} = \frac{h}{l}.$$

А так как $p = mv$, то мы тотчас же получаем формулу де-Бройля (2):

$$l = \frac{h}{mv}. \quad (2)$$

Как уже отмечалось выше, уравнения де-Бройля содержат физические характеристики, которые с классической точки зрения не могут быть совместимыми. Действительно, в формулах:

$$E = \hbar \omega; \quad p = \hbar k$$

слева стоят характеристики, определяющие свойства корпускул (частиц), справа - характеристики волнового процесса, который нельзя себе представить локализованным в одной точке, в которой может находиться частица. Дуальность подхода к свойствам элементарных частиц - это принципиальное положение квантовой механики. Ниже будет показано, что это обусловлено неадекватностью (несоответствием) используемого классического физического словаря для описания свойств частиц микромира. Ранее было показано, что употреблять, сопоставлять, микрочастице плоскую волну де-Бройля нельзя (волна де-Бройля - это плоская бегущая волна, не имеющая локализации, границ; частица же - это локализованный физический объект). Из теории волновых процессов известно, что, образуя суперпозицию плоских волн всевозможных частот, можно создать локализованное волновое образование. Это образование получило название волнового пакета. Возникает вопрос: а нельзя ли элементарную частицу рассматривать как волновой пакет?

3. Волновой пакет

Выразим сформулированное выше представление о волновом пакете математическим языком. Построим волновой пакет в виде суперпозиции плоских волн де-Бройля. Возьмем интервал изменения частоты в пределах от $\omega + \Delta\omega$ до $\omega - \Delta\omega$, или в интервале волнового числа от $k_0 + a$ до $k_0 - a$, где $a \ll k_0$. Это означает, что мы рассматриваем плоские волны, длины волн которых находятся в узком интервале $\Delta\omega \ll \omega$:

$$\Psi = \int_{k_0-a}^{k_0+a} A(k) e^{-i(w-kr)} dk .$$

Интеграл означает, что берется сумма бесконечно близких по волновому числу волн де-Бройля. Подынтегральное выражение - общая запись волны де-Бройля. Для общности предполагаем, что A - амплитуда волны также зависит от волнового числа. Так как мы составляем суперпозицию различных волн, то интегрирование ведется по волновому числу.

Для взятия этого интеграла проведем элементарные преобразования показателя степени у подынтегральной функции:

$$\begin{aligned} wt - kr &= (w - w_0)t - (k - k_0)r + w_0t - k_0x = \\ &= [(w - w_0)t - (k - k_0)r] + w_0t - k_0x. \end{aligned}$$

Подставим этот показатель степени в подынтегральное выражение:

$$\Psi = \int_{k_0-a}^{k_0+a} A(k) e^{-i[(w-w_0)t - (k-k_0)x]} \cdot e^{-i(w_0t - k_0x)} dk = B(k) e^{-i(w-k_0x)},$$

где величина $B(k)$ называется амплитудой волнового пакета (т. е. группы волн):

$$B(k) = \int_{k_0-a}^{k_0+a} A(k) e^{-i[(w-w_0)t - (k-k_0)x]} dk.$$

Определим, с какой скоростью перемещается в пространстве и во времени амплитуда волнового пакета. Для этого составим условие, аналогичное тому, которое мы составляли для нахождения фазовой скорости волны де-Бройля.

Выражение $(w - w_0)t - (k - k_0)x = const$ определяет положение волнового пакета. У всех точек, соответствующих этому условию, фаза волнового пакета одна и та же. Составим производную по времени от этого выражения:

$$\frac{dx}{dt} = U_{gp} = \frac{(w - w_0)}{(k - k_0)}$$

По правилу составления волнового пакета величины, стоящие в числителе и знаменателе полученного равенства, являются величинами бесконечно малыми. Заменим конечные разности бесконечно малыми величинами:

$$\frac{(\omega - \omega_0)}{(k - k_0)} = \frac{d\omega}{dk}$$

Получили выражение для вычисления скорости перемещения амплитуды группы волн, то есть самого волнового пакета:

$$U_{gp} = \frac{d\omega}{dk}$$

Проведем элементарные преобразования полученной формулы:

$$U_{gp} = \frac{d\omega}{dk} \cdot \frac{\mathbf{h}}{\mathbf{h}} = \frac{d(\mathbf{h}\omega)}{d(\mathbf{h}k)} = \frac{dE}{dp}$$

Воспользуемся второй формулой Эйнштейна:

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2},$$

тогда, проведя элементарные преобразования и учитывая, что

$$\mathbf{p} = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}},$$

получим неожиданный результат, что групповая скорость U_{gp} совпадает со скоростью перемещения частицы v .

Несмотря на то, что внешне мы получили хороший результат (скорость группового пакета совпадает со скоростью частицы), на самом деле этого наблюдать нельзя, т. к. каждая волна, составляющая волновой пакет, является функцией своего волнового числа. А ранее мы доказали, что имеется дисперсия между фазовой скоростью и волновым числом. Волновой пакет, имеющий локализацию в интервале $2a$, с течением времени будет расплываться, т. к. каждая плоская волна, составляющая волновой пакет, будет двигаться со своей фазовой скоростью. И все же за небольшой промежуток времени, в течение которого можно пренебречь «расплыванием» волнового пакета, понятием волнового пакета можно пользоваться в некоторых задачах (время наблюдения \ll времени расплывания). Использование волнового пакета с этой точки зрения оправдано.

4. Экспериментальное подтверждение гипотезы де-Бройля

Помимо рассмотренного выше опыта Рамзауэра - Таундсена, в 1927 году появилась целая серия опытов, в которых обнаруживались волновые свойства элементарных частиц.

Американские физики Джермер и Девиссон наблюдали дифракцию электронов на монокристаллах. На флуоресцирующем экране возникала дифракционная картина, подобная той, что возникает при наблюдении дифракции рентгеновских лучей. При этом выполнялось условие В. Брегга.

В том же году американский физик Томсон и советский физик Тартаковский наблюдали дифракцию потока электронов на поликристаллах.

В 1949 году три советских физика: Сушкин, Биберман, Фабрикант наблюдали дифракцию электронов, но при этом на экран направлялся не поток электронов, как в предыдущих опытах, а при помощи специального устройства на экран попадали отдельные электроны. Конечно, каждый электрон фиксировался в некоторой точке экрана, но после пропускания большого количества одиночных электронов на экране возникала та же картина, что и у исследователей, использовавших мощные потоки электронов.

Опыты трех советских физиков показали, что волновыми свойствами обладает каждая элементарная частица.

В 30 - 40 года были открыты новые элементарные частицы, в том числе нейтроны, p -, m - мезоны и т. д. С этими элементарными частицами так же ставились опыты по дифракции, и всегда наблюдалась ожидаемая волновая картина. Волновые свойства проявляют и легкие атомы. Из формулы (2) де-Бройля следует: чем больше масса частицы при данной скорости, тем меньше длина волны де-Бройля. Т. е. у массивных атомов практически не должны проявляться волновые свойства.

Волновые свойства электронного пучка и других элементарных частиц ныне используются при устройстве электронных и ионных микроскопов, в электроно- и нейтроно-графии.

5. Гипотеза Макса Борна

В 1926 году немецкий физик Макс Борн дал следующее толкование волновой функции де-Бройля: волновая функция физического смысла иметь не может, т. к. является комплексной величиной, но квадрат её модуля является вещественной величиной и поэтому М. Борн приписал именно этой вещественной величине смысл плотности вероятности:

$|\Psi(x, t)|^2$ определяет плотность вероятности обнаружения частицы в окрестности некоторой точки в некоторый момент времени. Опыты Сушкина, Бибермана, Фабриканта еще раз подтвердили разумность гипотезы М. Борна. Каждый электрон в их опыте дифрагировал самостоятельно. Он обязательно должен был попасть на экран, но место попадания на экран

заранее предсказать невозможно. Этот акт носит вероятностный характер и квадрат модуля волновой функции определяет вероятность этого процесса. Выделим бесконечно малый объем dV и умножим на $|\Psi|^2$, мы получим величину, определяющую вероятность обнаружения частицы в элементарном объеме dV :

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

Откуда:

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

что и оправдывает толкование $|\Psi|^2$, как плотности вероятности.

Как было указано выше, основной задачей в квантовой механики является нахождение волновой функции для элементарной частицы в конкретной задаче, т. к. это знание (при выполнении условий задачи) позволяет определить свойства самой частицы и ожидаемый характер ее поведения в пространстве и во времени.

Ниже мы покажем, что для решения этой задачи необходимо каждый раз решать специфическое, квантово-механическое уравнение, которое получило название уравнения Шредингера.

Знание волновой функции позволяет составить квадрат ее модуля в любой последующий момент времени для любой точки пространства при задании начальных условий. Это означает, что можно говорить о выполнении и в квантовой механике закона причинности. Однако в силу специфичности смысла квадрата модуля волновой функции этот закон в квантовой механике носит не детерминистический, не однозначный, как в классической физике, а вероятностный характер.

Покажем, как, зная волновую функцию, рассчитать ожидаемое среднее значение физической величины. Известно, что если физическая величина принимает ряд дискретных значений, то её среднее значение можно найти по формуле:

$$\bar{x} = \frac{\sum x_i n_i}{\sum n_i} ,$$

где $\sum n_i = N$ – полное число измерений, а x_i – результаты отдельных измерений, каждое из которых появлялось n_i -раз.

Проведем элементарные преобразования последней формулы.

$$\bar{x} = W_1 x_1 + W_2 x_2 + \dots = \sum W_i x_i ,$$

где W_i - вероятность появления x_i измерения.

Если физическая величина изменяется непрерывно, то формула для нахождения среднего значения запишется так:

$$\bar{x} = \int x dW = \int x |\Psi|^2 dV .$$

Обычно эту формулу записывают так:

$$\bar{x} = \int \Psi^* x \Psi dV ,$$

где учтено, что $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ по определению квадрата модуля комплексной величины (Ψ^* - это величина, комплексно сопряженная Ψ).

Под символом \bar{x} в последних рассуждениях нужно понимать любую физическую характеристику элементарной частицы или системы таких частиц.

Таким образом, знание волновой функции Ψ для частицы или ансамбля частиц позволяет путем расчета определить средние (наблюдаемые, измеряемые на опыте) значения физических характеристик частиц микромира.

Отсюда следует, что основной задачей в квантовой механике является нахождение волновой функции частиц в конкретных задачах.

Полученная формула для расчета среднего значения физической характеристики частиц микромира является следствием гипотезы М. Борна о вероятностном толковании смысла волновой функции Ψ . Поэтому только опыт мог подтвердить или отвергнуть такое понимание смысла волновой функции. Далее мы увидим, что гипотеза М. Борна блестяще подтвердилась в эксперименте.

Проанализируем формулу для длины волны де-Бройля:

$$\lambda = \frac{h}{mv} .$$

Слева - характеристика волны. По своему смыслу, она не может быть функцией координаты (бессмысленно спрашивать, какова длина волны в некоторой точке). Но если у нас имеется равенство и левая сторона не зависит от координаты, то и правая часть не должна зависеть от

координаты. Поэтому скорость элементарной частицы так же не может быть функцией координаты. В классической механике для описания движения тела необходимо найти скорость, как функцию координат и времени. В квантовой механике скорость не является функцией координат, а значит нельзя вводить понятие траектории частицы.

Поэтому модель атома Резерфорда - Бора с точки зрения квантовой механики не верна. По этой модели электрон движется по траектории вокруг ядра. В квантовой механике мы должны обходиться без этого понятия. Мы можем говорить лишь о вероятности нахождения электрона в той или иной точке объема атома.

6. Соотношения неопределенностей Гейзенберга

Выше мы показали, что состояние элементарной частицы нельзя описывать волновым пакетом (тем более одной плоской волной), т. к. из-за дисперсии с течением времени волновой пакет будет расплываться, в то время, как элементарная частица ведет себя локализовано.

Мы показали, используя формулу длины волны де-Бройля, что у элементарной частицы (в том числе и у электрона в атоме) нет такой характеристики движения, как траектория. Это означает, что мы не можем одновременно, как это делалось в классической физике, указать для элементарной частицы ее координату и соответствующую ей проекцию скорости (импульса). Этот результат есть выражение корпускулярно - волнового дуализма, который проявляют элементарные частицы. И если мы продолжаем пользоваться словарем классической физики-то можно лишь говорить о нахождении частицы в некотором интервале значений координаты. Соответственно, и скорость частицы или ее импульс могут иметь значения тоже лишь в некотором интервале значений. Эти интервалы значений скорости или импульса и координаты связаны между собой так называемым соотношением неопределенностей Гейзенберга, которые, как следует из предыдущего анализа, являются выражением корпускулярно-волнового дуализма элементарных частиц.

Воспользуемся формулой для амплитуды волнового пакета:

$$B = \int_{k_o - a}^{k_o + a} A e^{-i[(w - w_o)t - (k - k_o)x]} dk =$$

$$= e^{-i(\omega - \omega_0)t} \int_{k_0 - a}^{k_0 + a} A e^{i(k - k_0)x} dk =$$

Выберем настолько узкий интервал изменения волнового числа, чтобы считать амплитуду A постоянной величиной и вынесем её из под знака интеграла:

$$B = A e^{-i(\omega - \omega_0)t} \int_{k_0 - a}^{k_0 + a} \exp[i(k - k_0)x] dk$$

Как было показано ранее, волновой пакет может рассматриваться как аналог элементарной частицы только в продолжении бесконечно малого промежутка времени, так как в результате дисперсии волновой пакет размывается. Чем уже волновой пакет, чем больше его амплитуда, тем лучше волновой пакет может быть сопоставлен частице. Последняя формула показывает, что амплитуда будет тем больше, чем больше стоящий в формуле интеграл:

$$\int_{k_0 - a}^{k_0 + a} [i(k - k_0)x] dk = J$$

Подсчитаем значение этого интеграла, перейдем к другим переменным:

$$p_x = \hbar k_x, \quad p_0 = \hbar k_0, \quad k_x = \frac{p_x}{\hbar}, \quad k_0 = \frac{p_0}{\hbar}, \quad dk_x = \frac{dp_x}{\hbar},$$

тогда значение амплитуды волнового пакета определяется исключительно интегралом

$$J = \int_{\frac{p_0}{\hbar} - \frac{\Delta p}{\hbar}}^{\frac{p_0}{\hbar} + \frac{\Delta p}{\hbar}} e^{i\left(\frac{p_x}{\hbar} - \frac{p_0}{\hbar}\right)x} \frac{dp_x}{\hbar}$$

Сделаем новую замену $x \Rightarrow \frac{\Delta x}{2}$, воспользуемся формулой Эйлера для комплексной величины $e^{ia} = \cos a + i \sin a$, тогда значение интеграла J можно представить следующим образом:

$$J = \frac{\sin \frac{\Delta p_x \Delta x}{2\hbar}}{\frac{\Delta x}{2}} \exp\left(-i \frac{p_x \Delta x}{2\hbar}\right)$$

Второй множитель осцилирует около значения $\frac{\Delta x}{2}$. Поэтому для величины амплитуды определяющее значение имеет первый (дробный) множитель. Известно, что этот множитель будет иметь максимальное значение

$$\text{при } \frac{\Delta x}{2} \rightarrow 0:$$

$$\frac{\sin \frac{\Delta p_x \Delta x}{2\hbar}}{\frac{\Delta x}{2}} \rightarrow 1.$$

Это максимальное значение рассматриваемого множителя. Определим минимальное значение, следовательно, и амплитуды группы волн. Тем самым мы определим ту область значений $\Delta x / 2$, в интервале которого амплитуду можно считать отличной от нуля и рассматривать группу волн как аналог элементарной частицы.

Это минимальное значение множитель принимает, если аргумент синуса будет равен p :

$$\frac{\Delta p_x \Delta x}{2\hbar} = p \Rightarrow \Delta p_x \Delta x = 2p \frac{h}{2p} = h,$$

откуда получаем знаменитое соотношение неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta p_x \Delta x = h. \quad (6.1)$$

Таким образом, если интервалы значений координаты и импульса частицы находятся в пределах Δx и Δp_x , которые удовлетворяют полученному соотношению, то можно говорить, что за пределами указанных значений волновой пакет уже нельзя сопоставлять элементарной частице.

Если рассматривается движение волнового пакета, сопоставляемого элементарной частице, в направлениях осей OY и OZ , то мы аналогично получим два новых соотношения неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta y \Delta p_y = h, \quad \Delta z \Delta p_z = h. \quad (6.2)$$

Выше мы говорили, что для элементарной частицы с точки зрения квантовой механики такого понятия, как траектория нет. Поэтому нет таких одновременно измеряемых характеристик, как координата и проекция импульса. Об этом и говорят соотношения неопределенностей Гейзенберга: раз нет траектории - нет точных значений координаты и импульса. И эти характеристики можно использовать только с некоторой неопределенностью значений. Зная координату абсолютно точно (т. е. $\Delta x = 0$), мы ничего не можем сказать о проекции импульса, т. к.:

$$\Delta p = \frac{h}{\Delta x} = \infty.$$

Верно и обратное утверждение: если $\Delta p_x = 0$, то:

$$\Delta x = \frac{h}{\Delta p_x} = \infty.$$

Рассмотрим несколько мысленных экспериментов, подтверждающих соотношения неопределенностей Гейзенберга.

1. Пусть на пути пучка электронов перпендикулярно ему располагается экран с вертикальной щелью ширины d . Таким образом, неопределенность координаты $\Delta y = d$. С другой стороны, из-за дифракции возникает неопределенность и импульса. Действительно, первый дифракционный минимум будет располагаться под углом Θ , который определяется условием

$$d \sin \Theta = \lambda,$$

откуда $\sin \Theta = \frac{\lambda}{d}$.

Разброс импульса в направлении Oy будет определяться так:

$$\Delta p_y = p \sin \Theta = \hbar k \sin \Theta.$$

Справедливо,

$$\Delta p_y = \hbar k \sin \Theta = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \sin \Theta = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{d} = \frac{h}{\Delta y},$$

или

$$\Delta y \cdot \Delta p_y = h.$$

2. Пусть электрон сталкивается с электроном атома в фотоэмульсии. Неопределенность положения электрона равна размеру атома $\approx a$. С

другой стороны, электроны атома имеют неопределенность импульса

$$\Delta p_x \cong \frac{h}{a}.$$

Точно такую же неопределенность импульса приобретает падающий электрон:

$$\Delta p_x \approx \frac{h}{a}.$$

Следовательно,

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \cong a \cdot \frac{h}{a} = h.$$

Аналогично можно рассмотреть треки частиц в камере Вильсона. Но здесь явление осложняется диффузией капелек паров.

3. Пусть частица рассматривается в микроскоп. Тогда минимальные размеры, которые возможно увидеть в микроскоп определяются разрешающей способностью прибора. Определяемой по формуле:

$$\Delta x = \frac{l}{\sin a},$$

где $2a$ - угол, под которым из предмета (частицы) виден объектив. Фотон, рассеянный в направлении оси Ox будет иметь составляющую импульса

$$\Delta p_x = \mathbf{h} \cdot k \cdot \sin a = \frac{h}{2p} \cdot \frac{2p}{l} \cdot \frac{l}{\Delta x} = \frac{h}{\Delta x},$$

откуда $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h$.

Получим еще одно соотношение, которое называется соотношением неопределенностей Гейзенберга для энергии и времени. Из рассмотрения свойств волнового пакета мы вывели соотношения неопределенностей Гейзенберга. Воспользуемся одним из них:

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

где Δx – ширина волнового пакета (от 1-го минимума слева до 1-го минимума справа от середины волнового пакета). Там же мы получили, что, рассматривая волновой пакет как аналог элементарной частицы, групповая скорость волнового пакета совпадает со скоростью частицы. Разделим приведенное выше соотношение неопределенностей Гейзенберга на скорость v_x группового пакета:

$$\frac{\Delta x}{v_x} \cdot \Delta p_x = \frac{h}{v_x}, \text{ или } \Delta t \cdot \Delta p_x = \frac{h}{v_x}.$$

Рассмотрим отдельно величину

$$v_x \cdot \Delta p_x = \frac{mv_x}{m} \cdot \Delta p_x = \frac{p_x \Delta p_x}{m} = \frac{\Delta p_x^2}{2m} = \Delta \frac{p_x^2}{2m} = \Delta E,$$

где под энергией E понимается кинетическая энергия свободной частицы, которой сопоставляется волновой пакет. Мы получили очень важное соотношение неопределенностей Гейзенберга, которое широко используется для истолкования процессов в микромире, начиная для объяснения естественной ширины спектральных линий и кончая гигантскими флюктуациями энергии в физическом вакууме. Это соотношение записывается так:

$$\Delta E \cdot \Delta t = h. \quad (6.3)$$

Это соотношение (6.3) толкуется иначе, чем соотношения (6.1) и (6.2). Дело в том, что не имеет смысла говорить о неопределенности момента времени. Под Δt нужно понимать не неопределенность, а промежуток времени пребывания квантовой системы в состоянии с энергией, значение которой находится в интервале $E \div E + \Delta E$. Покажем, как соотношение (6.3) позволяет понять происхождение естественной ширины спектральных линий. Дело в том, что в возбужденном состоянии атом может находиться в течение времени Δt . Следовательно, это состояние имеет неопределенность энергии ΔE и при возвращении в нормальное состояние спектральная линия имеет “размытость” порядка

$$\Delta w = \frac{\Delta E}{h}. \quad (6.4)$$

Формула (6.3) позволяет понять возможность нарушения закона сохранения и превращения энергии за ничтожно малый промежуток времени, недоступный практическому измерению. Говорят о нарушении ЗСПЭ для виртуальных процессов. Следует заметить, что часто под промежутком времени Δt в формуле (6.3) понимают время перехода электрона из возбужденного состояния в основное. Это совершенно неверно. Дело в том, что изучаемая нами квантовая механика является **НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ** и в ней, как и в нерелятивистской классической механике, возможны бесконечно быстрые процессы, переход электрона из возбужденного состояния в основное происходит **МГНОВЕННО**. И величина Δt из формулы (6.3) к этому процессу перехода никакого отношения **НЕ ИМЕЕТ**.

Первоначально соотношения неопределенностей Гейзенберга пытались истолковать, как условия, которые ограничивают наши знания, наши возможности в познании микромира. В действительности же в этих соотношениях нет такого философского утверждения. Для описания свойств элементарных частиц мы использовали язык классической физики. Соотношения неопределенностей Гейзенберга говорят о том, что язык классической физики не может точно описывать свойства частиц микромира. Действительно, в классической физике элементарная частица в данный момент времени имеет точно определенную координату своего местоположения и точно определенную скорость в этом месте. В нахождении этих величин и состоит основная задача классической механики. Если же в квантовой механике соответствующие характеристики элементарной частицы нельзя определить одновременно точно (об этом и говорят соотношения неопределенностей Гейзенберга), то, следовательно, эти понятия - координата и проекция импульса на соответствующую ось, не могут рассматриваться как характеристики элементарной частицы, задаваемые в один и тот же момент времени.

Итак, мы должны согласиться, что в квантовой механике нет такого понятия как траектория, потому что признание реальности траектории тот час же потребует введения координаты частицы и соответствующей проекции скорости (импульса) в этой точке.

Отрицание траектории будет естественным, если мы признаем корпускулярно-волновой дуализм проявления свойств элементарной частицы, признаем, что состояние элементарной частицы можно описать, задавая ее состояние при помощи волновой функции.

Соотношения неопределенностей Гейзенберга (СНГ) не ограничивают познание мира, а наоборот, указывают на необходимость нового, не классического, подхода к описанию свойств элементарных частиц. Новый подход требует и нового языка, новых физических образов, отказа от некоторых старых понятий и образов, как-то траектория, координата, проекция скорости на соответствующее направление, которую одновременно с координатой точно определить нельзя.

Если проанализировать опыты, лежащие в основании квантовой механики, то обнаружится важная закономерность: в одних опытах мы можем определить только местоположение элементарной частицы, ее координату. Но при этом ничего не можем сказать о ее импульсе. В других же опытах можно четко определить импульс частицы, но ничего достоверного нельзя сказать о ее местонахождении. В одних опытах проявляются корпускулярные свойства, в других - только волновые. Например, треки в камере Вильсона с определенной точностью указывают местонахождение

ние частицы, но их наблюдение ничего не скажет об импульсе этой частицы в любой точке трека, так как мы не знаем, со сколькими структурными частицами среды встретилась элементарная частица и какое количество движения она им передала. В эффекте Комптона проявляются корпускулярные свойства фотона и электрона. Однако, в этом эффекте мы ничего не можем сказать о местоположении фотона. При рассмотрении дифракции частиц на кристаллической решетке обнаруживаются их волновые свойства, но мы не можем получить какие – нибудь сведения о их корпускулярных свойствах.

Рассмотренное выше содержание СНГ нашло свое развитие в так называемом принципе дополнительности, высказанного Н.Бором в том же 1927г. Существуют две группы физических характеристик элементарных частиц, утверждает Нильс Бор, например координата и соответствующая ей проекция импульса, которые одновременно в одном опыте определить нельзя. Другими словами, существуют два класса физических приборов, с помощью которых можно определить либо корпускулярную, либо волновую характеристику элементарной частицы. Свой принцип дополнительности Н.Бор сформулировал так: две группы физических величин, определяющие либо корпускулярные, либо волновые характеристики элементарных частиц, дополняют друг друга и дают полное описание свойств элементарной частицы на языке классической физики. Из сопоставления содержания СНГ и принципа дополнительности Н.Бора можно сделать вывод об идентичности их физического содержания, СНГ являются математическим выражением принципа дополнительности Н.Бора.