

было так, то потемнение фотопластинки, на которую попадает дифрагированная волна (отдельный электрон), было бы бледной копией потемнения, образованного многими электронами. Отдельный электрон сразу давал бы всю картину интерференции.

Мы подчеркивали, что на опыте отдельный электрон попадает в определенную точку пластинки как обычная корпускула. Отличие отдельного электрона от корпускулы проявляется в том, что места попадания на фотопластинку определяются совершенно иным законом, чем места попадания корпускулы. Таким образом, волновые свойства, как показывает дифракционный опыт, присущи каждому отдельному электрону, но наглядно выявляются они только в большом числе одинаковых экспериментов (последовательное прохождение большого числа электронов).

Заметим, что хотя всюду говорилось об электроне, это в равной степени относится и к любой другой микрочастице. Дифракционные опыты были осуществлены с нейтронами, протонами и другими микрочастицами.

Квантовомеханическая трактовка описанных дифракционных опытов будет дана в следующем параграфе. Здесь мы еще раз подчеркнем, что в дифракционных опытах с электронами проявляется тот же корпускулярно-волновой дуализм, который ранее был установлен для световых квантов.

Дифракционные опыты позволяют дать ответ на вопрос: «что такое электрон — волна или корпускула?». При этом в термины «волна» и «корпускула» мы вкладываем привычный нам классический смысл. Ответ, непосредственно вытекающий из описанных опытов, заключается в том, что электрон не является ни волной (иначе один электрон давал бы полную дифракционную картину), ни корпускулой, которая движется по определенной траектории (как это показывает опыт с двумя щелями). Электрон является микрочастицей, обладающей специфическими свойствами.

§ 2. Волновая функция

Наличие у электрона волновых свойств показывает, что электрону следует сопоставить некоторое волновое поле. Амплитуду этого волнового поля, зависящую от координат и времени, мы будем называть волновой функцией $\psi(x, y, z, t)$. Иногда ее для краткости именуют также ψ -функцией.

Физическое толкование волновой функции (впервые данное М. Борном) заключается в следующем: величина $|\psi(x, y, z, t)|^2 dV$ пропорциональна вероятности того, что электрон будет обнару-

жен в момент времени t в элементе объема dV , расположенном в окрестности точки x, y, z .

Обозначая эту вероятность через dW , имеем

$$dW \sim |\psi(x, y, z, t)|^2 dV. \quad (2,1)$$

Основанием для подобной трактовки служат следующие рассуждения. В опытах с пропусканием отдельных электронов через одну или две щели мы видели, что место попадания электрона на фотопластинку являлось до известной степени случайным. Электрон мог совершенно случайно попасть в ту или иную точку будущего дифракционного кольца. Поэтому поведение электрона должно характеризоваться некоторой вероятностной функцией. Интенсивность почернения пластинки в данном месте пропорциональна числу попадающих электронов. Ясно, с другой стороны, что эта вероятностная функция должна быть связана со свойствами волнового поля. Только при этом можно совместить вероятностный характер потемнения пластинки в данном месте со строгим пространственным распределением полос потемнения. Именно совместить случайный характер попадания электрона в данную точку с его волновыми свойствами можно только допустив, что вероятность обнаружения электрона в данном месте пропорциональна интенсивности волнового поля $|\psi|^2$. Эта связь и дается формулой (2,1).

Физическая трактовка волновой функции, даваемая формулой (2,1), ясно показывает, что волновое поле $\psi(x, y, z, t)$ существенно отличается от других волновых полей, известных в классической физике. Это особенно наглядно проявляется в том, что непосредственный физический смысл имеет только величина $|\psi|^2$. Сама волновая функция может быть, вообще говоря, комплексной величиной. Кроме того, волновые функции ψ и $A\psi$, где A — любая постоянная, отвечают одному и тому же физическому состоянию частицы, поскольку в силу определения (2,1) обе эти волновые функции приводят к одному и тому же пространственно-временному распределению вероятности обнаружения частицы.

В силу теоремы сложения вероятностей (см. § 2 ч. III) определение (2,1) может быть дополнено следующим условием нормировки:

$$\int |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1, \quad (2,2)$$

где стоящий слева интеграл, взятый по всему пространству, есть вероятность обнаружить частицу в момент времени t в любой точке пространства. Эта вероятность естественно равна единице. Волновые функции ψ , удовлетворяющие условию нормировки, называются нормированными. Для нормированных волновых

функций соотношение (2,1) можно переписать в виде

$$dW = |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = \rho(x, y, z, t) dV, \quad (2,3)$$

где $\rho(x, y, z, t)$ — плотность вероятности. Вероятность $W(V, t)$ обнаружения частицы в некотором конечном объеме V в момент времени t по теореме сложения вероятностей равна

$$W(V, t) = \int_V dW = \int_V |\psi(x, y, z, t)|^2 dV. \quad (2,4)$$

Условию (2,2) нельзя удовлетворить в том случае, если интеграл $\int |\psi|^2 dV$ является расходящимся. Это может иметь место, в частности, если квадрат модуля волновой функции $|\psi|^2$ не стремится к нулю на бесконечности. Физически это означает, что имеется конечная вероятность обнаружения частицы в любой точке пространства. Как проводить нормировку волновой функции в этом случае, будет показано в § 18.

Заметим, что волновая функция, нормированная условием (2,2), определена с точностью до множителя $e^{i\alpha}$, где α — любое действительное число, ввиду равенства

$$|e^{i\alpha}|^2 = 1.$$

Наряду с волновой функцией одной микрочастицы необходимо ввести понятие волновой функции системы микрочастиц. Пусть имеется система N частиц, взаимодействующих между собой по произвольному закону. Этой системе частиц можно сопоставить волновую функцию

$$\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_i, y_i, z_i, \dots, x_N, y_N, z_N, t),$$

где i — индекс частицы.

При дальнейшем построении квантовой механики мы будем исходить из допущения, что между описанием отдельной микрочастицы и системы микрочастиц нет какой-либо принципиальной разницы и трактовки $\psi(x, y, z, t)$ и $\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N, t)$ должна быть одной и той же. Иными словами, физический смысл волновой функции системы N частиц заключается в том, что величина

$$dW \sim |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 dV_1 dV_2 \dots dV_N \quad (2,5)$$

дает вероятность того, что в некоторый момент времени t первая частица находится в элементе объема dV_1 , окружающей точку \mathbf{r}_1 , вторая частица — в элементе объема dV_2 , окружающей точку \mathbf{r}_2 , и т. д. Здесь через \mathbf{r}_i обозначена для краткости совокупность координат (x_i, y_i, z_i) . Заметим, что на основании

теоремы сложения вероятностей величина

$$dW_1 \sim dV_1 \int \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) dV_2 \dots dV_N \quad (2,6)$$

представляет собой вероятность найти первую частицу в элементе объема dV_1 , при произвольном расположении остальных частиц системы (по координатам которых выполняется интегрирование). Очевидно, что вероятность dW_1 , даваемая формулой (2,6), должна быть идентична с определением (2,3). Аналогичные соотношения могут быть написаны и для остальных частиц системы. Таким образом dW дает вероятность найти данную конфигурацию системы в пространстве.

Условие нормировки волновой функции системы N частиц имеет вид:

$$\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 dV_1 dV_2 \dots dV_N = 1. \quad (2,7)$$

Ясно, что волновая функция системы N частиц нормирована не в реальном трехмерном пространстве, а в $3N$ -мерном конфигурационном пространстве.

Ввиду принципиального сходства между волновой функцией одной частицы и системы частиц мы будем обозначать волновую функцию одной буквой ψ . Ниже совокупность координат иногда для краткости обозначается через x .

Из сказанного вытекает, что величина $|\psi|^2$ должна быть истолкована как вероятность не в трехмерном, а в конфигурационном пространстве. Вместе с тем, введение волновой функции системы частиц особенно наглядно подтверждает невозможность истолкования волновой функции как величины, описывающей волновой процесс, сходный с электромагнитной или акустической волной и распространяющийся в реальном пространстве. Действительно, всякий волновой процесс в реальном пространстве характеризуется совокупностью трех переменных координат и времени. Между тем волновая функция системы N частиц зависит от $3N$ координат и времени. Поэтому при истолковании ψ -функции как обычной волны пришлось бы либо отказаться от допущения о едином смысле волновой функции одной микрочастицы и системы микрочастиц, либо ввести гипотезу о существовании реального многомерного пространства. И то и другое найдется в вопиющем противоречии с совокупностью опытных фактов.

Рассмотрим важный частный случай системы невзаимодействующих частиц. При этом обнаружение i -й частицы в элементе объема пространства dV_i , k -й частицы в элементе объема dV_k и т. д. должны быть независимыми событиями. На основании теоремы умножения вероятностей можно в этом случае формулу

(2,5) написать как

$$dW = dW_1 dW_2 \dots dW_N = \\ = |\psi_1(\mathbf{r}_1, t)|^2 dV_1 |\psi_2(\mathbf{r}_2, t)|^2 dV_2 \dots |\psi_N(\mathbf{r}_N, t)|^2 dV_N.$$

Это означает, что волновая функция системы невзаимодействующих частиц равна

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \psi_1(\mathbf{r}_1, t) \psi_2(\mathbf{r}_2, t) \dots \psi_N(\mathbf{r}_N, t). \quad (2,8)$$

Ниже (см. § 64) будет особо рассмотрен случай, когда система построена из тождественных микрочастиц (например, из электронов или из протонов и т. д.).

Прежде чем попытаться построить волновую функцию для простейшего случая движения микрочастицы, необходимо сделать следующее весьма важное замечание. На первый взгляд можно было бы предположить, что для описания состояний микрочастиц, которые представляют собой совершенно новые по своей физической природе объекты, необходимо ввести в физику новые понятия. Оказывается, однако, что это не совсем так. Состояние и характер движения микрочастиц можно до известной степени характеризовать величинами и терминами классической физики. На это указывает корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц, состоящий в том, что в некоторых опытах микрочастицы проявляют себя как объекты с волновой природой, в других опытах они ведут себя как обычные корпускулы.

Мы, в известной мере, уже допустили, что к микрочастице применимы понятия классической механики, когда ввели статистическую (вероятностную) трактовку волновой функции. Действительно, утверждение «микрочастица может быть обнаружена в элементе объема dV » уже содержит допущение, что возможен классический подход к описанию ее состояния путем задания ее положения в пространстве. Если бы микрочастица была во всем подобна волне, то уже сама постановка вопроса, «где можно обнаружить микрочастицу», была бы лишена смысла. С другой стороны, наличие дифракционной картины позволяет в известных условиях сопоставить микрочастице другое классическое понятие — определенную длину волны λ , и говорить о длине волны, отвечающей волновой функции частицы.

Классические понятия, такие как положение частицы, длина волны и т. д., могут применяться к микрочастице лишь в известных пределах. На этом мы подробно остановимся в § 4. Самым существенным является не то, что при описании микрочастиц понятия классической физики имеют ограниченную применимость, а то, что они могут и должны использоваться при описании новых объектов, так не похожих на обычные макроскопические тела или волны.

Мы предположим, что состояние электрона, свободно движущегося в пространстве, можно характеризовать энергией E и импульсом p . При этом связь между энергией и импульсом дается классической формулой (релятивистские соотношения будут учтены в гл. XIII)

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (2,9)$$

Допустим, что пучок электронов, прошедших через строго определенную ускоряющую разность потенциалов и приобретших определенную энергию, поступает в дифракционное устройство (на практике таким устройством обычно служит кристаллическая решетка). Формула (2,9) позволяет говорить об определенном импульсе электрона.

С другой стороны, зная дифракционную картину, можно (см. § 36 ч. IV) найти отвечающую электрону длину волны λ . Оказывается, что между величинами λ и p существует соотношение

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \hbar k. \quad (2,10)$$

Соотношение (2,10), впервые предложенное в 1924 г. де Бройлем на основе теоретических соображений, носит название формулы де Бройля. Волну, связанную с движением микрочастицы, называют волной де Бройля.

Мы видим, что формула де Бройля совпадает с формулой (1,2) для световых квантов. Частоты, отвечающие волнам де Бройля, не могут быть непосредственно определены экспериментальным путем. Естественно, однако, допустить, что к волнам де Бройля применимо то же соотношение между энергией и частотой, что и для световых квантов, т. е.

$$E = \hbar\omega. \quad (2,11)$$

Основываясь на соотношениях (2,10) и (2,11), представим волновую функцию свободной частицы в виде плоской монохроматической волны

$$\psi_p(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(p\mathbf{r} - Et)}. \quad (2,12)$$

Ниже будет пояснено, почему $\psi_p(\mathbf{r}, t)$ следует записывать в виде экспоненциальной функции, а не синуса или косинуса (см. § 6). Постоянная A определяется условием нормировки (см. § 26).

По определению \mathbf{k} — волновой вектор

$$\mathbf{k} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{p}. \quad (2,13)$$

С помощью формул (2,9), (2,10) и (2,11) можно найти закон дисперсии волн де Бройля

$$\omega = \frac{1}{\hbar} E = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (2,14)$$

Соответствующая фазовая и групповая скорости равны

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}, \quad (2,15)$$

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{1}{m} p. \quad (2,16)$$

Формула (2,16) показывает, что групповая скорость волн де Бройля совпадает с обычной скоростью макроскопической частицы. Если бы мы взяли за исходное выражение для скорости частицы величину $v_{\text{гр}}$, то соотношение между энергией и частотой (2,11) можно было получить как следствие этого определения. Фазовая скорость волн де Бройля v_ϕ не имеет непосредственного физического смысла. Это становится особенно ясным, если воспользоваться релятивистским выражением для связи энергии с импульсом частицы

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = \sqrt{\hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4} = \hbar \omega.$$

При этом

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar k} = \sqrt{c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2 k^2}} > c,$$

т. е. v_ϕ больше скорости света.

§ 3. Принцип суперпозиции. Разложение по плоским волнам¹⁾

Выше мы рассматривали явление дифракции электронов на экране с ограниченным числом щелей. Фактически, однако, наблюдается дифракция электронов от кристаллической решетки. Этот случай дифракции имеет не только практический, но и большой принципиальный интерес.

Мы видели в § 36 ч. IV, что селективное отражение рентгеновых лучей имеет место при выполнении условий Брэгга — Вульфа. Если отвлечься от несущественных деталей, то оказывается, что дифракция электронов на кристаллической решетке происходит аналогично дифракции рентгеновых лучей. При этом в результате рассеяния электронов от монокристаллического образца возникает ряд селективных отражений. Каждое из селективных отражений отвечает определенному импульсу или

¹⁾ При чтении этого параграфа рекомендуем предварительно возвратиться к § 35 ч. I.