

# Элементы квантовой механики

## Гипотеза де Бройля

Два десятилетия физики привыкали к необычным свойствам света, а в 1924 г. Луи де Бройль высказал гипотезу, открывшую путь к созданию новой, квантовой физики.

*Не только свет, но и все частицы обладают сложной корпускулярно-волновой природой.*

Гипотеза де Бройля

Если для света неожиданными стали квантовые, корпускулярные свойства, то для таких частиц как, например, электрон, волновые свойства были тем более удивительными, что к моменту появления гипотезы де Бройля никаких прямых экспериментальных данных в этом отношении не было.<sup>1</sup>

Де Бройль предположил, что корпускулярные и волновые характеристики частиц связаны теми же соотношениями, что и для света, а именно

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \quad (1)$$

Стало быть, волновые свойства «монохроматической» частицы должны проявляться с длиной волны

$$\lambda_{\text{дБ}} = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}.$$

Эта длина волны

$$\lambda_{\text{дБ}} = \frac{h}{p} \quad (2)$$

Длина волны де Бройля

называется длиной волны де Бройля.

Импульс в этой формуле, вообще говоря, релятивистской

$$p = \sqrt{\varepsilon(2m_0c^2 + \varepsilon)}/c, \quad (3)$$

Релятивистский импульс

где  $m_0$  – масса покоя частицы, а  $\varepsilon$  – ее кинетическая энергия.<sup>2</sup>

Напомню, что формула (3) получается из основного соотношения между энергией и импульсом в специальной теории относительности

$$E^2 = m_0^2c^4 + p^2c^2.$$

По определению кинетической энергии  $E = m_0c^2 + \varepsilon$ , или

<sup>1</sup> Теория Бора, о которой мы поговорим чуть позже, содержала квантование (дискретность) электронных орбит в атоме, что, быть может, являлось косвенным указанием на волновые свойства электронов.

<sup>2</sup> Мы будем использовать в этом семестре букву  $\varepsilon$  для обозначения кинетической энергии, чтобы не менять ее слишком часто (это принятое обозначение в теории твердого тела).

$$E^2 = m_0^2 c^4 + \varepsilon^2 + 2m_0 c^2 \varepsilon.$$

Приравнивая правые части двух последних равенств (исключая  $E^2$ ), получаем

$$p^2 c^2 = \varepsilon^2 + 2m_0 c^2 \varepsilon, \quad (4)$$

откуда и следует равенство (3). Если формулу (4) рассматривать как квадратное уравнение для  $\varepsilon$ , то получается еще одна полезная формула

$$\varepsilon = -m_0 c^2 + \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}. \quad (5)$$

Во всех случаях, когда применимы нерелятивистские, классические формулы, нужно отдавать им предпочтение не только потому, что это проще, но и потому, что используя релятивистские соотношения можно потерять точность, вычитая близкие и большие по значению величины. Можно использовать различные условия применимости нерелятивистских формул. Во-первых, обычное условие  $v \ll c$ . В некоторых случаях более удобным оказывается соотношение  $\varepsilon \ll m_0 c^2$ , с помощью которого и разложения в ряд Тейлора из формулы (3) получаем

$$p \approx \sqrt{2m\varepsilon}. \quad (6)$$

Вместо  $m_0$  мы написали просто  $m$ , ибо можно считать, что масса в классической механике совпадает с массой покоя.

Наконец, условие  $p \ll m_0 c$  позволяет из равенства (5) получить формулу

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}, \quad (7)$$

которая на протяжении всего этого семестра будет заменять привычную кинетическую энергию  $mv^2/2$ .<sup>1</sup> Равенства (6) и (7), конечно, одно и то же.

Итак, в нерелятивистском случае можно написать

$$\lambda_{\text{дБ}}^{\text{нр}} = \frac{h}{\sqrt{2m\varepsilon}},$$

и если, например, электрон ускоряется до энергии  $\varepsilon$ , проходя разность потенциалов  $U$ ,

то

$$\lambda_{\text{дБ}}^{\text{нр}} = \frac{h}{\sqrt{2meU}}. \quad (8)$$

На семинарах вы убедитесь, что длина волны де Бройля чрезвычайно мала для любых макроскопических тел.

---

<sup>1</sup> Потому что скорость не очень хорошая величина в квантовой механике.

Для электронов же, ускоренных разностью потенциалов от нескольких десятков вольт до киловольт, длина волны (8) оказываются порядка или несколько больше межатомного расстояния в кристаллах, т.е. выполнены условия для наблюдения дифракции на трехмерной периодической решетке. Это позволило в 1927 г., Дэвиссону и Джермеру подтвердить гипотезу де Бройля, получив дифракцию электронов на кристаллической решетке никеля, хорошо исследованного с помощью рентгеновских лучей.

Опыт  
Дэвиссона и  
Джермера

Напомню, что сильное дифракционное отражение рентгеновских лучей от атомных плоскостей кристаллов наблюдается при выполнении условия Вульфа – Брэгга

$$2d\sin\theta = n\lambda, \quad (9)$$

где  $\theta$  – угол скольжения,  $d$  – расстояние между атомными плоскостями,  $n = \pm 1, 2, \dots$

Дэвиссон и Джермер наблюдали дифракционное отражение *электронов* и для одного из максимумов в отраженном пучке получили по формуле (9) значение  $\lambda = 1,67\text{А}$ .<sup>1</sup> Длина волны де Бройля, вычисленная, по формуле (8), составляла  $\lambda_{\text{дБ}} = 1,65\text{А}$ ! Некоторое рассогласование для других максимумов легко устранялось, если учесть коэффициент преломления для электронов.

Относительный показатель преломления для электронов, как и в оптике,  $n = n_2/n_1 = \lambda_1/\lambda_2$ . Длина волны де Бройля электронов в кристалле отличается от ее значения в вакууме, поскольку изменяется кинетическая энергия на глубину потенциальной ямы, которая связывает атомы (или ионы и электроны) в единое целое (см. лекции по физике твердого тела).

*Задание.* Зарисуйте схему опыта Дэвиссона и Джермера. Лучший рисунок, присланный на сайт, будет включен в лекции.

Задание

Другим классическим доказательством наличия волновых свойств у электронов стали опыты Томсона – Тартаковского, в которых исследовалась дифракция на поликристаллической фольге. Об этих и других экспериментах см. подробнее в учебнике Л.К. Мартинсона и Е.В. Смирнова.

---

<sup>1</sup>  $1\text{А} = 10^{-10}\text{м}$ . Это по порядку величины размер легких атомов и межатомного расстояния в кристаллах. В школах иногда показывают модель кристаллической решетки, у которой расстояние между атомами много больше размера самих атомов, в действительности эти величины близки: атомы как бы даже немного проникают друг в друга.

## Волновая функция. Соотношение неопределенностей

Вспомним, что плоская монохроматическая световая волна в комплексной форме записывается так:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp\{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})\}.$$

Волну де Бройля можно записать аналогично, воспользовавшись равенствами (1):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}\mathbf{r})\right\}. \quad (10)$$

Выберем ось  $Ox$  так, чтобы плоская монохроматическая волна распространялась вдоль нее. Тогда

$$\Psi(x, t) = A \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)\right\}. \quad (11)$$

Эта волна простирается вдоль оси  $Ox$  от  $-\infty$  до  $+\infty$ .<sup>1</sup> Поэтому сразу возникает вопрос, как ее связать с частицей, имеющей конечные размеры. Но ведь в оптике мы тоже имели дело с волнами, ограниченными в пространстве, помните о цуге волн? Аналогично и из волн де Бройля можно построить *волновой пакет*, суперпозицию волн с импульсами в некоторых пределах

$$p_{x0} - \Delta p_x/2 \leq p_x \leq p_{x0} + \Delta p_x/2,$$

где  $\Delta p_x$  – ширина пакета:

$$\Psi(x, t) = \int_{p_{x0}-\Delta p_x/2}^{p_{x0}+\Delta p_x/2} A(p_x) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)\right\} dp_x. \quad (12)$$

Длина цуга  $\Delta x$  и интервал волновых чисел, участвующих в его конструкции  $\Delta k_x$ , связаны, как мы это обсуждали в прошлом семестре, соотношением

$$\Delta x \cdot \Delta k_x \gtrsim 1. \quad (13)$$

Напомню его смысл. Чем длиннее цуг, тем ближе он к синусоиде, тем легче его из синусоид составить и тем уже диапазон волновых чисел (или длин волн), необходимый для этого. Ну, и наоборот.

Для монохроматической волны ответом на вопрос «где она?» будет «всюду», а волна, сосредоточенная в малой окрестности точки, состоит из «всех длин волн».

То же для волновых пакетов, описывающих частицы. Просто умножив соотношение (13) на постоянную Планка  $\hbar$ ,

---

<sup>1</sup> Поскольку волна *плоская*, то она простирается в бесконечных пределах и в направлениях, перпендикулярных направлению распространения.

Волновая  
функция сво-  
бодной части-  
цы

получим

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim \hbar. \quad (14)$$

Это и аналогичные соотношения

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \gtrsim \hbar,$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \gtrsim \hbar$$

называются соотношениями неопределенностей Гейзенберга.

Мы видим, что соотношения неопределенностей – следствие волновых свойств частиц.

Первоначально волновой пакет пытались связать непосредственно с частицей, т.е. отождествить его протяженность с размерами частицы. Однако волновые пакеты не сохраняют свои размеры, *расплываются* даже в отсутствие взаимодействия.<sup>1</sup>

С электронами (и другими частицами) можно проделать такие же опыты, как с фононами (см. лекцию «Квантовые свойства света» перед формулой (33)). А именно, дифракционная (или интерференционная) картина формируется, даже если электроны приходят на экран поодиночке; нельзя узнать в какое именно место попадет очередной электрон, но можно указать вероятность попадания в ту или иную область экрана. Эти соображения привели к сформулированной Максом Борном статистической интерпретации волновой функции частиц – так стали называть функцию  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  для произвольного состояния частицы.

Вероятность  $d\mathcal{P}$  обнаружить частицу в объеме  $dV$  определяется квадратом модуля волновой функции:

$$d\mathcal{P} \propto |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = \Psi(\mathbf{r}, t)\Psi^*(\mathbf{r}, t)dV. \quad (15)$$

Волновая функция (10) описывает свободную, ни с чем не взаимодействующую частицу. Для нее  $\Psi(\mathbf{r}, t)\Psi^*(\mathbf{r}, t) = AA^* = const$ , т.е. свободную частицу можно равновероятно обнаружить в любой точке Вселенной. Если же частица находится в ограниченной области пространства  $V$ , или вероятность обнаружить ее вне такой области достаточно быстро убывает, то волновую функцию можно *нормировать* условием

$$\iiint_{\text{Вселенная}} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 1. \quad (16)$$

Соотношения неопределенностей Гейзенберга

Статистическая трактовка волновой функции

Условие нормировки волновой функции

<sup>1</sup> Для электрона волновой пакет расплывается за время порядка  $10^{-26}$  с., что, конечно, бессмысленно.

Смысл этого условия очевиден: вероятность найти частицу хоть где-нибудь равна единице.

Если условие нормировки (16) выполнено, то соотношение пропорциональности (15) превращается в равенство

$$d\mathcal{P} = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV, \quad (17)$$

а вероятность найти частицу в конечном объеме  $V$  записывается так:

$$\mathcal{P}_V = \int_V |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV.$$

Квадрат модуля волновой функции

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \Psi(\mathbf{r}, t)\Psi^*(\mathbf{r}, t) \quad (18)$$

есть *плотность вероятности обнаружения частицы* в момент времени  $t$  в точке  $\mathbf{r}$ .

Статистическая интерпретация волновой функции несколько уточняет и смысл соотношения неопределенностей. Для конкретности в последующих рассуждениях мы будем считать, что частица движется вдоль оси  $Ox$ .

Если речь идет о свободной частице (11), то, сколько бы мы раз не измеряли ее импульс, всегда будет получаться одно и то же значение  $p_x$ . Говорят, что в таком состоянии *частица имеет определенный импульс*,  $\Delta p_x = 0$ . А вот попытка измерить ее координату будет приводить к произвольным значениям – ведь она равновероятно где угодно. Можно считать, что *неопределенность* координаты  $\Delta x = \infty$ .

Если же частица находится в конкретной точке пространства, то  $\Delta x = 0$ , но полностью неопределенным оказывается импульс (это же ширина спектра!), его измерения для частиц с определенной координатой будут приводить к произвольным значениям.

Наконец, если речь идет о волновом пакете (12), то измерения координаты будут давать значения в пределах  $\Delta x$ , а импульса – в пределах  $\Delta p_x$ .

Но нет такого состояния, когда определенные значения имеют и координата и импульс! Ведь это то же самое, как если бы монохроматическая волна оказалась локализованной в точке! Отсюда следует такой вывод.

Смысл условия нормировки

Вероятность найти частицу в  $dV$ .

Плотность вероятности обнаружения частицы

Нельзя одновременно точно измерить координату и соответствующий ей импульс.<sup>1</sup> Неопределенности  $\Delta x$  и  $\Delta p_x$  в измерениях не могут быть меньше установленных соотношениями неопределенностей (14).

Это так, потому что сама частица, проявляя свой волновой характер, не знает эти величины точнее!

Знак «больше или порядка» в соотношениях неопределенностей означает, что левая часть неравенства может быть много больше, несколько больше, равной или даже немного меньше правой части. Например,  $10^3 \gtrsim 10$ ,  $10 \gtrsim 10$ ,  $4 \gtrsim 10$ . В последнем случае левая часть, конечно не больше правой, но обе части неравенства одного порядка.

Соотношения неопределенностей часто записывают в строгой форме

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2 \text{ и т.д.} \quad (19)$$

Для того чтобы можно было написать строгое неравенство (19), нужно дать определение неопределенностей  $\Delta x$  и  $\Delta p_x$ .

Имеется в виду следующее. Пусть некоторая частица многократно приводится к одному и тому же состоянию, и каждый раз измеряется идеальными инструментами<sup>2</sup> некоторая физическая величина  $A$  – характеристика состояния этой частицы (координата, импульс, энергия и т.д.). Тогда неопределенностью величины  $A$  (обозначается  $\Delta A$ ) называется ее среднеквадратическое отклонение от среднего значения. Приняв такое определение можно доказать соотношения (19). Я не буду приводить это доказательство, но его можно найти, например, в учебнике Л.К. Мартинсона и Е.В. Смирнова.

Отмечу еще, что равенство в формуле (19) достигается только в специальных, так называемых «когерентных» состояниях. Почти во всех случаях, которые мы будем рассматривать, произведений неопределенностей больше  $\hbar/2$ .

В примерах, которые мы сейчас рассмотрим, как и во многих других, *не желательно* пользоваться строгими неравенствами (19). Поскольку все они содержат грубые оценки неопределенностей ( $\Delta x$ ,  $\Delta p_x$  и т.п.), не имеющие никакого отношения к среднеквадратическим отклонениям, использование неравенств (19) приводит к тому, что в физике называется «превышением точности».

---

<sup>1</sup> Т.е., например,  $x$  и  $p_x$ . Однако можно одновременно точно измерить координату и проекцию импульса на *другую* ось.

<sup>2</sup> Т.е. проводятся идеализированные измерения без каких-либо погрешностей.

Физический смысл соотношений неопределенностей

Важно!

Соотношения неопределенностей Гейзенберга указывают на принципиальный, природный предел точности *одновременного* измерения входящих в них физических величин. Вместе с этим появляется возможность очертить границы применимости классической (неквантовой) физики.

Задачу можно считать классической, если ограничения, накладываемые соотношением неопределенностей, не сказываются на результатах выполняемых экспериментов или вычислений. Иными словами, допустимые в условиях задачи погрешности заведомо больше неопределенностей Гейзенберга. Мы просто не почувствуем, что что-то неладно.

Обозначим, например, допустимые погрешности координаты  $x$  и проекции импульса  $p_x$  соответственно  $\delta x$  и  $\delta p_x$ . Тогда классичность задачи требует, чтобы выполнялось неравенство

$$\delta x \cdot \delta p_x \gg \Delta x \cdot \Delta p_x$$

или

$$\delta x \cdot \delta p_x \gg \hbar. \quad (20)$$

Этому соотношению можно придать другой вид. Пусть движение частицы ограничено некоторой длиной  $L$ . Совсем грубо положим, что  $\delta x \sim L$ , а неопределенность импульса положим равным самому импульсу  $p$ .<sup>1</sup> Тогда из неравенства (20) получим

$$L \gg \hbar/p$$

или, поскольку неравенство должно выполняться с большим запасом,

$$L \gg \lambda_{дБ}. \quad (21)$$

Это условие классичности задачи аналогично условию применимости геометрической оптики.

В макромире ограничения, связанные с соотношениями неопределенностей, никак не сказываются. Рассмотрим простой пример. Допустим, что мы хотим знать положение шарика массой 1 г с точностью до 1 микрометра, а скорость – до 1 мкм/с (непонятно даже как это сделать). Вычисляем

$$\delta x \cdot \delta p_x = 10^{-6} \text{ м} \cdot 10^{-3} \text{ кг} \cdot 10^{-6} \text{ м/с} = 10^{-15} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

Напомню, что  $\hbar \sim 10^{-34}$  Дж · с, так что неравенство (20) выполнено с гигантским запасом.

Условие классичности задачи

<sup>1</sup> Это максимальное значение неопределенности, поскольку величина импульса не может быть меньше неопределенности в нем (иначе как мы его нашли?).



Еще один пример. Оценим, при какой температуре молекулу водорода можно описывать классически при нормальном давлении, если ее положение мы хотим знать с точностью до некоторой доли  $\alpha$  от среднего расстояния между молекулами  $l$ , а скорость – до некоторой доли  $\beta$  от ее средней скорости  $v$ . Таким образом, нужно оценить величину

$$\delta x \cdot \delta p_x = \alpha l m \beta v$$

и сравнить ее с постоянной Планка (см. формулу (20)).

Масса молекулы водорода  $m \approx 3,3 \cdot 10^{-27}$  кг, нормальное давление  $P \approx 10^5$  Па, среднюю скорость возьмем среднеквадратичную (для оценок все равно какую)  $v = \sqrt{3kT/m}$ , а среднее расстояние между молекулами оценим по уравнению состояния идеального газа (будем надеяться, что это допустимо)

$$P = nkT.$$

Средний объем, приходящийся на 1 молекулу равен  $n^{-1}$ , так что имеем оценку для среднего расстояния  $l = (kT/P)^{1/3}$ , и

$$\delta x \cdot \delta p_x \approx \alpha \beta \sqrt{3mkT} (kT/P)^{1/3}.$$

Все подставляем, мучаемся, вводя числа в калькулятор телефона,<sup>1</sup> и получаем

$$\mu = \frac{\delta x \cdot \delta p_x}{\hbar} \approx 2\alpha\beta T^{5/6}.$$

Обратите внимание, поскольку речь идет об *оценках*, в результате оставлена одна значащая цифра «2», а не «1,8» (так даст ПифМат, автоматически проанализировав точность введенных данных) или еще больше знаков (как получится на калькуляторе). Считать, конечно, нужно с некоторым запасом.

Результат оказывается довольно неожиданным. Положим  $\alpha = 0,1$ , т.е. мы хотим знать положение молекулы с точностью  $l/10$ , и  $\beta = 0,1$ , ограничиваясь скромной точностью  $v/10$ . Тогда при комнатной температуре  $T = 300$  К получаем  $\mu \approx 2$ , и мы оказываемся на границе применимости классической механики. Теперь, оставив прежнее значение  $\alpha$ , положим  $\beta = 1$ . Это значит, что мы определяем положение молекулы с точностью до среднего расстояния от нее до ближайшей молекулы, т.е. почти теряется возможность различить соседние молекулы (мы увидим, что в квантовой механике две одинаковые частицы во-

<sup>1</sup> Не обижать же компьютер такой ерундой!

обще не различимы). Теперь  $\mu \approx 2$  при температуре  $T = 20\text{K}$ , что примерно равно температуре кипения жидкого водорода.

Порадуемся, что с классическим описанием более тяжелых молекул дело обстоит чуть-чуть лучше.

Пришло время немного все обдумать и, наконец, удивитесь. В классической механике состояние частицы определяется ее положением и импульсом; точность измерения этих величин определяется только условиями эксперимента и свойствами приборов;<sup>1</sup> написав начальные условия и второй закон Ньютона, можно найти эти величины в любой момент времени.

В квантовой механике вообще бессмысленно говорить одновременно о точных значениях координаты и импульса; одновременное измерение их возможно только в рамках соотношения неопределенностей; можно только предсказать вероятность прихода частицы в ту или иную область пространства. Последнее обстоятельство просто чудовищно с точки зрения наших обычных представлений. Представьте себе, что я держу электрон пальцами в определенной точке (на научном языке, сформировал бесконечно узкий в физическом смысле волновой пакет, что, как мы увидим, вполне возможно, см. Постулат об измерениях). Теперь его отпускаю, электрон становится свободным, волновой пакет быстро расплывается, и теперь я не знаю, где мой электрон! Ну, не совсем так. Мы научимся находить состояние частицы, если известно ее состояние в начальный момент, но это состояние задается волновой функцией и позволяет найти только вероятность получения того или иного значения характеризующих эту частицу физических величин!

Все это неприятно для нас, потому что внутренне мы хотим детерминизма, чтобы все было определено начальными условиями. Мы сталкивались с вероятностями в кинетической теории, в статистической теории, но в тех ситуациях, мы просто упрощали себе жизнь, говоря о средних значениях и т.п., ведь не следить же за  $10^{25}$  молекул воды в стакане! *Принципиально* это можно было бы сделать на необъятном количестве компьютеров (правда, было бы невозможно разобраться в результатах!).

В квантовой механике вероятностное поведение присуще

Если не интересно, дальше можно не читать

---

<sup>1</sup> Вспомним, что случайную погрешность можно уменьшить увеличением числа измерений.

одной частице, и это совсем другое дело. Но так ли уж это плохо?

Абсолютный детерминизм – неприятная штука. Пожалуйста, постучите любым пальцем руки обо что-нибудь. Нет-нет, постучите-таки. А теперь ответьте на вопрос. Могли вы в тот момент не постучать? <sup>1</sup> Или постучать другим пальцем? Абсолютный детерминизм говорит, что все предопределено в момент образования Вселенной, или, может быть еще раньше. Так что оправданием пропуска занятий могло бы быть «так на роду писано».

Впрочем, до сих пор ломаются копья в споре о возможно существующих причинах вероятностного поведения квантовых частиц.

Мы уже говорили, что частицы микромира – не волны и не частицы, а нечто более сложное, проявляющее себя в различных обстоятельствах тем или иным более понятным для нас способом. Для их описания не годится математика, используемая в классической механике и волновой теории. С нужной математикой мы попутно познакомимся в следующих лекциях, посвященным основным положениям квантовой механики.

---

<sup>1</sup> Если вы не постучали, то вопрос звучит так: «Могли вы постучать?».