

малости длины волны, исследования дифракции атомов и молекул затрудняются тем, что атомы и молекулы неспособны проникать в толщу кристалла и поэтому могут дать лишь дифракцию от поверхностей решетки кристалла. Трудно также получить достаточно монохроматический атомный или молекулярный пучок. Тем не менее получена достаточно четкая дифракционная картина атомов гелия (рис. 2.8) и молекул водорода (рис. 2.9) от кристалла фтористого лития. Полученные результаты подтверждают пригодность формулы де Бройля для сложных («составных») частиц.

На рис. IV (в конце книги) воспроизведена фотография дифракции нейтронов (об этих элементарных частицах подробнее см. ниже, § 62) в кристалле кварца. О способах сенсibilизации (т. е. «очувствления») пластинок для регистрации этих нейтральных частиц будет сказано ниже. В настоящее время исследование структуры вещества с помощью дифракции нейтронов — «нейтронография» — получает все более широкое применение. Дифракция нейтронов позволяет исследовать упорядоченные структуры сплавов типа FeCo, Ni₃Mn, у которых близость атомных номеров не позволяет различать методами дифракции рентгеновских лучей или электронов атомы различных типов. Нейтроны рассеиваются ядрами этих атомов различно, и установить их взаимное расположение оказалось возможным методом нейтронографии. Любопытно, что установить структуру кристалла льда — определить расположение в нем атомов кислорода и водорода — удалось лишь методом нейтронографии.

Что касается макроскопических частиц материи, то их дифракцию наблюдать невозможно.

Так, например, пылинка с массой $m = 10^{-12}$ г, линейных размеров $\sim 10^{-4}$ см и скорости всего 1 см/сек имеет длину волны

$$\lambda = \frac{6,62 \cdot 10^{-27}}{10^{-12} \cdot 1} = 6,62 \cdot 10^{-15} \text{ см} = 6,62 \cdot 10^{-7} \text{ \AA}.$$

При такой длине волны невозможно реализовать условия, с помощью которых можно было бы наблюдать дифракцию, т. е. макроскопические частицы проявляют явно только одну сторону своей природы — корпускулярную.

Таким образом, новая теория, трактующая материальные частицы как объекты двойственной корпускулярно-волновой природы, не отбрасывает старых корпускулярных представлений о макроскопических частицах материи, но, обосновывая эти представления с новой точки зрения, одновременно дает и пределы их применимости.

§ 46. Волновая функция. «Соотношения неопределенностей»

Итак, прямые опыты по дифракции подтвердили, что электрон не является материальной точкой, а представляет собой сложный материальный объект, обладающий волновыми свойствами. Каковы же размеры электрона и какую область пространства он заполняет, как говорят, какова же «локализация» (от латинского locus — место)

электрона? В отличие от фотона электрон обладает электрическим зарядом. От положения и распределения этого заряда в пространстве зависит взаимодействие электрона с другими частицами, например, с атомным ядром,— обстоятельство, по существу, определяющее все свойства атомов.

Уточним сначала, чем характеризуется пространственная локализация точечного объекта. Пусть материальная точка с массой m движется вдоль оси x . В некоторый момент времени она занимает положение M , характеризуемое координатой x , и обладает определенной скоростью движения v или соответствующим импульсом $p_x = mv$. Спустя некоторое время точка m займет положение M' с координатой x' и будет двигаться с импульсом p'_x . Совокупность последовательных положений движущейся точки: M , M' и т. д., образует траекторию ее движения, в общем случае криволинейную. Если известны силы F_x , действующие на материальную точку m , то по законам классической механики (второму закону Ньютона) можно рассчитать все последовательные значения координаты x и импульса p_x движущейся частицы.

Используя очевидные дифференциальные соотношения:

$$v_x = \frac{dx}{dt}; \quad \omega_x = \frac{dv_x}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2},$$

можно переписать второй закон динамики

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F_x \quad (46.1)$$

в виде двух уравнений:

$$\frac{dp_x}{dt} = F_x \quad \text{и} \quad \frac{dx}{dt} = \frac{1}{m} p_x. \quad (46.2)$$

Эти уравнения представляют собой математическую формулировку принципа причинности в классической механике: если известны силы F_x , действующие на материальную точку, то из (46.2) можно определить приращения ее координаты (dx) и импульса (dp_x) в последовательные промежутки времени (dt) и тем самым рассчитать все ее движение.

Таким образом, для точечного объекта характерны следующие свойства:

1. Материальная точка обладает одновременно определенными значениями координаты x и импульса p_x .

2. Совокупность последовательных положений движущейся точки образует определенную линию в пространстве — траекторию движения.

3. Принцип причинности (46.2) позволяет определить положение и импульс движущейся точки на ее траектории в любой последовательный момент времени.

Принципиально иначе обстоит дело с локализацией волновых объектов. Во-первых, волна представляет собой протяженный объект, заполняющий определенную область пространства, а не сосредоточенный в одной точке с координатой x . Для упрощения расчетов рассмотрим, как и выше, при анализе движения точечной частицы, одномерное распространение волны вдоль оси OX . Любая волна, независимо от ее природы (акустическая, электромагнитная или волна де Бройля), характеризуется некоторой волновой функцией (например, плотность и давление в акустической волне или векторы \mathbf{E} и \mathbf{H} в электромагнитной волне), которую мы обозначим греческой буквой ψ . Значения величины ψ различны в точках с разными координатами x и изменяются с течением времени t , т. е. ψ есть функция от двух переменных

$$\psi = \psi(x, t). \quad (46.3)$$

Локализация ψ -функции в пространстве может быть различной. Простейшая монохроматическая волна, распространяющаяся вдоль оси OX , описывается волновой функцией

$$\psi = A \sin 2\pi \frac{vt - x}{\lambda}, \quad (46.4)$$

где λ — длина волны, а v — скорость ее распространения. Мгновенный снимок отрезка такой волны изображен на рис. 2.10. Пунктиром показан тот же отрезок волны спустя некоторый промежуток времени. Такая монохроматическая волна заполняет все бесконечное пространство. Интервал координат

Δx , в котором заключен волновой объект, равен бесконечности.

Для электромагнитных и электронных волн импульс частицы, связанной с волной (фотона или соответственно электрона), равен

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad (46.5)$$

Так как волна монохроматическая, $\lambda = \text{const}$, то ей отвечает вполне определенное значение импульса частицы p . Иными словами, интервал Δp , в котором заключены возможные значения импульса частицы, равен нулю. Следовательно, чисто монохроматическая волна, изображенная на рис. 2.10, характеризуется соотношениями

$$\Delta x = \infty \quad \text{и} \quad \Delta p = 0, \quad (46.6)$$

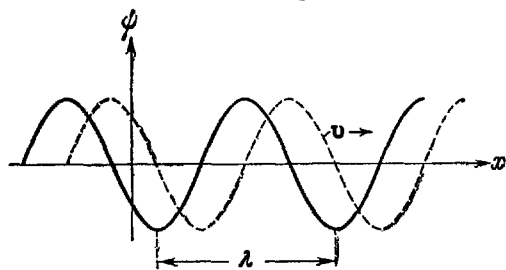


Рис. 2.10.

т. е. такой волновой объект имеет вполне определенный импульс и совершенно неограниченную область локализации.

Рассмотрим другой пример — волны, локализованной в некотором интервале Δx . Для того чтобы волновая функция была отлична от нуля внутри этого интервала и практически равнялась нулю вне его, эта функция должна представлять суперпозицию монохроматических волн (46.4) с различными значениями λ . На рис. 2.11, а

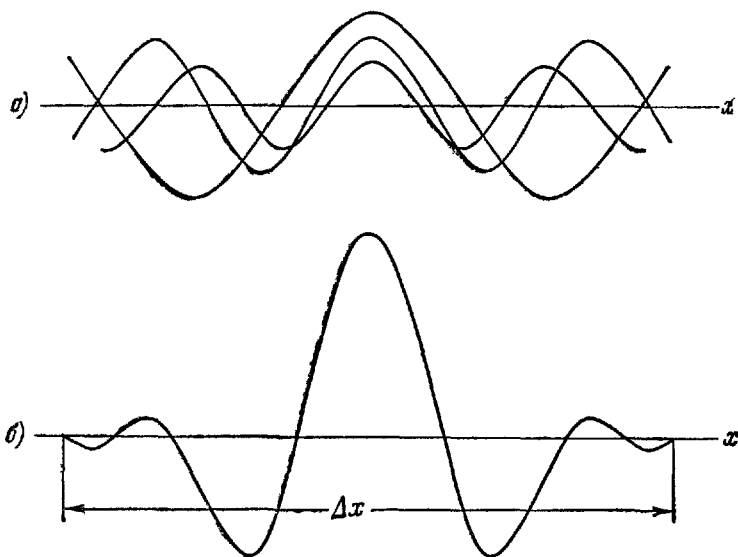


Рис. 2.11.

показан набор таких волн различных амплитуд с длинами волн в интервале от λ до $\lambda + \Delta\lambda$, а на рис. 2.11, б — результат их сложения — в о л н о в о й п а к е т. Результирующая волновая функция ψ практически отлична от нуля в некотором интервале Δx . Однако при такой пространственной локализации волны начинают терять определенность понятия длины волны λ , а значит, и импульса p частицы, связанной с волной. Волновой пакет представляет собой набор монохроматических волн, импульсы которых заключены в интервале

$$\Delta p = \Delta \left(\frac{h}{\lambda} \right) = \frac{h}{\lambda^2} |\Delta \lambda|.$$

Чем в более узком интервале Δx локализована волна, тем более широкий интервал длин интерферирующих волн $\Delta\lambda$ (а следовательно, и интервал импульсов Δp) входит в пакет, представляющий эту волну. Следовательно, увеличение определенности в локализа-

длины волны (уменьшение Δx) связано с одновременным возрастанием в неопределенности импульса Δp . В пределе

$$\text{при } \Delta x \rightarrow 0 \text{ имеем } \Delta p \rightarrow \infty. \quad (46.7)$$

Такой волновой объект имеет вполне определенную координату (как материальная точка), но зато совершенно неопределенный импульс.

Следовательно, волновая природа таких квантовых объектов, как фотон и электрон, приводит к тому, что, в отличие от материальной частицы классической физики, которую мы в дальнейшем будем называть корпускулой, *электрон, так же как и фотон, не может иметь одновременно определенную координату x и импульс p_x .*

Соотношение между величинами Δx и Δp_x (и аналогичные им соотношения для других осей) проанализировал впервые В. Гейзенберг. Гейзенберг исходил из серии «мысленных опытов», из которых следовало, что положение и импульс частицы не могут быть определены одновременно сколь угодно точно. Рассмотрим один из мысленных опытов Гейзенберга.

Чтобы определить положение и импульс электрона, нужно «светить» его и получить хотя бы один рассеянный при столкновении фотон. При этом, вследствие дифракции, точность в определении координаты электрона не может быть больше длины волны излучения: $\Delta x \approx \lambda$. Чем точнее нужно измерить положение электрона, тем меньше должно быть λ . Но при рассеянии фотона электрон получает отдачу и его импульс меняется на величину Δp_x порядка импульса фотона: $p_\phi = \frac{h}{\lambda}$, что и составит погрешность в определении его импульса. Следовательно,

$$\Delta x \Delta p_x \geq \lambda \frac{h}{\lambda} = h.$$

Это соотношение носит название: «соотношение неопределенностей».

То же имеет место и для других координат, так что

$$\left. \begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &\geq h, \\ \Delta y \Delta p_y &\geq h, \\ \Delta z \Delta p_z &\geq h. \end{aligned} \right\} \quad (46.8)$$

Гейзенберг трактует результат как наличие предела возможности познания состояния материальных частиц. Ошибка в этом рассуждении состоит в том, что Гейзенберг считает частицы корпускулами (материальными точками). Положение в пространстве корпускулы описывается точными значениями координат, и если эти точные значения неизвестны, наши знания ограничены некоторой неопределенностью, являются неполными.

В действительности дело обстоит не так. Как указывалось выше, частица вещества не является материальной точкой. Это протяженный объект, описываемый волновым пакетом. А положение любого протяженного объекта, волнового пакета в том числе, характеризуется не координатами точки, но областью пространства, им занимаемого. Величины Δx и, соответственно по другим координатным осям, Δy и Δz характеризуют размеры области пространства, занимаемого волновым пакетом. Никакой «неопределенности» или «неточности» здесь нет. Точно так же Δp_x , Δp_y и Δp_z характеризуют спектральный состав монохроматических волн, с помощью которых можно представить волновой пакет.

Все же толковать волновую функцию просто как материальное поле (наподобие, например, электромагнитной волны) пока что нельзя. Попытка такой трактовки, принадлежащая де Бройлю и Шредингеру, оказалась несостоятельной в силу ряда причин. В частности, можно показать, что волновой пакет, описывающий свободную частицу, расплывается с течением времени (составляющие волнового пакета с разными значениями λ отвечают различным значениям импульса). До сих пор попытки вернуться к этому толкованию (Бом, Вижье) оказались неудовлетворительными. Однако, как выясняется в настоящее время, уравнения, описывающие элементарные частицы, должны быть нелинейными. Когда такие уравнения удастся сформулировать и решить, вопрос о природе ψ -функций придется поставить заново и возврат к исходному толкованию де Бройля — Шредингера не исключен. Подробное обсуждение возможных толкований ψ -функции выходит за пределы нашего курса.

Следовательно, «соотношения неопределенностей» Гейзенберга (46.8) (это неудачное название для указанных соотношений общепринято) характеризуют не границы возможностей познания человеком свойств мельчайших частиц вещества, но отражают объективно особенности их природы, обусловленные корпускулярно-волновой двойственностью.

Из сказанного вытекает, что квантовые объекты не обладают и вторым, указанным в начале параграфа характерным свойством корпускул — материальных точек классической физики. *Траектория движения электрона представляет собой лишь приближенное понятие.* Действительно, если даже положение электрона в данный момент времени вполне определено в пространстве (бесконечно узкий волновой пакет (46.7)), то в силу полной неопределенности импульса этого пакета его положение в следующий момент времени не определяется однозначно.

Рассмотрим два примера, показывающих, при каких условиях можно пользоваться приближенным понятием траектории и представлять себе электрон в виде корпускулы. Пусть речь идет об электроне, движущемся в электроннолучевой трубке. Рассмотрим волновой пакет, у которого неопределенность в импульсе не превышает 1%, то есть

$$\Delta p \approx 0,01p.$$

Из (46.8) тогда следует, что электрон в каждый данный момент локализован в области порядка

$$\Delta x \approx \frac{h}{\Delta p} \approx 100 \frac{h}{p} = 100 \lambda$$

при $v = 10^8$ см/сек (см. § 45), длине волны электрона $\lambda = \frac{h}{p} \approx \approx 10^{-7}$ см, область локализации $\Delta x \approx 10^{-5}$ см, что во много раз меньше размеров трубки. По отношению к прибору электрон — материальная точка. Здесь это — разумное приближение, в то время как представление об электроне-корпускуле в атоме совершенно бессмысленно.

Тем не менее сказанное выше требует уточнения. Для того чтобы частица могла быть представлена как корпускула, недостаточно того, чтобы область локализации описывающего ее волнового пакета была относительно мала. Необходимо, чтобы частица двигалась в соответствии с классическими законами для материальных точек. Для этого нужно, чтобы не только понятия координат и импульсов имели смысл, но чтобы можно было говорить столь же определенно о значении силы, действующей на частицу. Это можно сделать, если градиент потенциальной энергии частицы во внешнем поле — достаточно медленно меняющаяся функция своих аргументов — координат. Именно, можно говорить о силе, действующей на частицу, как целое, если во всей области локализации частицы Δx эта величина практически постоянна:

$$f(\mathbf{r})|_{\text{в обл. } \Delta x \Delta y \Delta z} \approx \text{const.} \quad (46.9)$$

В макроскопических электромагнитных полях электронных приборов это условие соблюдается. В случае же движения электрона в атоме напряженность электрического поля атомного ядра сильно меняется на расстояниях порядка длины волны де Бройля λ электрона в атоме. В этом случае λ , Δx , диаметр атома — величины одного и того же порядка. Вследствие этого невозможно считать электрон локализованным в «точке» — малой области внутри атома. Область локализации электронов в атоме составляет весь объем атома. Именно это обстоятельство и делает неприменимыми законы классической механики и электродинамики к движению электронов в атоме. Все затруднения планетарной модели атома связаны с тем, что электрон представлялся как точечный заряд, движущийся по вполне определенной круговой или эллиптической орбите, как планеты вокруг Солнца. Однако основное условие (46.9) применимости к электрону классических законов и представлений о траектории в атоме не соблюдено. Поэтому причину наличия в атоме определенных «разрешенных» энергетических уровней следует искать в волновых свойствах и закономерностях движе-

ния реальных, не «точечных» электронов. Именно в этих закономерностях и следует искать объяснение постулатов Бора.

Каковы же эти закономерности? Для классических объектов мы их формулировали в виде принципа причинности (46.2), позволяющего находить изменения координаты и импульса частицы с течением времени. Аналогичный принцип причинности в квантовой механике должен быть сформулирован для волновой функции ψ и позволять рассчитывать изменение этой функции со временем в любой точке, т. е. величину $\frac{\partial \psi}{\partial t}$. К формулировке этого волнового уравнения и определению динамических переменных мы вернемся в следующем параграфе. Здесь же остановимся еще на физическом смысле ψ -функции и ее связи с локализацией электрона, основанной на соотношении неопределенностей (46.8).

Значения величин, характеризующих состояние частицы, — динамических переменных, т. е. координат, импульсов, энергии и т. д., должны находиться с помощью этой волновой функции. Это следует хотя бы из того, что ряд динамических переменных может не иметь определенных значений и задачу о движении частицы невозможно сформулировать в виде дифференциальных уравнений, связывающих эти величины. Следовательно, задача состоит, во-первых, в том, чтобы рассчитать изменение функции ψ в любой точке пространства с изменением времени и тем самым определить ее для любых значений x , y , z и t . Следующий шаг состоит в определении значений динамических переменных, если известна волновая функция ψ .

Если сами по себе соотношения (46.8) никаких «неопределенностей» не содержат *), то они действительно обуславливают некоторые существенные неопределенности. Пусть, например, волновой пакет, изображенный на рис. 2.12, описывает движущийся электрон, а в точках A , B , C , D находятся ионы. Электрон может захватываться ионом, причем разность энергий свободного электрона и электрона на орбите отдается с излучением в момент захвата электрона. Каким же из ионов — A , B , C или D — будет

*) Δx было бы неопределенностью в координате электрона x , если бы его пространственная локализация была точечной, а Δx было бы мерой нашей ошибки в определении этой координаты x . В действительности электрон описывается волной де Бройля, локализованной в конечной области пространства Δx (см. рис. 2.11). Точно так же Δp_x было бы неопределенностью в составляющей импульса p_x , если бы электрон описывался всегда монохроматической (а значит, и бесконечной) волной с определенным значением λ , а значит, и p_x и Δp_x означало бы величину нашей погрешности при измерении p_x . В действительности ограниченный волновой пакет содержит составляющие с разными значениями λ , а значит, и p_x , т. е. электрон объективно описывается не одним значением p_x , но рядом значений, в пределах от p_{1x} до p_{2x} , так что $\Delta p_x = p_{2x} - p_{1x}$.

захвачен электрон? В рассматриваемый момент времени захват ионом D исключен, так как в области D электронная волна равна нулю. Но ионы A, B, C могут претендовать на захват электрона, и вопрос о том, каким же ионом будет захвачен электрон, не решается однозначно. Квантовая механика на основании знания ψ -функции может указать лишь вероятность одного из возможных здесь процессов.

То же относится и к возможным значениям импульса электрона. При дифракции волнового пакета на дифракционной решетке (кристалле) волны с различными λ пойдут по разным направлениям. Однако электрон в силу присущих ему корпускулярных свойств разделиться не может. В результате дифракции след электрона на фотопластинке будет обнаружен в одной из точек, отвечающих какому-то значению λ (т. е. импульса), представленному

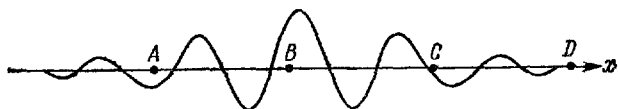


Рис. 2.12.

имеющейся в волновом пакете составляющей. Попадание электрона в точку, обусловленную длиной волны λ , не представленной в пакете, исключается. Но какая именно из составляющих волнового пакета проявит себя на опыте — нельзя определить однозначно. Здесь тоже можно указать лишь вероятность того, что электрон продифрагирует как частица с тем или иным (из имеющихся в пакете) значением λ , т. е. p . Величина этой вероятности определяется амплитудой составляющих ψ -функции волнового пакета, отвечающих тем или иным значениям λ .

К толкованию ψ -функции можно подойти, сравнивая ее с толкованием электромагнитной волны. Плотность энергии (и массы) электромагнитной волны пропорциональна квадрату напряженности электрического и магнитного полей. Как уже указывалось, знание вида волны де Бройля, т. е. ψ -функции, еще не позволяет однозначно судить о направленности возможных процессов. Можно судить лишь о вероятности того или иного из возможных процессов. В соответствии с этим произведение квадрата модуля волновой функции *) на dV

$$|\psi|^2 dV \quad (46.10)$$

физически толкуется как вероятность того, что действие электрона будет обнаружено в элементе объема dV . Следовательно, $|\psi|^2$ толкуется как плотность вероятности обнаружения электрона (срав-

*) Волновая функция заряженных частиц комплексная.

ните $dq = \rho dv$, где dq — заряд в объеме dv , ρ — плотность заряда). Сумма величин $|\psi|^2 dV$ по всему пространству (т. е. интеграл) есть вероятность обнаружения частицы где бы то ни было в пространстве. Но так как частица существует, то она обязательно где-либо обнаружится, — это достоверно. А вероятность достоверного события есть единица. Следовательно, ψ -функция должна удовлетворять условию

$$\int |\psi|^2 dV = 1, \quad (46.11)$$

носящему название у с л о в и я н о р м и р о в к и. Условие нормировки удовлетворяется подбором постоянного множителя. В дальнейшем мы будем считать, что все ψ -функции, описывающие частицу, нормированы, т. е. удовлетворяют (46.11).

Здесь следует предостеречь от слишком буквального понимания часто используемого в этом случае выражения: $|\psi|^2 dV$ дает вероятность «местонахождения» в объеме dV . Находиться в бесконечно малом объеме электрон не может, — он не материальная точка. И если электрон обнаруживает свое действие в этом объеме, то это не значит, что он сосредоточен, «находится» в этом объеме. Следует отчетливо уяснить себе разницу между областью действия электрона и его областью локализации. Так, электрон с весьма точно определенным импульсом ($\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ малы) и описываемый, следовательно, весьма протяженной волной может в результате взаимодействия возбудить или ионизовать атом, локализованный в весьма малом объеме. Но этот процесс нельзя рассматривать как удар электрона-шарика в атом-шарик. Область действия электрона — атом — много меньше области, в которой локализована (отлична от нуля) волна де Бройля (ψ -функция). В дальнейшем, говоря об области обнаружения электрона (любой частицы), мы будем иметь в виду область, в которой электрон обнаружил себя каким-то действием, но не будем смешивать эту область с областью локализации электрона, т. е. областью, в которой ψ -функция отлична от нуля. Область действия (или, что то же самое, область обнаружения) и область локализации различны.

Если известна ψ -функция, описывающая состояние, то вероятность всех возможных процессов определяются однозначно. Это дает возможность точно судить о поведении множества частиц, движущихся в одинаковых условиях.

Так, например, если ψ -функция описывает электрон, находящийся на пятой ступеньке возбуждения в атоме водорода, то можно оценить лишь вероятности того или иного маршрута при переходе в нормальное состояние ($E_5 \rightarrow E_1$ с излучением одного фотона, либо $E_5 \rightarrow E_4 \rightarrow E_1$, $E_5 \rightarrow E_3 \rightarrow E_1$ и т. д.). Если возбуждать множество водородных атомов потоком электронов, способных передать атомам энергию, не меньшую чем $E_5 - E_1$, множество электронов

совершает переходы по разным маршрутам. В результате испускаются все линии спектра, отвечающие всевозможным переходам. Зная вероятности переходов, можно рассчитать относительную интенсивность спектральных линий в полном соответствии с опытом. Напомним, что боровские постулаты этой возможности не давали.

Таким образом, то обстоятельство, что ψ -функция не позволяет определить многие величины однозначно и точно, не означает, что описание поведения микрочастиц является в квантовой теории неполным, субъективным, обусловленным особенностями производимых измерений. Если координаты микрочастицы не могут быть определены точно, то это происходит не потому, что наши возможности ограничены условиями опыта, при котором измерение одной величины меняет другую (см. выше «мысленный опыт» Гейзенберга). Дело обстоит совсем иначе: *опыт позволяет установить все величины, характеризующие состояние частицы*. Точные значения координат невозможно установить просто потому, что электрон не материальная точка и его положение в пространстве определяется не точечными значениями x , y , z , но интервалами Δx , Δy и Δz . Так же обстоит дело и с другими физическими величинами.

Следовательно, *описание частицы с помощью ψ -функции является не субъективным, а объективным*.

Сложнее обстоит дело с вопросом о том, почему знание ψ -функции позволяет определять лишь вероятности процессов, но не позволяет определять процесс однозначно. Следует отметить, во-первых, что квантовая теория возникла в результате изучения процессов, обусловленных действием многих микрочастиц, и в этих рамках ее результаты однозначны. ψ -функция, однако, описывает не совокупность частиц, а одну частицу, но это описание носит статистический характер, в том смысле, как это было разъяснено. Вопрос о том, является ли такая статистичность в описании микрочастиц неизбежным элементом их теории, остается открытым. Обсуждение этого спорного вопроса выходит далеко за рамки этой книги. Единственное, что мы хотим отметить здесь, это что речь идет именно о теории вообще, но никак не о том, что понимается сейчас под «квантовой механикой». Описание явлений микромира квантовой механикой **с т а т и с т и ч н о**. Как и всякая теория, подтвержденная широким опытом, она в своих пределах верна и в этих пределах сохраняет свою значимость и форму, т. е. статистичность. Как и всякая теория, она не содержит в себе своих границ применимости. Границы применимости современной квантовой механики будут определены в более широкой теории, охватывающей явления природы, необъяснимые с точки зрения квантовой теории, когда человеческий опыт найдет их и будет создана их теория. Будет ли описание явлений природы в этой более широкой теории вероятностным (статистическим) или нет — покажет будущее.