К 120-летию со дня рождения (12.08.1892)

Красивая идея Луи де Бройля, или какова пространственная структура распределения плотности вероятности свободных квантовых частиц?

В.Неволин

vkn@miee.ru

На заре создания квантовой механики великий французский физик Луи де Бройль написал не только выражение для волны, носящей его имя и описывающей движение квантовых частиц, но один из первых предложил в своей докторской диссертации научному сообществу формулу [1]:

$$E = m_0 c^2 = \hbar\omega \tag{1}$$

Смысл этой формулы заключается в том, что элементарная частица с массой покоя m_0 представляет собой «сгусток» энергии, который должен двигаться по законам квантовой механики. В силу формулы (1) квантовая частица должна «дрожать». А если это так, то для частицы должно существовать поле стоячих волн плотности вероятности. Луи де Бройлю удалось найти волновую электромагнитную аналогию этого явления для электрона [1, стр.203]. Известно шредингеровское «дрожание» дираковских электронов, связанное с колебаниями центра тяжести частицы и для проявления которого нужно привлечь волны с отрицательной энергией [1, стр.530].

Покажем, что решение квантовых уравнений движения в представлении плотности вероятности с энергией из формулы (1) позволяет, прежде всего, получить дискретный спектр значений спина у квантовых частиц с ненулевой массой покоя, а также представления о пространственной структуре плотности вероятности для квантовых частиц.

Уравнения для инфинитного движения квантовой частицы массы m_0 в произвольном внешнем поле W($\vec{r}$, *t)* в представлении плотности вероятности имеют вид [2-4]:

$$m_0 \frac{\partial \rho}{\partial t} + div\rho\mathbf{P} = 0 \tag{2}$$

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = -\nabla\left(\frac{P^2}{2m_0} + W + \frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m_0\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m_0\rho}\right) \tag{3}$$

где $\rho(\mathbf{r}, t)$ - пространственно-временное распределение плотности вероятности частицы, $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ - ее макроскопический импульс, $W(\mathbf{r}, t)$ – произвольная потенциальная энергия.

Для стационарного пространственно ограниченного свободного движения квантовой частицы система уравнений (2) и (3) запишется в виде:

$$E = \frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m_0\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m_0\rho} - = const \tag{4}$$

где $E = m_0 c^2$, $\rho = \rho(\mathbf{r})$- плотность вероятности распределения частицы в пространстве. Введем линейный масштаб задачи $r_0 = \hbar / m_0 c$. Это комптоновская длина волны. Для электрона $r_0 = 3{,}5 \cdot 10^{-11} см$. Тогда получим:

$$\frac{8}{(r_0)^2} = \frac{(\nabla\rho)^2}{\rho^2} - \frac{2\Delta\rho}{\rho} \tag{5}$$

Расположим сферическую систему координат в центре масс частицы, получим:

$$\begin{gathered}\frac{8}{(r_0)^2} = \frac{1}{\rho^2}(\frac{\partial\rho}{\partial r})^2 + \frac{1}{\rho^2 r^2 \sin^2\theta}(\frac{\partial\rho}{\partial\varphi})^2 + \frac{1}{\rho^2 r^2}(\frac{\partial\rho}{\partial\theta})^2 - \frac{2}{r^2\rho}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\rho}{\partial r}) - \frac{2}{r^2\rho\sin^2\theta}\frac{\partial^2\rho}{\partial\varphi^2} - \\ - \frac{2}{\rho\cdot r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})\end{gathered} \tag{6}$$

Будем решать это уравнение методом разделения переменных:

$$\rho(r,\theta,\varphi) = \rho_r(r)\rho_\theta(\theta)\rho_\varphi(\varphi)$$

Тогда

$$\begin{gathered}\frac{8r^2}{r_0^2} - \frac{r^2}{\rho_r^2}(\frac{d\rho_r}{dr})^2 + \frac{2}{\rho_r}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d\rho_r}{dr}) = \frac{1}{\sin^2\theta}\left[\frac{1}{\rho_\varphi^2}(\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi})^2 - \frac{2}{\rho_\varphi}\frac{d^2\rho_\varphi}{d\varphi^2}\right] + \\ + \left\{\frac{1}{\rho_\theta^2}(\frac{d\rho_\theta}{d\theta})^2 - \frac{2}{\rho_\theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\rho_\theta}{d\theta})\right\} = \lambda^2\end{gathered} \tag{7}$$

Из (7) получим систему уравнений:

$$\frac{8r^2}{r_0^2} - \frac{r^2}{\rho_r^2}(\frac{d\rho_r}{dr})^2 + \frac{2}{\rho_r}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d\rho_r}{dr}) = \lambda^2 = const \tag{8}$$

$$\frac{1}{\rho_\varphi^2}(\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi})^2 - \frac{2}{\rho_\varphi}\frac{d^2\rho_\varphi}{d\varphi^2} = \beta^2 = const \tag{9}$$

И последнее уравнение:

$$\lambda^2 = \frac{\beta^2}{\sin^2\theta} + \frac{1}{\rho_\theta^2}(\frac{d\rho_\theta}{d\theta})^2 - \frac{2}{\rho_\theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\rho_\theta}{d\theta}) \tag{10}$$

Обратимся к уравнению (9), которое решается подстановкой $\frac{1}{\rho_\varphi}\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi} = u(\varphi)$. Тогда $\rho_\varphi = \cos^2\frac{\beta\varphi}{2}$ и чтобы ρ_φ была однозначной функцией для константы β должны выполняться соотношения $\beta = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots$. Введем квантовое число

$$s = \left|\frac{\beta}{2}\right| = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots, \tag{10a}$$

соответствующее спинам элементарных частиц, при этом $\rho_\varphi = \cos^2 s \cdot \varphi$ и $|\beta| = 2s$. Спин является внутренней степенью свободы квантовых частиц и, как будет показано ниже, определяет пространственную структуру распределения плотности вероятности. На рис. 1 представлены распределения плотности вероятности $\rho_\varphi(\varphi)$ при различных значения спина частиц

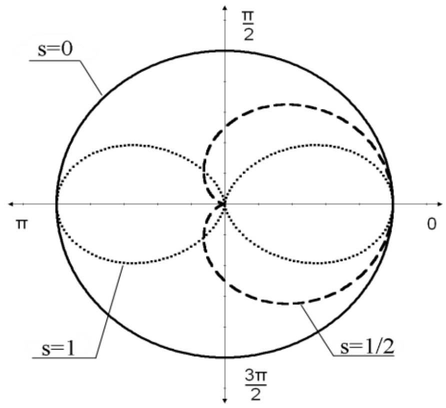

Рис. 1. Распределение плотности вероятности при движении по углу φ

Обратимся к решению уравнения (10). Будем искать решение этого уравнения в виде:

$$\rho_\theta = \sin\theta^{2s}$$

Получим следующие соотношения для констант разделения переменных:

$$\beta^2 = 4s^2 \quad \lambda^2 = 4s + 4s^2,$$

На рис.2 показаны зависимости плотности вероятности $\rho_\theta(\theta)$ при различных значениях спинового числа.

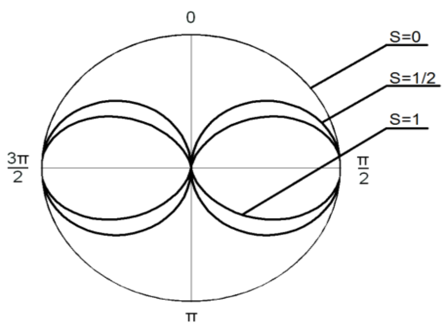

Рис.2 Распределение плотности вероятности $\rho_\theta(\theta)$ при различных значениях спинового числа.

Из рисунка можно видеть, что чем больше спин частицы, тем меньше область распределения плотности вероятности по углу θ.

Обратимся к решению уравнения (8). Сделаем замену переменных:

$$\rho_r = \frac{\alpha^2(r)}{r^2} \qquad \text{и} \qquad r = x \cdot r_0$$

Получим уравнение

$$\frac{d^2\alpha}{dx^2} + (2 - \frac{s(s+1)}{x^2}) \cdot \alpha = 0 \tag{11}$$

Приближенное решение уравнения (11) для радиальной составляющей плотности вероятности запишем в виде суперпозиции асимптотик $x \to 0$ и $x \to \infty$, которые обеспечивают равенство второй производной $\frac{d^2\alpha(x_c)}{dx^2} = 0$ в точке $2 - \frac{s(s+1)}{x_c^2} = 0$.

$$\alpha \cong \sin x\sqrt{2} + \frac{x_c^s \sin x_c\sqrt{2}}{x^s} \qquad\qquad x_c = \sqrt{\frac{s(s+1)}{2}} \tag{12}$$

Для частиц с нулевым спином это решение является точным и в размерных величинах записывается в виде осциллирующей и затухающей функций

$$\rho_r = \frac{r_0^2 \sin^2(\sqrt{2} \cdot r/r_0)}{r^2} \tag{13}$$

На рис. 3 показано распределение радиальной плотности вероятности частиц с нулевым спином.

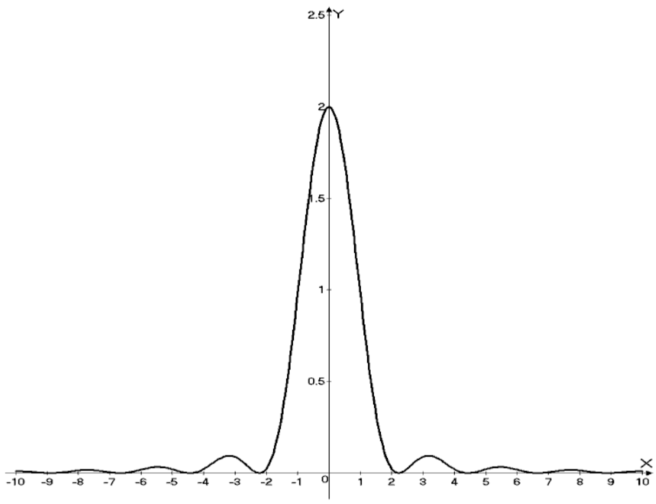

Рис.3. Распределение радиальной плотности вероятности для частиц с нулевым спином.

Характерный радиус частиц равен

$$r_\rho = \frac{\pi}{\sqrt{2}} r_0 \approx 2{,}2 r_0 \tag{14}$$

Запишем соотношение неопределенностей для радиальных движений таких частиц в виде [4]:

$$2r_\rho \cdot \delta P_r \approx 2\pi\hbar$$

где δP_r - величина квантовых флуктуаций импульса. Тогда энергия квантовых радиальных движений с учетом (14) будет равна

$$\left(\delta P_r\right)^2 / 2m_0 \approx m_0 c^2 = E \qquad (15)$$

Таким образом, свободная квантовая частица с ненулевой массой и нулевым спином совершает радиальные колебательные движения и локализована в основном в сфере радиуса r_ρ.

Для частиц с ненулевым спином решение уравнения (11) является расходящимся при $x \to 0$ и не интегрируем по объему частицы. Тогда следует предположить, что частицы с отличным от нуля спином имеют более сложную пространственную структуру движения, например, имеется полость с нулевой плотностью вероятности. На периферии частицы, как и прежде, имеется пространственно структурированное и осциллирующее распределение плотности вероятности в соответствии с формулой (12).

Характерный внешний радиус частиц с отличным от нуля спином можно оценить по формуле

$$r_{s\rho} \cong \frac{r_0}{\sqrt{2}}\left[\pi + \left(\frac{x_c\sqrt{2}}{\pi}\right)^s \sin(x_c\sqrt{2})\right] \qquad (16)$$

Как видно из предыдущего, свободные частицы с отличным от нуля спином совершают вращательно-колебательные движения. Чтобы сохранялся спин частицы для вращательной составляющей движения в уравнении (11) должно выполняться соотношение:

$$2 - \frac{s(s+1)}{x^2} > 1$$

Действительно, перейдем к физическим переменным, получим

$$E = m_0 c^2 > \frac{\hbar^2 s(s+1)}{2m_0 r^2} \qquad (17)$$

Соотношение (17) показывает, что если квантовая частица, как «сгусток» энергии движется по законам квантовой механики, то вращательная составляющая движения не должна превышать полную энергию частицы. Поскольку спин частиц ограничен, то в соответствии с неравенством (17), используя формулу из (12), получаем область с радиусом *r*, недоступную для движения частицы:

$$r < r_c = r_0\sqrt{\frac{s(s+1)}{2}}$$

Поскольку внутренний радиус области недоступности движении должен всегда быть меньше внешнего радиуса локализации $r_{s\rho}$ (формулы (16)), то получается ограничение на все возможные значения спинов

$$s(s+1) < \left[\pi + \left(\frac{x_c\sqrt{2}}{\pi}\right)^s \sin(x_c\sqrt{2})\right]^2 \qquad (18)$$

Таким образом, свободные частицы с ненулевой массой покоя и отличным от нуля спином совершают вращательно-колебательные движения и в основном локализованы в области некого подобия тора. Если у квантовой частицы имеется заряд, то за счет вращательных состояний возникают замкнутые токи и соответствующий магнитный момент, связанный со спином частицы. Решение квантовых уравнений движения в представлении плотности вероятности для частиц с ненулевой массой покоя дает известную последовательность их спинов. Периферийная пространственная структура плотности вероятности зависит от их спинового числа и имеет радиальную область «дрожания». Характерный радиус частиц можно оценить по формуле (16). Например, в этой модели электрон является «пухлой» частицей $r_{s\rho} = 1{,}4 \cdot 10^{-10}$ см по сравнению с протоном $r_{s\rho} = 7{,}4 \cdot 10^{-14}$ см.

В свое время Луи де Бройлю в соответствии с формулой (1) не суждено было предсказать наличие дискретных значений спина у квантовых частиц с ненулевой массой покоя, поскольку возобладал способ описания квантовых систем с помощью волновых функций, в продвижении которого он принял самое активное участие. Однако при описании движения квантовых частиц изначально с помощью плотности вероятности, имеющей физический смысл, такое решение является вполне доступном. Зная решение этой задачи в представлении плотности вероятности, можно получить аналогичные результаты и в представлении Шредингера. А именно, необходимо решать уравнение:

$$\Delta\Psi(r,\theta,\varphi) + \frac{2m^2c^2}{\hbar^2}\Psi = 0 \qquad (19)$$

Единственное отличие от стандартного решения этого уравнения методом разделения переменных $\Psi = \Psi_r(r)\Psi_\theta(\theta)\Psi_\varphi(\varphi)$ должно заключаться в том, что решение для Ψ_φ нужно записывать в полном виде:

$$\Psi_\varphi = C(e^{is\varphi} + e^{-is\varphi}),$$

поскольку нет предпочтительного направления для вращательных состояний.

В заключение заметим, что в учебниках по нерелятивистской квантовой механике спин постулируют как внутреннюю степень свободы элементарных частиц [5].

Краткое изложение статьи опубликовано в [6].

Литература

1. **Де Бройль Луи**. Избранные научные труды. Т.1. Становление квантовой механики. М.: Логос. 2010. 552 с.

2. **Ghosh S.K., Deb B.M.** Densities, Density-Functional and Electron Fluids // Physics Reports (Review Section of Physics Letters). - 1982. V. 92, N1. - P. 1-44.

3. **Алексеев Б.В., Абакумов А.И.** Об одном подходе к решению уравнения Шредингера // Доклады Академии наук - 1982. Т.262. - С.1100-1102.

4. **Неволин В.К.** Квантовый транспорт в устройствах электроники // М.: Техносфера. - 2012. - 87 с.

5. **Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М.** Квантовая механика. Нерелятивистская теория. // М. ГизФМЛ. 1963. С. 227.

6. **Неволин В.К.** Идея де Бройля: пространственная структура квантовых частиц. Журнал Наноиндустрия. 2012. №6 (36). С.68-70.