

# Съотношения за неопределеност на Хайзенберг. Вълнова функция. Общо и стационарно уравнение на Шрьодингер

## Съотношения за неопределеност на Хайзенберг. Вълнова функция

Дотук разгледахме явления, в които както фотоните, така и микрочастиците проявяват сложен корпускулярно-вълнов характер. В рамките на класическата физика е невъзможно да се обясни едновременното притежаване на толкова различни (корпускулярни и вълнови) свойства. От това неизбежно следва изводът, че някои понятия от класическата механика, въведени на основата на многобройни опити с макротелата, са неприложими към света на елементарните частици. Например за едно движещо се тяло или материална точка в класическата механика винаги е възможно едновременно и точно да бъдат определени неговата скорост и координата (положение в пространството); възможно е също така да се определи и траекторията на движението му. Оказва се, че за микрочастиците това е невъзможно – при разпространението си с дадена скорост те нямат точно определена траектория, но при взаимодействие (напр. с измервателен прибор) се регистрират в една точка. С други думи, микрочастиците не проявяват едновременно и корпускулярните и вълновите си характеристики. Ако в едни явления се наблюдават корпускулярните им свойства, в други се проявяват вълновите им свойства. От това следва и невъзможността едновременно да бъдат определени техните координати и скорости.

Изхождайки от тези ограничения в поведението на микрочастиците, немският физик В. Хайзенберг през 1927 г. установил следните съотношения на неопределеност за координатите и импулсите (скоростите) на всяка микрочастица:

$$(1) \begin{cases} \Delta x \Delta p_x \geq h \\ \Delta y \Delta p_y \geq h \\ \Delta z \Delta p_z \geq h \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} m \Delta x \Delta v_x \geq h \\ m \Delta y \Delta v_y \geq h \\ m \Delta z \Delta v_z \geq h \end{cases}$$

Изразите (1) се наричат съотношения на неопределеност на Хайзенберг и изразяват т.нар. принцип на неопределеността в квантовата механика (константата в дясната част в различни учебници може да бъде записана като  $\hbar$ ,  $h/2$ ,  $\hbar/2$  вместо  $h$ , но това не променя същността на принципа). Според този принцип произведението от неопределеностите на координатите и импулсите по дадена координатна ос не може да бъде по-малко от константата на Планк. Той показва, че в областта на микросвета координатата и импулсът на една микрочастица в дадено направление не могат да бъдат измерени едновременно. Колкото по-точно определяме координатата на частицата ( $\Delta x \rightarrow 0$ ), толкова по-неопределен става нейният импулс по тази ос ( $\Delta p_x \rightarrow \infty$ ) и обратно. Това не ни забранява обаче да измерваме едновременно координатата и импулсът по различни оси – напр. можем да определим с произволно голяма точност координатата по оста  $X$  и импулсът по оста  $Y$  на даден обект.

Към съотношенията (1) може да се добави и още една еквивалентна зависимост

$$(2) \Delta E \Delta t \geq h,$$

където  $\Delta E$  е неопределеността на енергията, а  $\Delta t$  – неопределеността във времето. Съотношението (2) намира голямо приложение в атомната и ядрената физика. Напр. ако неопределеността на енергията на дадено свързано състояние е  $\Delta E$ , то  $\Delta t$  е времето на живот на това състояние. Всяка система може да съществува безкрайно дълго време ( $\Delta t \rightarrow \infty$ ) в основното си състояние, поради което в него тя притежава точно определена енергия ( $\Delta E \rightarrow 0$ ).

Принципът на неопределеността е един от основните принципи на квантовата механика, която се базира на вероятностно възприемане на явленията и физичните променливи. Той е израз на неприложимостта на класическите понятия към поведението на микрообектите и показва, че сигурността от класическата физика не е възможна в квантовата физика. Това не означава обаче, че той е невалиден за макротелата. В областта на макросвета съотношенията на неопределеност просто нямат никакво практическо значение, тъй като неопределеността при определяне на координатите и импулсите на макротелата превишават многократно стойността на константата на Планк ( $\sim 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ ).

От всичко, казано дотук, става ясно, че поведението на микрочастиците не може да се опише с понятията на класическата физика. Движещите се микрочастици нямат определено положение в пространството – те могат да бъдат открити с еднаква вероятност навсякъде. От друга страна, тяхното регистриране става винаги в една точка. В квантовата механика възниква задачата да се определи някаква функция, която да обединява вълновите и корпускулярните свойства на микрочастиците и да описва тяхното поведение. Ще поясним принципното намиране на такава функция чрез един пример със светлината, тъй като по-подробно описвахме нейните характеристики. Нека върху повърхността на

прозрачна пластинка пада сноп светлина. Съгласно вълновите представи за светлината част от вълната ще се отрази от горната повърхност на пластинката, а друга част ще се пречупи и ще премине през нея. Ако означим интензитетите на падащия, отразения и пречупения сноп с  $I$ ,  $I_r$  и  $I_t$ , за тях ще бъде в сила следното равенство (съгласно ЗЗЕ):

$$(3) I = I_r + I_t.$$

Тъй като интензитетът на светлината е пропорционален на квадрата на амплитудата на вълната, (3) може да се запише още като

$$(4) A^2 = A_r^2 + A_t^2,$$

където  $A$ ,  $A_r$  и  $A_t$  са амплитудите на падащата, отразената и преминалата вълна. Ако светлината се проявява с корпускуларните си (квантови) свойства, интензитетът на падащия светлинен сноп трябва да бъде пропорционален на броя на фотоните, които се съдържат в него. Ако с  $N$ ,  $N_r$  и  $N_t$  означим броя на падащите, отразените и преминалите фотони, тогава

$$(5) N = N_r + N_t.$$

За да обединим двете представи за същността на светлината, трябва да допуснем, че броят на фотоните в светлинния сноп е пропорционален на квадрата на амплитудата на съответната вълна. Ако разделим (4) на  $A^2$ , а (5) на  $N$ , ще получим:

$$(6) \begin{aligned} 1 &= \frac{A_r^2}{A^2} + \frac{A_t^2}{A^2} \\ 1 &= \frac{N_r}{N} + \frac{N_t}{N} \end{aligned}$$

Тъй като левите части в двата израза на (6) са равни, можем да приравним и десните, откъдето следва

$$(8) \frac{N_r}{N} = \left(\frac{A_r}{A}\right)^2, \quad \frac{N_t}{N} = \left(\frac{A_t}{A}\right)^2.$$

Отношението  $N_r/N$  определя каква част от общия брой падащи фотони се отразява, или вероятността един фотон да се отрази от повърхността на разглежданата пластинка. Отношението  $N_t/N$  определя каква част от падащите фотони преминава през пластинката, т.е. вероятността даден фотон да премине през нея. Ние не знаем кой от падащите фотони ще се отрази, нито кой ще премине, но тяхното поведение може да се опише вероятно чрез квадратите на относителните амплитуди на съответните им вълни. Изхождайки от подобни съображения, немският физик М. Борн предложил поведението на всяка микрочастица да се описва от една функция  $\Psi(x,y,z,t)$ , наречена вълнова функция. Тази функция в общия случай е комплексна функция и се определя от модул и аргумент ( $\Psi = |\Psi|e^{i\Phi}$ ). Амплитудата на вълната, описвана от тази функция, е модулът. От казаното по-горе и (8) следва, че квадратът на модула (амплитудата) на вълновата функция  $|\Psi|^2$  трябва да определя вероятността  $dW$  да намерим дадената микрочастица в обем  $dV$  от пространството:

$$(9) |\Psi|^2 = \frac{dW}{dV}, \quad dW = |\Psi|^2 dV,$$

т.е. квадратът на модула на вълновата функция определя плътността на вероятността – това е вероятността частицата да се намира в единица обем от пространството. Следователно физичен смисъл има квадратът на модула на вълновата функция и този смисъл е вероятностен.

Вероятността може да се променя само от  $0$  до  $1$ . Ако частицата реално съществува, вероятността  $W_\infty$  да я намерим някъде в пространството (цялото тримерно пространство) трябва да е равна на  $1$ . Тази вероятност ще получим, ако интегрираме (9) по целия обем  $V_\infty$  на пространството:

$$(10) W_\infty = \int_{V_\infty} dW = \int_{V_\infty} |\Psi|^2 dV = 1.$$

Това условие (10) се нарича условие за нормировка на вълновата функция. Физичният смисъл на (10) е свързан с факта, че при определени условия частицата със сигурност трябва да се намира в някоя точка от пространството. С други думи, условието за нормировка говори просто за обективното съществуване на частицата във времето и пространството.

Вълновата функция обединява квантовите и вълновите свойства на микрочастиците и служи за описание на тяхното поведение. За да бъде обективна характеристика на състоянието на частиците, тя трябва да удовлетворява следните условия:

– да бъде ограничена;

– да бъде непрекъсната и еднозначна;

– да се подчинява на принципа на суперпозицията – ако една частица може да се намира в различни състояния, на които съответстват вълнови функции  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$ , то тя може да заема и състояние с вълнова функция  $\Psi$ , която е линейна комбинация от тези функции:

$$\Psi = \sum_{i=1}^n c_i \Psi_i,$$

където  $c_n$  са коефициенти (комплексни числа), а  $n$  – броят на състоянията, заемани от частицата.

### Общо и стационарно уравнение на Шрьодингер

В класическата механика движението на телата се описва от втория принцип на Нютон. Той се явява диференциалното уравнение, чието решение е законът за движение на обекта. Микрочастиците притежават и вълнови свойства, поради което за характеризиране на тяхното поведение е необходимо да се използва друго диференциално уравнение. Тъй като вълновата функция описва поведението на микрочастиците (аналогично на закона за движение), е логично да се предположи, че това уравнение трябва да се отнася за нея (т.е. вълновата функция трябва да бъде решение на това уравнение) и да бъде подобно на тези, които описват звуковите или електромагнитните вълни. Такова уравнение е формулирано от австрийския физик Е. Шрьодингер през 1926 г. и представлява квантово-механично обобщение на факта, че пълната енергия на дадена система е сума от кинетичната и потенциалната ѝ енергии. То не се извежда теоретично, а представлява основен постулат за нерелативистичната квантова механика ( $v \ll c$ ). Верността му се потвърждава от доброто съответствие между неговите следствия и получените експериментални резултати. Нарича се **общо уравнение на Шрьодингер** или **само вълново уравнение** и има следния вид:

$$(11) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x, y, z, t) + U(x, y, z, t) \Psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$

$$\Delta \Psi = \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right)$$

където  $\hbar = h/2\pi$ ;  $m$  е масата на движещата се микрочастица;  $i$  – имагинерната единица ( $i = \sqrt{-1}$ );  $U$  – потенциалната енергия на частицата в полето, в което тя се движи, а  $\Delta$  е операторът на Лаплас.

Ако движещата се микрочастица се намира в стационарно силово поле и нейната потенциална енергия не зависи от времето можем да използваме (11) в по-прост вид – т.нар. стационарно уравнение на Шрьодингер. В този случай можем да представим вълновата функция като произведение от две функции – една завеща само от пространствените координати  $\psi(x, y, z)$  и друга, която зависи само от времето  $\phi(t)$  –  $\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)\phi(t)$ . Като заместим в (11) ще получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(\psi\phi) + U \psi\phi = i\hbar \frac{\partial(\psi\phi)}{\partial t}; \quad -\phi \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U \psi\phi = i\hbar \psi \frac{\partial\phi}{\partial t} \quad | : \psi\phi$$

$$(12) \quad -\frac{1}{\psi} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U = \frac{1}{\phi} i\hbar \frac{\partial\phi}{\partial t},$$

тъй като  $\psi$  не зависи от времето и е константа при диференцирането по времето в дясната част, а  $\phi$  не зависи от координатите и е константа при диференцирането по координатите в лявата част. Виждаме, че лявата част на (12) зависи само от координатите (нито  $\psi$ , нито потенциалната енергия  $U$  зависят от времето), а дясната част зависи само от времето. От друга страна (12) описва поведението на частицата и трябва да е валидно във всички точки от пространството във всеки момент от време. Това е възможно само ако и двете части са равни на една и съща константа, която не зависи нито от координатите, нито от времето:

$$-\frac{1}{\psi} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U = E = \frac{1}{\phi} i\hbar \frac{\partial\phi}{\partial t}.$$

Константата  $E$  наричаме пълна енергия на частицата и уравнението за частта, която не зависи от времето придобива вида:

$$-\frac{1}{\psi} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U = E; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi - (E - U)\psi = 0$$

$$(13) \quad \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0.$$

Полученият израз (13) се нарича стационарно уравнение на Шрьодингер. Можем да го използваме винаги, когато потенциалната енергия на частицата зависи само от координатите:  $U=U(x,y,z)$ .