

Глава 3. Волновые свойства вещества

3.1. Волны де Бройля

К двадцатым годам прошлого века было известно, что в одних явлениях (интерференция, дифракция) свет проявляет волновые свойства, в других (фотоэффект, эффект Комптона) ведет себя как поток частиц. В 1924 г. французский ученый *Луи де Бройль* выдвинул гипотезу о том, что подобный *корпускулярно-волновой дуализм* не является особенностью только оптических явлений, но имеет универсальный характер, а микрочастицы наряду с корпускулярными обладают также и волновыми свойствами. Причем волновые свойства (частота ω , длина волны λ и волновой вектор \mathbf{k}) связаны с корпускулярными (энергией E и импульсом \mathbf{p}) теми же соотношениями, что и у фотона:

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (3.1)$$

Функцию координат и времени, описывающую волновые свойства частицы в данном состоянии, называют *волновой функцией*, или *ψ -функцией состояния*. При свободном движении микрочастицы ее вектор импульса и энергия не изменяются, следовательно, постоянны также ω , λ и \mathbf{k} . Такими свойствами обладает плоская волна, распространяющаяся вдоль направления импульса частицы

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp[i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})] = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}\mathbf{r})\right]. \quad (3.2)$$

Де Бройль использовал волновые представления для пояснения правила квантования электронных орбит Бора. Электрону в стационарном состоянии сопоставляется круговая стоячая волна со стационарным распределением амплитуды вдоль орбиты. Такое распределение возможно, только если на орбите укладывается целое число длин волн. Таким образом, условие стационарности имеет вид $2\pi r/\lambda = n$ ($n = 1, 2, \dots$). Учитывая соотношение (3.1) и то, что $L = rp$ есть момент импульса, получаем $L = n\hbar$, что совпадает с условием квантования (1.6).

Физическую интерпретацию волновой функции дал *Макс Борн* в 1926 г. Согласно Борну квадрат модуля волновой функции определяет вероятность dP того, что частица в данном состоянии будет обнаружена в объеме dV вблизи точки с радиус-вектором \mathbf{r} :

$$dP = A |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = A \psi \psi^* dV, \quad (3.3)$$

где A — множитель, одинаковый для всех \mathbf{r} . Интеграл от выражения (3.3), взятый по всему объему, должен равняться единице, так как обнаружение частицы хоть в какой-нибудь точке является достоверным событием. В

квантовой механике принимается, что ψ -функция допускает умножение на произвольное отличное от нуля комплексное число C , причем функции ψ и $C\psi$ описывают одно и то же состояние частицы. Поэтому всегда можно выбрать ψ -функцию так, чтобы она удовлетворяла условию

$$\int |\psi|^2 dV = 1. \quad (3.4)$$

Условие (3.4) называется *условием нормировки*, а соответствующая волновая функция — *нормированной*. Для такой функции множитель A в формуле (3.3) равен единице.

Как известно, при распространении световых волн в среде возникает явление *дисперсии* — зависимости скорости распространения от длины волны или частоты. Дисперсия свойственна также волнам де Бройля, причем она существует даже в вакууме.

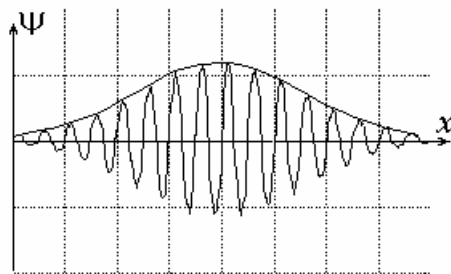


Рис. 3.1. Волновой пакет

При наличии дисперсии необходимо различать *фазовую скорость* волны (скорость перемещения волнового фронта) $v_\phi = \omega/k$ и *групповую скорость* (скорость перемещения максимума огибающей амплитудно-модулированного волнового пакета, рис. 3.1) $u = d\omega/dk$. В случае волн де Бройля максимум амплитуды пакета соответствует точке, в которой вероятность обнаружения частицы максимальна. С учетом соотношений (3.1), выражения для фазовой и групповой скоростей дебройлевского волнового пакета частицы примут вид

$$v_\phi = \frac{E}{p}, \quad u = \frac{dE}{dp}. \quad (3.5)$$

В нерелятивистском случае кинетическая энергия классической частицы связана с импульсом формулой $E = p^2/2m$, поэтому $u = dE/dp = p/m = v$, где v — скорость классической частицы. Таким образом, групповая скорость дебройлевского волнового пакета совпадает со скоростью классической частицы, или, другими словами, место наиболее вероятного пребывания частицы перемещается со скоростью классической частицы. В релятивистском случае по теории Эйнштейна имеем

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = mc^2, \quad ,$$

где m_0 — масса покоя частицы, а m — так называемая релятивистская масса. Групповая скорость оказывается равной

$$u = \frac{c^2 p}{E}. \quad (3.6)$$

Так как $E = mc^2$, $p = mv$, получаем вновь $u = v$. Из (3.6) и (3.5) видно, что между групповой и фазовой скоростями существует простая связь:

$$uv_{\phi} = c^2. \quad (3.7)$$

Поскольку всегда $v = u \leq c$, оказывается, что фазовая скорость волн вероятности больше скорости света. Однако поскольку фазовая скорость не связана с передачей информации или с перемещением какого-либо физического объекта, теория относительности не накладывает на нее никаких ограничений. Наблюдаемой физической величиной является групповая скорость.

3.2. Проявления волновых свойств вещества

Оценим длины волн де Бройля, соответствующих различным микрочастицам. Для электронов, ускоренных разностью потенциалов U , импульс определяется формулой $p = \sqrt{2m_e eU}$, так что из (3.1) следует, что

$$\lambda_e = 2\pi\hbar / \sqrt{2m_e eU}. \quad (3.8)$$

При $U = 100 \dots 1000$ В получаем $\lambda_e = 0,12 \dots 0,04$ нм. Для молекул водорода, движущихся со среднеквадратичной тепловой скоростью, $p = \sqrt{3m_{H_2} kT}$; при $T = 320$ К находим, что $\lambda_{H_2} = 0,1$ нм. Таким образом, для электронов, ускоренных до энергий 100...1000 эВ и молекул легких газов при комнатной температуре длины волн де Бройля такого же порядка, что и у мягкого рентгеновского излучения. Поэтому можно обнаружить дифракцию этих волн теми же методами, которые применяются в физике рентгеновских лучей.

Дифракционные эффекты для рентгеновского излучения особенно заметны при его взаимодействии с кристаллическими телами. Постоянные кристаллических решеток, как правило, по величине равны нескольким десяткам нанометра и, следовательно, сопоставимы с длинами волн рентгеновских лучей. При рассеянии рентгеновских лучей на кристаллах наблюдаются дифракционные максимумы, положение которых определяется условием Вульфа – Брэггов

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (3.9)$$

где d — расстояние между кристаллическими плоскостями, т. е. период решетки (см. рис. 3.2), θ — угол скольжения лучей, равный половине угла отклонения φ .

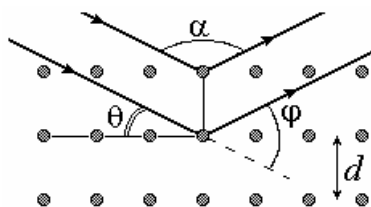


Рис. 3.2. Дифракция волн на кристаллической решетке

В 1927 г. Дэвиссон и Джермер, исследуя отражение электронного пучка от монокристалла никеля (см. рис. 3.3, *а*), обнаружили резкое увеличение числа рассеянных электронов под углом $\alpha = 50^\circ$ (рис. 3.3, *б*), особенно ярко выраженное при ускоряющем напряжении 54 В ($\lambda = 0,167$ нм). Этот максимум можно истолковать как дифракцию первого порядка на решетке с периодом $d = \lambda / \sin \theta = 0,215$ нм, что хорошо согласуется с известным расстоянием между кристаллическими плоскостями никеля.

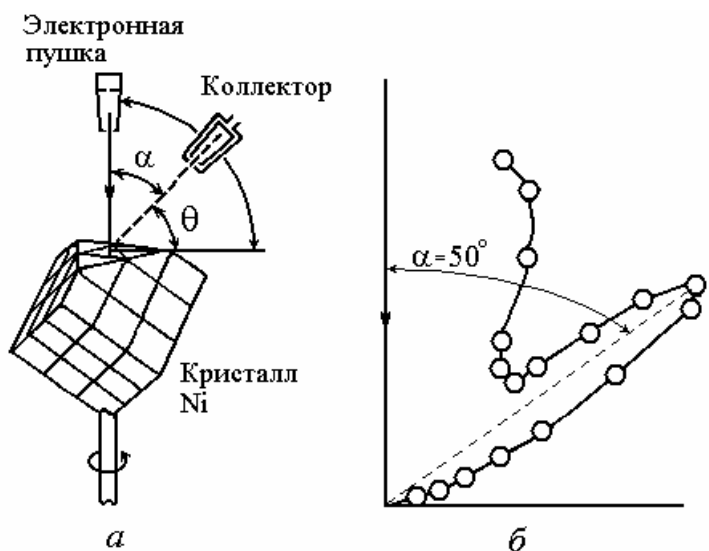


Рис. 3.3. Схема опыта Дэвиссона и Джермера (*а*) и полярная диаграмма рассеяния электронов (*б*)

При фиксированном положении коллектора и плавном увеличении напряжения на электронной пушке будет увеличиваться импульс электрона, а, следовательно, уменьшаться длина волны де Бройля. С учетом (3.8) и (3.9) получаем, что дифракционные максимумы будут возникать при ускоряющих напряжениях

$$\sqrt{U} = \frac{2\pi n\hbar}{2d \sin \theta \sqrt{2m_e e}}. \quad (3.10)$$

В опытах Дэвиссона и Джермера была получена зависимость, приведенная на рис. 3.4, стрелками показано положение максимумов, рассчитанное по формуле (3.10). Расстояние между ними при $\theta = 80^\circ$ и $d = 0,203$ нм должно равняться $3,06 \text{ В}^{1/2}$.

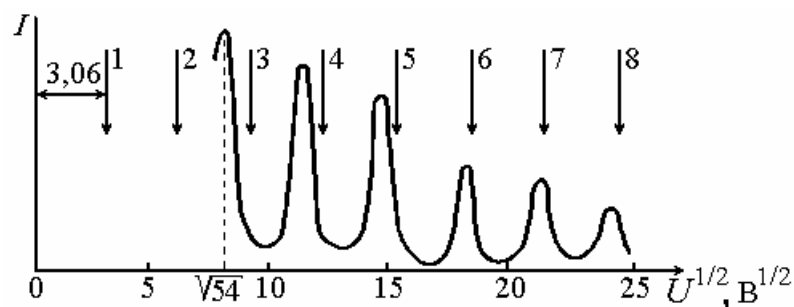


Рис. 3.4. Зависимость интенсивности рассеянного пучка электронов от ускоряющего напряжения

Видно, что при общем качественном согласии теории и эксперимента, для малых n наблюдаются систематические отступления от формулы (3.10), что объясняется преломлением волн де Бройля на границе кристалла и уменьшением длины волны вследствие влияния внутрикристаллического поля.

В других дифракционных опытах Тартаковским и Томсоном изучалась дифракция монохроматического пучка АВ быстрых электронов с энергией порядка 10^4 эВ на поликристаллической металлической фольге Φ (рис. 3.5, а).

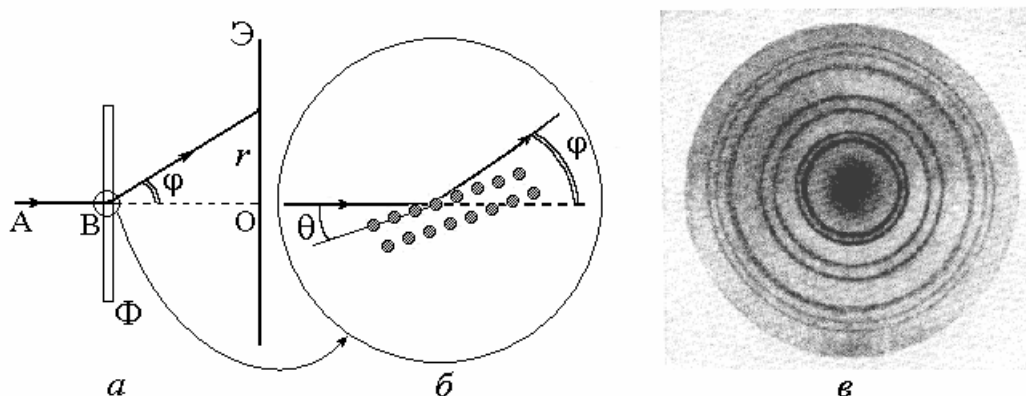


Рис. 3.5. Схема опыта Тартаковского и Томсона (а, б) и электронная дифракционная картина (в)

Поликристаллическая фольга состоит из множества хаотически ориентированных кристалликов, среди которых найдутся такие, при отражении от которых выполняется условие Вульфа – Брэггов $2d \sin \theta = n\lambda$ (рис. 3.5, б). Совокупность таких кристалликов обладает симметрией вращения относительно направления падающего электронного пучка АВО. В результате на экране \mathcal{E} образуются дифракционные кольца (рис. 3.5, в).

В описанных выше опытах интенсивность электронных пучков была настолько велика, что на кристаллах одновременно рассеивалось большое число электронов. Поэтому можно было предположить, что дифракционная картина возникает в результате взаимодействия этих электронов друг с другом. В 1949 г. Биберманом, Сушкиным и Фабрикантом был поставлен опыт, в котором интенсивность электронного пучка была настолько слаба, что интервал между двумя последовательными электронами в 30000 раз

превосходил время, затрачиваемое на прохождение всего прибора. Направление рассеяния отдельного электрона было случайным, но результирующее распределение от большого числа частиц статистически воспроизводилось и соответствовало описанной выше дифракционной картине. Таким образом было доказано, что волновые свойства присущи отдельной микрочастице.

Поведение микрообъектов, сочетающих свойства волн и частиц, чрезвычайно сильно отличается от поведения больших тел. Действительно, частица всегда обнаруживается как неделимое целое, в то время как волну можно разделить на части, скажем, с помощью полупрозрачного зеркала. Во многих случаях это поведение противоречит повседневному опыту человека. Это приводит к тому, что наглядные модели поведения квантовых объектов можно использовать далеко не всегда, да и то с большими оговорками.

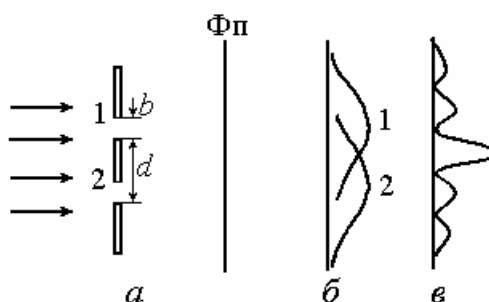


Рис. 3.6. Опыт с двумя щелями (а) и распределение вероятности детектирования электронов при открытых 1 и 2 щели по очереди (б) и одновременно (в)

Рассмотрим, например, что получится при падении монокинетического¹ пучка невзаимодействующих между собой электронов на непрозрачный экран с двумя щелями (рис. 3.6, а). За преградой поставим фотопластинку Фп.

В начале оставим открытой только щель 1, почернение фотопластинки будет характеризоваться кривой 1 на рис. 3.6, б. Для одного электрона эта кривая описывает вероятность его детектирования в плоскости Фп. Аналогично, при прохождении электронов через вторую щель получим распределение 2. Ширина этих дифракционных контуров, как и в классической волновой оптике, обратно пропорциональна ширине щелей b .

Если же открыть обе щели, то фотопластинка зафиксирует не наложение кривых 1 и 2, а типичную интерференционную картину (рис. 3.6, в) с периодом, обратно пропорциональным расстоянию между щелями d . Таким образом, на движение каждого электрона (как волны) оказывают влияние оба отверстия. Любая попытка установить, через какое именно отверстие проходит электрон (как частица) приводит к исчезновению интерференционных полос.

Описанный мысленный эксперимент показывает, что характер движения

¹ Монокинетический пучок — пучок частиц, имеющих одинаковую скорость.

микрочастиц не совместим с представлением об определенной траектории. Он носит вероятностный характер и не существует способа предсказать, в какую именно точку экрана попадет конкретный электрон. Можно только утверждать, что попадание в одни точки более вероятно, чем в другие. Соответствующая вероятность определяется квадратом модуля волновой функции $|\psi|^2$.

Статистические или вероятностные свойства микрообъекта при некоторых заданных условиях могут быть установлены на опыте либо при наблюдении большого количества идентичных объектов (частиц), либо при многократном наблюдении одного объекта в одних и тех же условиях. Такие совокупности объектов называются квантовыми ансамблями. Каждый квантовый ансамбль определяется заданием макроскопических параметров его состояния.

Здесь имеется некоторая аналогия с классической статистической физикой. Например, задавая давление и температуру газа, мы определяем распределение его молекул по координатам и скоростям. Однако если в классическом случае допускается принципиальная возможность проследить за движением отдельно взятой молекулы, то для квантовых микрообъектов такой подход лишен физического смысла.

3.3. Соотношение неопределенностей

В классической механике состояние материальной точки (частицы) определяется заданием координаты, импульса, энергии и т. д. Причем все эти величины могут быть в принципе одновременно измерены с любой требуемой точностью. Своеобразие корпускулярно-волновых свойств микрочастиц проявляется в том, что не для всех величин возможны одновременные точные измерения.

Рассмотрим, например, процедуру определения поперечной координаты свободно летящей частицы путем фиксации ее прохождения через щель шириной Δx в экране Э (рис. 3.7). Предположим, что пучок идентичных невзаимодействующих частиц летит перпендикулярно плоскости щели так, что их импульс \mathbf{p} направлен вдоль оси z . Следовательно, достоверно известно, что проекция $p_x = 0$. При этом отсутствует какая-либо информация о положении частицы по направлению x (координата x полностью неопределена). После прохождения щели неопределенность координаты становится равной Δx . Одновременно вследствие волновых свойств частиц, они испытывают дифракцию, отклоняются от первоначального направления и поперечная проекция импульса приобретает неопределенность Δp_x . Считая, что основная доля частиц попадает в пределы центрального дифракционного максимума с угловой шириной $\sin \varphi = \Delta p_x / p = \lambda / \Delta x$, с учетом (3.1) получаем:

$$\Delta x \Delta p_x \geq 2\pi\hbar. \quad (3.11)$$

Соотношение (3.11), установленное в 1927 г., называется *соотношением неопределенности Гейзенберга* для координаты и импульса частицы. Оно является одним из принципиальных ограничений классического описания частицы. Из него следует, что чем точнее известна координата, тем больше неопределенность импульса частицы. Верно и обратное: при уточнении значения проекции импульса происходит возрастание неопределенности координаты. Соотношение Гейзенберга не означает, что частица в каждый момент времени имеет определенные значения координаты и импульса, а мы просто не можем измерить их с достаточной точностью. Американским ученым Дж. фон Нейманом в 1932 г. было показано, что предположение о наличии «скрытых параметров», задающих точные (но неизвестные) положение и импульс электрона, противоречит опыту. Таким образом, в природе *объективно не существует* состояний частиц с одновременно точно определенными значениями координаты и соответствующей проекции импульса.

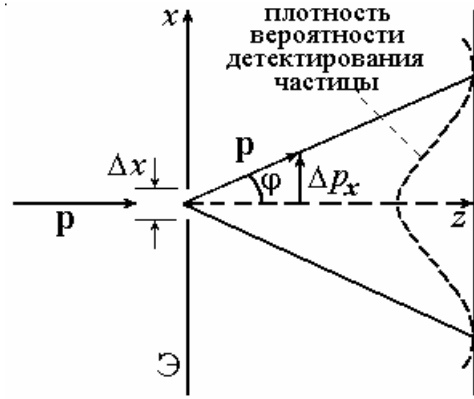


Рис. 3.7. К определению поперечной координаты частицы

В квантовой механике выявляется существенная особенность процесса измерения (взаимодействия прибора с изучаемым объектом): этот процесс всегда оказывает воздействие на подвергаемую измерению частицу, и такое воздействие принципиально не может быть сделано сколь угодно слабым. Так, например, если мы попытаемся определить координату частицы, освещая ее монохроматическим светом с длиной волны λ , то вследствие дифракционного характера рассеяния фотонов точность измерения координаты будет $\Delta x \approx \lambda / \sin \phi$, где ϕ — угол рассеяния фотонов. Для повышения точности нужно уменьшать длину волны. Однако при рассеянии фотона на частице последняя испытывает отдачу, в результате чего ее импульс получает случайное приращение $\Delta p_x \approx 2\pi\hbar \sin \phi / \lambda$. Таким образом, при одновременном измерении x и p_x снова приходим к соотношению (3.11).

Соотношение неопределенности справедливо не только для пары переменных координата – импульс, но и для некоторых других пар величин, называемых *сопряженными*. Н. Бор в 1928 г. выдвинул принцип *дополнительности*, в соответствии с которым описание состояния в квантовой механике распадается на два взаимоисключающих класса, совокупность которых могла бы дать в классическом понимании полное описание системы.

Строгое условие, описывающее возможность или невозможность

одновременного сколь угодно точного измерения двух величин, будет указано в главе 4. Сейчас отметим только еще одну пару дополнительных величин: энергию и время. Действительно, для любого волнового процесса справедливо соотношение

$$\Delta t \Delta \omega \geq 2\pi. \quad (3.12)$$

Оно следует из теоремы Фурье и выражает, в частности, тот факт, что ограниченный во времени процесс не может быть строго монохроматическим. Домножая (3.12) на постоянную Планка, для дебройлевского волнового пакета получаем

$$\Delta t \Delta E \geq 2\pi\hbar. \quad (3.13)$$

Соотношение (3.13) применимо ко всем физическим объектам и означает, что чем короче время существования какого-то состояния или время, отведенное на его наблюдение, тем больше неопределенность энергии этого состояния. Строго определенной энергией может обладать только стационарное состояние, существующее бесконечно долгое время.

Сделаем оценки ограничений, накладываемых соотношением неопределенностей в различных ситуациях.

- Движение пылинки. Пусть положение пылинки массой 1 мг определено с точностью до размера атома, то есть $\Delta x = 10^{-10}$ м. Тогда неопределенность скорости $\Delta v = 2\pi\hbar/m\Delta x = 6,6 \cdot 10^{-18}$ м/с. Естественно, такая точность недоступна никакому измерению, поэтому в этом случае реальных ограничений не возникает.
- Движение электрона в электронно-лучевой трубке (кинескопе). Пусть отверстие электронного прожектора имеет диаметр $d \sim 0,1$ мм, при этом квантовая неопределенность поперечной составляющей импульса $\Delta p_x \geq \hbar/d = 7 \cdot 10^{-30}$ Н·с. Импульс электрона связан с ускоряющим напряжением U соотношением $p = \sqrt{2meU}$, при $U = 10$ кВ получаем $p \approx 5 \cdot 10^{-23}$ Н·с. Неопределенность в направлении движения электрона $\Delta\phi = \Delta p_x/p = 1,4 \cdot 10^{-7}$ рад. Эта неопределенность при длине трубки $l = 30$ см приведет к неопределенности точки попадания электрона на экран $\Delta x_y = l\Delta\phi = 3 \cdot 10^{-8}$ м, что намного меньше размера одного пикселя (0,2 мм). Полученный результат указывает на то, что движение электрона в кинескопе практически неотлично от движения по траектории.
- Электрон в атоме. Пусть электрон находится в атоме водорода на первой боровской орбите (см. формулу (1.9)). Чтобы к такому движению было применимо представление о движении по круговой траектории, необходимо, чтобы неопределенность значения радиуса Δr была мала по сравнению с самим радиусом орбиты. В этом случае неопределенность значения радиального импульса будет $\Delta p_r \geq 2\pi\hbar/\Delta r \gg 2\pi\hbar/r$. Учтем, что

по формуле (1.6) момент импульса $L = rp = n\hbar$, т.е. при $n = 1$ $p = \hbar/r$. Следовательно, неопределенность значения импульса электрона превосходит сам импульс, и в этом случае представление о движении по классической орбите теряет смысл. Заметим, однако, что по мере роста квантового числа n относительная неопределенность импульса уменьшается, и поведение электрона становится похожим на движение по траектории. Это проявление общего соотношения между квантовой и классической механикой: при очень больших n формулы квантовой механики переходят в формулы классической. Такой предельный переход, демонстрирующий преемственность физических законов, принято называть *принципом соответствия*.