

ЛЕКЦИЯ 1

ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИ ОСНОВИ НА КВАНТОВАТА МЕХАНИКА. ВЪЛНИ НА ДЪО БРОЙЛ. ВЪЛНОВА ФУНКЦИЯ. ПРИНЦИП ЗА СУПЕРПОЗИЦИЯ НА СЪСТОЯНИЯТА

Квантовата механика е наука за движение на микрочастиците (елементарни частици, атоми, молекули, атомни ядра) и взаимодействията между тях.

Исторически, възникването на квантовата механика е предшествано от натрупването на голям обем експериментални факти, които не могат да бъдат обяснени в рамките на класическите физични представи и свидетелстват за корпускуларните свойства на електромагнитното лъчение, вълновите свойства на микрочастиците, дискретния характер на възможните стойности на основни величини, характеризиращи състоянията на микрочастиците. Тук, за експерименталното обосноваване на квантовата механика са разгледани само някои от експериментите, имащи непосредствено значение за изясняване на основните квантовомеханични понятия.

1. Корпускуларни свойства на електромагнитното лъчение

1.1. Формула на Планк

Законът на Релей-Джинс за спектралната плътност на енергията на равновесното лъчение u_ω ,

$$u_\omega = \frac{\omega^2 kT}{\pi^2 c^3}, \quad (1,1)$$

където ω е кръговата честота на лъчението; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K - константата на Болцман; c - скоростта на светлината във вакуум, а T - абсолютната температура на лъчението, е получен чрез използване на резултати от класическата статистическа физика (теоремата за равномерното разпределение на кинетичната енергия по степените на свобода, съгласно която, средната енергия на един осцилатор с произволна честота е $\theta = kT$ [1]), поради което той не отчита квантовите свойства на лъчението. Това е основната причина, поради която (1,1) се съгласува с експерименталните резултати само при ниски честоти, при каквито честоти квантовите свойства на равновесното лъчение се проявяват слабо. При високи честоти, обаче, разминаването на (1,1) с резултатите от опита е много голямо. Като следствие от закона на Релей-Джинс (1,1) се получава разходимост при определянето на плътността на енергията на равновесното лъчение u

$$u = \int_0^{\infty} u_{\omega} d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \omega^2 d\omega = \infty , \quad (1,2)$$

известна във физиката като “**ултравиолетова катастрофа**”, която показва ясно, че свойствата на равновесното лъчение не могат да бъдат изяснени с използване само на методите на класическата статистическа физика.

Планк (1900 г.) извежда потвърждаваща се от експеримента формула за спектралната плътност на енергията на равновесното лъчение

$$u_{\omega} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1)} , \quad (1,3)$$

където $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, ($h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s е константата на Планк), предполагайки, че излъчващият хармоничен осцилатор (излъчващото тяло се представя като система от такива осцилатори) може да се намира само в състояния с дискретни енергии и при преход от състояние с по-висока енергия в състояние с по-ниска енергия, излъчва. Енергиите на осцилатора в различните състояния са кратни на величината $E = \hbar \omega$, която се нарича **квант енергия**.

Нека отбележим, че при достатъчно ниски честоти, за които е изпълнено $\hbar \omega \ll kT$, от **формулата на Планк** (1,3) се получава закона на Релей-Джинс (1,1). При високи честоти ($\hbar \omega \gg kT$) от (1,3) се получава закона на Вин [1], който първоначално е бил получен емпирично.

1.2. Фотони

Ред явления, свързани с процесите на излъчване, поглъщане и разсейване на електромагнитно лъчение от веществото могат да бъдат обяснени в рамките на корпускулярната представа за електромагнитното лъчение, разглеждаща го като съвкупност от отделни частици – **фотони**, със съответна енергия E и импулс \vec{p} ,

$$E = \hbar \omega , \quad (1,4)$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} , \quad (1,5)$$

където \vec{k} е вълновия вектор, имащ посоката на разпространение на лъчението.

От съотношението $E = mc^2$ и (1,4) получаваме масата на фотона $m = \frac{\hbar \omega}{c^2}$.

Големината на импулса му е $p = mc = \frac{\hbar \omega}{c}$, откъдето следва, че $E = pc$ и масата в покой на фотона m_0 , както следва от израза за енергията на релативистична частица $E = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$, трябва да бъде нула.

За процесите на взаимодействие на фотоните с микрочастиците, разглеждани като удари между класически частици (материални точки), могат да бъдат приложени законите за запазване на енергията и импулса:

$$\hbar\omega + E = \hbar\omega' + E' , \quad (1,6)$$

$$\hbar\vec{k} + \vec{p} = \hbar\vec{k}' + \vec{p}' , \quad (1,7)$$

където E и E' са началната и крайната енергия на микрочастицата; \vec{p} и \vec{p}' - началният и крайният импулс на същата; $\hbar\vec{k}$, $\hbar\vec{k}'$ и $\hbar\omega$, $\hbar\omega'$ - импулсите и енергиите на фотона, съответно.

1.3. Обяснение на законите при фотоефекта

Фотоефектът е явление, изразяващо се в отделяне на електрони от повърхността на веществото под действие на електромагнитно лъчение. Той може да се обясни на основата на уравнение (1,6), полагайки $\omega' = 0$. Тогава $\hbar\omega + E = E'$ и, ако A е отделителната работа за веществото, а енергията на електрона във веществото означим с “ $-A$ ”, получаваме уравнението на Айнщайн за фотоефекта (1905 г.)

$$\hbar\omega - A = E_k , \quad (1,8)$$

където $E_k = \frac{m_0 v^2}{2}$ е кинетичната енергия на фотоелектрона (ограничили сме се с нерелативистичния случай).

С корпускуларните свойства на електромагнитното лъчение могат да бъдат обяснени всички експериментално установени закономерности на фотоефекта:

1. Броят на фотоните, попадащи за единица време върху повърхността на веществото, е правопрпорционален на интензитета на електромагнитното лъчение. Колкото повече са фотоните, толкова по-голям брой електрони успяват да погълнат фотон и да се отделят от веществото. Това обяснява защо броят на отделените за единица време фотоелектрони е пропорционален на интензитета на лъчението;
2. Ако $\hbar\omega < A$, фотоефект не се наблюдава, защото енергията на фотона не е достатъчна за отделянето на електрон. Минималната, кръгова честота ω_{\min} (максималната дължина на вълната λ_{\max} , наречена червена граница на фотоефекта за това вещество), при която все още е възможен фотоефект, се определя от равенството $\hbar\omega_{\min} = A$ и, следователно

$$\omega_{\min} = \frac{A}{\hbar} \Rightarrow \lambda_{\max} = \frac{2\pi c}{\omega_{\min}} = \frac{ch}{A} ;$$

3. Фактът, че максималната кинетична енергия на фотоелектроните $(E_k)_{\max}$

не зависи от интензитета на светлината (зависи само от енергията на фотоните $\hbar\omega$ и отделителната работа A), следва непосредствено от уравнението на Айнщайн (1,8) :

$$(E_k)_{\max} = \hbar\omega - A ,$$

т.е. $(E_k)_{\max}$ е линейна функция на честотата ω .

1.4. Ефект на Комптон

Ефектът на Комптон (1922 г.) е еластично разсейване на електромагнитно лъчение от свободни електрони, което се съпровожда с увеличаване на дължината на вълната на разсеяното лъчение [2].

Наблюдава се, когато лъчението има висока честота ω (рентгеново и γ -лъчение), така че може да се пренебрегне енергията на връзката E_b на електрона в атома, т.е. при $\hbar\omega \gg E_b$.

Класическата електродинамика не може да обясни изменението на дължината на вълната на разсеяното лъчение, понеже съгласно нейните закони, под действието на периодично електрично поле, електронът трябва да трепти с честота, равна на честотата на полето и следователно, да излъчва вторични (разсеяни) вълни със същата честота.

За обяснение на ефекта на Комптон се използват законите за запазване на енергията (1,6) и на импулса (1,7) при $\vec{p} = 0$:

$$\hbar\omega + m_0c^2 = \hbar\omega' + \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} , \quad (1,9)$$

$$\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \frac{m_0\vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (1,10)$$

Тези закони са написани за релативистичния случай, тъй като енергиите на фотоните на рентгеновото лъчение са големи и електроните при удар с тях могат да придобият големи скорости. От (1,9) и (1,10) (при отчитане на съотношенията $\vec{k} \cdot \vec{k}' = kk' \cos\theta$, $k = \frac{\omega}{c}$ и $k' = \frac{\omega'}{c}$) получаваме, съответно:

$$\hbar^2(\omega - \omega')^2 = m_0^2c^4 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right)^2 , \quad (1,11)$$

$$\hbar^2(\omega^2 - 2\omega\omega' \cos\theta + \omega'^2) = m_0^2c^4 \frac{v^2}{c^2 - v^2} . \quad (1,12)$$

Като извадим (1,11) от (1,12), получаваме

$$\hbar^2 \omega \omega' (1 - \cos \theta) = m_o^2 c^4 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right). \quad (1,13)$$

Използвайки отново (1,9), за дясната страна на (1,13) получаваме

$$m_o^2 c^4 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right) = m_o c^2 \hbar (\omega - \omega'). \quad (1,14)$$

Така, от (1,13) и (1,14) имаме

$$\hbar \omega \omega' (1 - \cos \theta) = m_o c^2 (\omega - \omega'). \quad (1,15)$$

От (1,15) може да се определи изменението на дължината на разсеяната вълна $\Delta \lambda$ в зависимост от ъгъла на разсейване

$$\hbar (1 - \cos \theta) = m_o c \left(\frac{c}{\omega'} - \frac{c}{\omega} \right)$$

или

$$\Delta \lambda = \frac{2\pi \hbar}{m_o c} (1 - \cos \theta), \quad (1,16)$$

където е отчетено, че $\frac{c}{\omega} = \frac{\lambda}{2\pi}$, $\frac{c}{\omega'} = \frac{\lambda'}{2\pi}$, $\Delta \lambda = \lambda' - \lambda$.

Величината $\frac{2\pi \hbar}{m_o c} = \frac{h}{m_o c} = 2,4263096 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ се нарича **комптонова дължина на вълната**. Това е дължината на вълната на фотон с енергия, равна на $m_o c^2$ - енергията на електрона в покой.

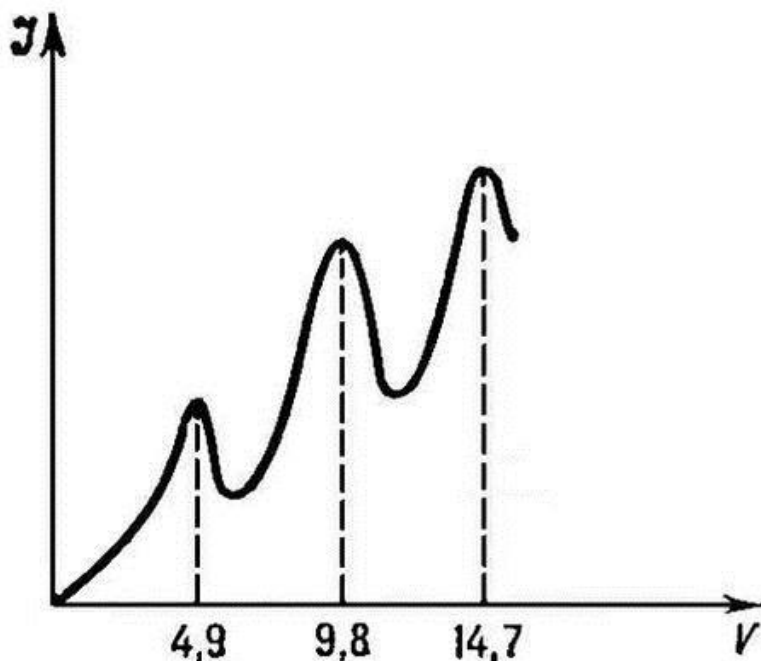
2. Дискретност на атомните състояния

Дискретният характер на възможните стойности на основни величини, характеризиращи състоянията на микрочастиците, противоречи на представите на класическата физика. Освен това, наличието на непрекъснат спектър от стойности на някои величини задълбочава трудностите в обяснението на редица свойства на микрочастиците.

2.1. Опит на Франк и Херц

Опитът на Франк и Херц (1913 г.) се явява експериментално доказателство на дискретността на вътрешната енергия на атомите. В своята опитна постановка те пропускат електрически ток в съд с живачни пари. Наблюдава се

нарастване на тока I при увеличаване на ускорящото напрежение до 4,9 eV, т.е. електроните с енергии $E < 4,9 \text{ eV}$ изпитват еластични (без обмен на енергия) удари с атомите на живака и вътрешната енергия на атомите не се променя. При стойност $V = 4,9 \text{ eV}$ (и кратни на нея стойности 9,8 eV, 14,7 eV) се появяват резки спадове на тока (фиг.1.1). Това определено показва, че при

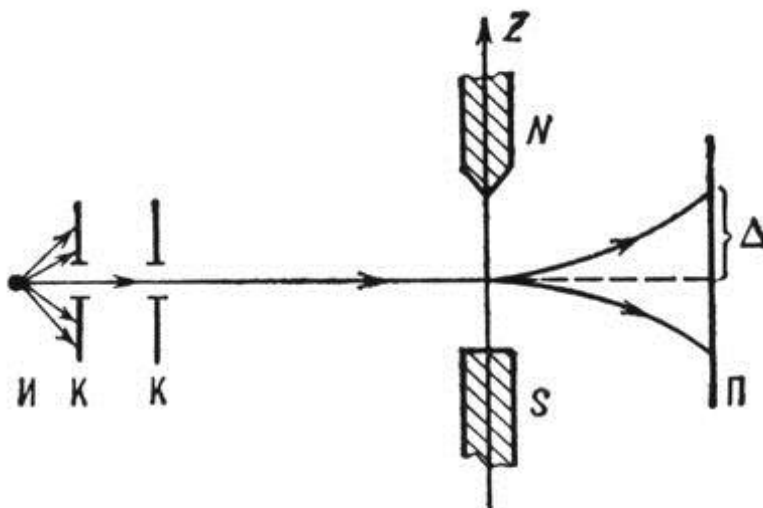


фиг. 1.1. Зависимост на тока от приложеното напрежение в опита на Франк и Херц

тези стойности на приложеното напрежение V ударите на електроните с живачните атоми носят нееластичен характер, т.е. енергията на електроните е достатъчна за възбуждане на атомите. Тази зависимост може да бъде изтълкувана, ако се приеме, че енергията на живачните атоми има **дискретен спектър**. Електроните взаимодействат с атомите и им предават енергия само в тези случаи, когато енергиите на електроните имат определена стойност E , равна на разликата между енергиите на две възможни състояния на атома $E = E_n - E_m$. При това атомът преминава в състояние с по-голяма енергия – **възбудено състояние**, а в стойностите на тока се появява минимум.

2.2. Опит на Щерн и Герлах

Опитът на Щерн и Герлах (1922 г.) експериментално потвърждава, че атомите притежават магнитен момент, проекцията на който по посоката на външното магнитно поле приема само определени стойности (**пространствено квантуване**). Щерн и Герлах изследват преминаването на сноп атоми на Ag (а по-късно и на други елементи) през силно нехомогенно магнитно поле (фиг.1.2) с цел проверка на теоретично получената формула за пространствено квантуване на проекцията μ_z на магнитния момент на атома $\vec{\mu}_o$: $\mu_z = m\mu_o$ ($m=0, \pm 1$).



фиг. 1.2. Схема на опита на Щерн-Герлах: И – източник на атоми; К – процеп, формиращ тесен сноп; N, S – полюси на магнита, създаващ постоянно нехомогенно поле; П – пластинка на която попадат атомите; Δ - отклонението на снопа от първоначалната посока. Опитът се извършва във вакуум.

На атома, притежаващ магнитен момент и движещ се в нехомогенно по оста Oz магнитно поле \vec{H} , действа сила $\vec{F} = \mu_z \frac{\partial \vec{H}}{\partial z}$, която го отклонява от първоначалната посока на движение. Ако проекцията на магнитния момент на атома се изменя непрекъснато, то на пластинката П би се наблюдавала размита широка линия. Обаче, било открито разцепване на снопа атоми на две компоненти, симетрично отместени на разстояние Δ относно първоначалната посока на разпространение – на пластинката се появяват две тесни ивици. Това показва, че проекцията на магнитния момент на атома μ_z по посока на полето \vec{H} приема само две, различаващи се по знак, стойности $\pm \mu_o$, т.е. $\vec{\mu}_o$ се ориентира по посока на полето \vec{H} или в противоположна посока. Големината на магнитния момент на атома μ_o , измерена в опита (по отместването Δ), се оказва равна на магнетона на Бор [3].

3. Вълнови свойства на микрочастиците

3.1. Вълни на дьо Бройл

По аналогия с двойствения характер на светлината, дьо Бройл (1924 г.) предполага, че тази двойственост (*корпускулярно-вълнов дуализъм*) може да бъде присъща и на частиците. Той допуска, че частиците могат да притежават също така и вълнови свойства. Луи дьо Бройл свързва с движението на всяка свободна частица плоска монохроматична вълна

$$\Psi = \Psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}, \quad (1,17)$$

при което ω и \vec{k} са свързани с енергията E и импулса \vec{p} на частицата със същите формули, както и за фотона (вж. (1,4) и (1,5)), т.е. $\omega = \frac{E}{\hbar}$ и $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$. Тогава

$$\Psi = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}, \quad (1,18)$$

където Ψ_0 е амплитудата на вълната. При свободно движение на микрочастица, енергията ѝ E и импулсът ѝ \vec{p} не се променят, следователно, не се променят кръговата честота ω и вълновия вектор \vec{k} . Затова **вълната на дьо Бройл** (1,17), свързана със свободното движение на частица, представлява плоска монохроматична вълна.

Дължината на вълната на дьо Бройл е

$$\lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|} = \frac{2\pi\hbar}{|\vec{p}|}. \quad (1,19)$$

За нерелативистична частица $E = \frac{p^2}{2m_0}$, откъдето следва, че $p \equiv |\vec{p}| = \sqrt{2m_0 E}$ и

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 E}}.$$

Едно от основните свойства на вълните на дьо Бройл е тяхната **дисперсия** – зависимост на фазовата скорост от дължината на вълната λ . За простота, да разгледаме вълна на дьо Бройл, разпространяваща се по оста Ox :

$$\Psi = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kx)}. \quad (1,20)$$

Величината $\varphi = kx - \omega t$ се нарича **фаза на вълната**. Уравнението на фазовата повърхнина е

$$kx - \omega t = \text{const}. \quad (1,21)$$

Диференцирайки (1,21) по времето t , получаваме $\omega - k \frac{dx}{dt} = 0$, откъдето получаваме скоростта, с която се движи фазовата повърхнина

$$u = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k}, \quad (1,22)$$

наречена **фазова скорост**. В случая на вълна на дьо Бройл, има място равенството (за нерелативистична частица)

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m_0\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m_0}, \quad (1,23)$$

откъдето за фазовата скорост (1,22) получаваме

$$u = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k^2}{2m_0 k} = \frac{\hbar k}{2m_0}. \quad (1,24)$$

Замествайки $k = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ в (1,24), получаваме $u \sim \frac{1}{\lambda}$.

Следователно, за разлика от електромагнитните вълни, вълните на дьо Бройл притежават дисперсия даже във вакуум, т.е. вълните на дьо Бройл с различна дължина на вълната се разпространяват с различна скорост. От (1,24) се вижда, че фазовата скорост на вълната на дьо Бройл не е равна на скоростта на частицата.

3.2. Дифракция на частици

Вълновите свойства на частиците трябва да бъдат открити в експерименти, типични за електромагнитните вълни – например в дифракционни и интерференчни явления. От формулата за дължината на вълната на дьо Бройл (1,19) може да се оцени, че на движещ се електрон с енергия 1 eV съответства дължина на вълната на дьо Бройл няколко ангстрьома (Å) (от порядъка на дължината на вълната на Rö лъчи). Затова за наблюдаване на дифракция на електрони трябва да се използват кристални решетки. Първите опити по дифракция на електрони са проведени от Девисон и Джермер (1926 г.) [2–5], Томсон и Тартаковский [3–5].

В *опита на Девисон и Джермер*, монохроматичен сноп от електрони, получени от електронно-лъчева тръба, пада перпендикулярно на повърхността на кристал. Отразените електрони се улавят с помощта на фарадеев цилиндър, съединен с галванометър. Оказало се, че броят на отразените електрони е максимален в определени посоки на тяхното разпространение. Разпределението на максимумите на броя на електроните се подчинява на елементарната теория на дифракцията по формулата

$$n\lambda = d \sin \theta, \quad (1,25)$$

където n е номера на дифракционния максимум, λ - дължината на вълната на дифрактиращите лъчи, d - константата на решетката, а θ - ъгълът на разсейване. При малки скорости, вземайки предвид (1,19), за дължината на вълната на дьо Бройл имаме

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 eU}}, \quad (1,26)$$

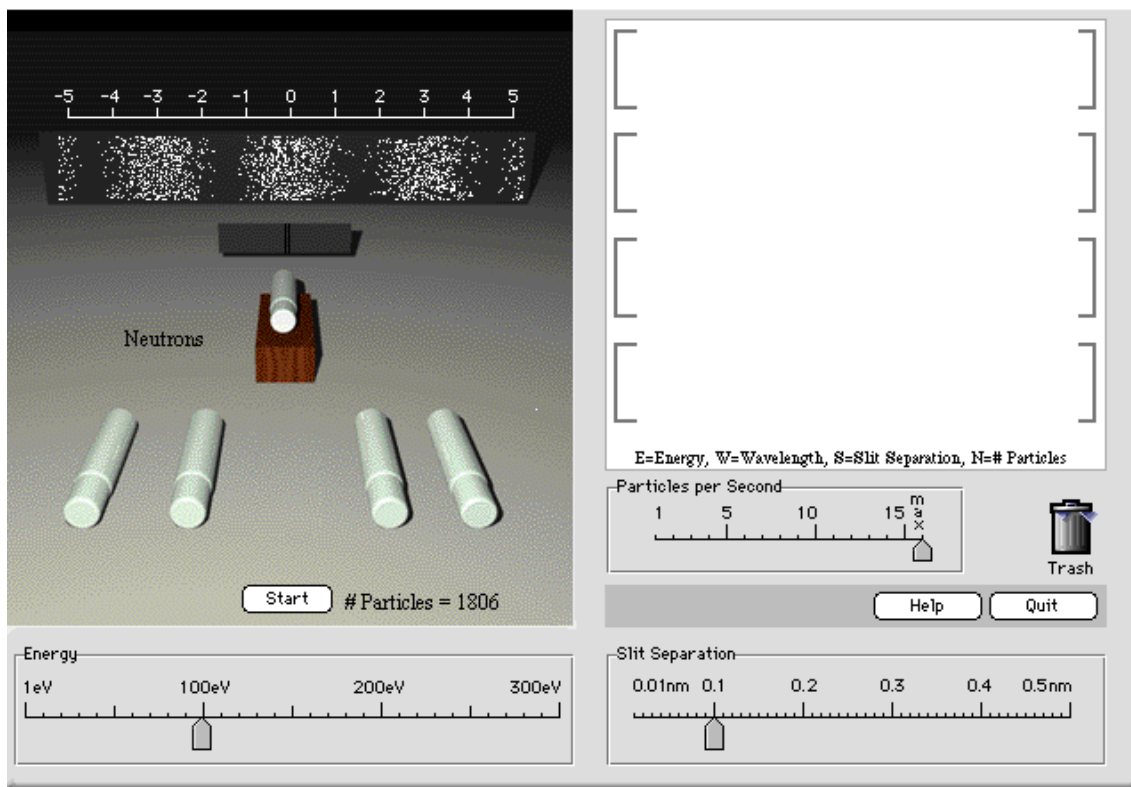
където U е ускоряващия потенциал. Замествайки (1,26) в (1,25), получаваме

$$\sqrt{U} \sin \theta = \text{const.} \quad (1,27)$$

Изменяйки ускоряващия потенциал, измерваме ъгъла, под който се наблюдава първия или въобще всеки фиксиран максимум. Оказало се, че произведението $\sqrt{U} \sin \theta$ действително остава постоянно, което потвърждава и справедливостта на хипотезата на дьо Бройл.

В *опитите на Томсон и Тартаковский* се изследва дифракция на електрони през поликристална пластинка с малка дебелина, поради което поглъщането на електрони е много по-малко в сравнение с това в опита на Девисон и Джермер. Отражението на електрони в този опит става не само от първата равнина, но и от вътрешните равнини. Условието за максимум (условието на Брег-Вулф) в този опит е $2d \sin \theta = n\lambda$ [4].

Дифракция на микрочастици (електрони, протони, неутрони, пиони и фотони) през един и два процепа може да се наблюдава чрез виртуална демонстрация с програмата Visual Quantum Mechanics [6]. Опитната постановка е показана на фиг.1.3.



фиг. 1.3.

3.3. Вероятностна интерпретация на вълните на дьо Бройл

За простота ще разгледаме дифракция на частици, притежаващи еднакви енергии и импулси на процепа. Тези частици пред процепа се описват с първични вълни на дьо Бройл $\Psi = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$ с определена честота $\omega = \frac{E}{\hbar}$

и вълнов вектор $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$, като оста Ox има посоката на движение на падащите частици. Ще предположим, че ширината на процепа е сравнима с дължината $\lambda = 2\pi\hbar/p$ на вълната на дьо Бройл. При дифракция, λ и големината на импулса на частицата p няма да се изменят.

Явлението **дифракция на микрочастици** през процеп, дължащо се на вълновите им свойства, се обяснява, съгласно принципа на Хюйгенс-Френел, с възникване на вторични вълни на дьо Бройл и тяхната интерференция. В резултат на нея, на екрана се получава известната от курса по оптика дифракционна картина. Тя може да се обясни, съпоставяйки на всяка преминаваща през процепа и попадаща на екрана частица с импулс \vec{p}' , вълна на дьо Бройл от вида

$$\Psi_{\vec{p}'}(\mathbf{r}, t) = C(\vec{p}') e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}' \cdot \mathbf{r})}, \quad (1,28)$$

където $|\vec{p}'| = |\vec{p}|$, а $C(\vec{p}')$ е амплитудата. Величината $|\Psi_{\vec{p}'}(\mathbf{r}, t)|^2 = |C(\vec{p}')|^2$ определя интензитета на тези вълни на дьо Бройл, който ще бъде различен за различните посоки на импулсите на частиците и, следователно, различен за различните точки на екрана.

Трябва да отбележим, че вълнови свойства притежава всяка отделна дифрактираща частица. Ако пропускаме през процепа, вместо голям брой частици, само по една частица, но така, че пълният брой частици, преминаващи през процепа, да остава същия, то дифракционната картина получена за времето на експозиция няма да се измени. Такъв опит е направен от Биберман, Сушкин и Фабрикант.

От дифракционната картина се вижда, че всеки от дифрактиращите електрони може да отиде само в тази посока, в която интензитетът $|C(\vec{p}')|^2 = |\Psi_{\vec{p}'}(\mathbf{r}, t)|^2$ на вълната на дьо Бройл (1,28) е различен от нула.

Интензитетът на вълната на дьо Бройл, равен на $|\Psi_{\vec{p}'}(\mathbf{r}, t)|^2$, в дадена точка от пространството, в даден момент време, е пропорционален на вероятността за намиране на частицата в тази точка в дадения момент време.

Трябва да отбележим, че $|C(\vec{p}')|^2$, очевидно, може да се интерпретира като величина, пропорционална на вероятността да получим \vec{p}' при измерване на импулса на дифрактиращата частица.

4. Вълнова функция

Когато частицата не е свободна, а се намира в някакво външно поле, може да се окаже невъзможно да се опишат вълновите й свойства с такива прости функции като вълната на дьо Бройл (1,17). Функция, която описва

вълновите свойства на несвободна частица, се нарича **вълнова функция**. Обикновено ще я означаваме с $\Psi(x, y, z; t)$. Естествено е да приемем, че квадратът на модула на вълновата функция $|\Psi(x, y, z; t)|^2$, както и в разгледания по горе случай на вълни на дьо Бройл, е пропорционален на вероятността да намерим частицата в точката (x, y, z) в дадения момент време t . Вероятността да намерим частицата в област с безкрайно малък обем dV , съдържаща точката (x, y, z) , е пропорционална на този обем. С точност до безкрайно малки величини от I порядък можем да считаме, че във всяка точка на тази “безкрайно малка” област, вълновата функция $\Psi(x, y, z; t)$ има една и съща стойност. Тогава вероятността dw частицата да се намира в момента време t в тази област (с обем dV) ще бъде пропорционална на $|\Psi|^2 dV$, откъдето следва, че

$$\frac{dw}{dV} = |\Psi(x, y, z; t)|^2 \quad (1,29)$$

може да се разглежда като **плътност на вероятността**, т.е. вероятността в момента време t частицата да се намира в точката (x, y, z) (коэффициентът на пропорционалност е положен равен на единица).

Съгласно теорията на вероятностите, необходимо е $\Psi(x, y, z; t)$ да удовлетворява определено **нормировъчно условие**. Това условие за нормировка се получава на основата на твърдението, че вероятността да намерим частицата в коя да е точка от пространството в даден момент е равна на единица, т.е. съгласно теоремата за събиране на вероятности

$$\|\Psi(x, y, z; t)\|^2 \equiv \int_{V_\infty} |\Psi(x, y, z; t)|^2 dV = 1, \quad (1,30)$$

където интегрирането е взето по цялото тримерно пространство.

Вълновите функции, удовлетворяващи условието за нормировка (1,30), се наричат **нормирани**.

Вероятността в момент време t частицата да се намира в област с обем V , ще бъде

$$w(V, t) = \int_V |\Psi(x, y, z; t)|^2 dV. \quad (1,31)$$

От условието за нормировка (1,30) се вижда, че нормираната вълнова функция е определена с точност до множителя $e^{i\alpha}$ (α е произволно реално число), понеже $|e^{i\alpha}| = 1$. Тази нееднозначност не се отразява на физичните резултати, понеже физичен смисъл има само $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ (Ψ^* е комплексно спрегнатата функция на Ψ). Вълновите функции Ψ и $C\Psi$, където C е произволна константа, описват едно и също състояние на частицата, понеже и

двете вълнови функции водят до едно и също пространствено разпределение на вероятността за присъствие на частицата в определена област.

В някои случаи интегралът в (1,30) е разходящ. Пример за това е вълната на дьо Бройл $\Psi = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}$, където Ψ_0 е константа. Действително, $|\Psi|^2 = |\Psi_0|^2$ и $\int_{V_\infty} |\Psi_0|^2 dV = \infty$. В тези случаи нормировката на вълновите функции се осъществява с помощта на функцията на Дирак (вж. Приложение 1).

От вероятностната трактовка на вълновата функция следва, че тя трябва да бъде **непрекъсната, еднозначна и крайна** в цялото пространство на изменение на нейните аргументи. Тези условия се наричат **стандартни**. Но на вълновата функция се налагат и други условия. Така например, ако се предположи, че в началния момент време вероятността за намиране на частицата в безкрайно отдалечената точка е равна на нула, то за описващата я вълнова функция Ψ се изисква и квадратична интегруемост (интегралът $\int_{V_\infty} |\Psi|^2 dV$ трябва да е краен). Тогава в безкрайност вълновата функция трябва да е равна на нула. Условия от този тип се наричат **гранични**.

Трябва да отбележим, че тези изисквания за вълновата функция имат място не само за случая, когато вълновата функция се определя в координатно представяне, но и във всички други представяния, в които в качеството на аргументи на вълновата функция са взети независими механични променливи, изменящи се непрекъснато.

Накрая да въведем понятието вълнова функция за система от N частици, взаимодействащи помежду си по произволен закон. На такава система съпоставяме вълнова функция от вида $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t)$, физическият смисъл на която се изразява в това, че величината

$$dw \sim |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t)|^2 dV_1 dV_2 \dots dV_N \quad (1,32)$$

ни дава вероятността за това в момент t първата частица да се намира в област с обем dV_1 , съдържаща точката с радиус-вектор \mathbf{r}_1 , втората частица – в област с обем dV_2 , съдържаща точката с радиус-вектор \mathbf{r}_2 и т.н.

Съгласно теоремата за събиране на вероятности, величината

$$dw_k = dV_k \int \dots \int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t)|^2 dV_1 \dots dV_{k-1} dV_{k+1} \dots dV_N \quad (1,33)$$

представлява вероятността в момент t k -тата частица да се намира в област с обем dV_k , съдържаща точката \mathbf{r}_k , при произволно разположение на останалите частици. Условието за нормировка на вълновата функция за система от N частици добива вида:

$$\|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t)\|^2 = \int \dots \int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t)|^2 dV_1 dV_2 \dots dV_N = 1. \quad (1,34)$$

5. Принцип за суперпозиция на състоянията

Принципът за суперпозиция на състоянията е един от най-важните принципи на квантовата механика. Може да го формулираме по следния начин: Ако микрочастица може да се намира в състояние, описвано с вълнова функция Ψ_1 , в което някаква физична величина F има стойност F_1 , а също така и в състояние Ψ_2 , в което F има стойност F_2 , то при известни условия, тя може да се намира в състояние Ψ , явяващо се линейна суперпозиция на Ψ_1 и Ψ_2 :

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2, \quad (1,35)$$

където C_1 и C_2 са произволни комплексни константи. (1,35) може да се обобщи за произволен брой суперпозиращи състояния:

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n. \quad (1,36)$$

При това $|C_n|^2$ представлява вероятността да получим при измерване на величината F в състояние Ψ , дадено от (1,36), стойност F_n .

Така може да се каже, че $|C_n|^2$ представлява относителното тегло на състоянието Ψ_n в суперпозицията (1,36).

При измерване на F в състояние (1,35) можем да получим както стойност F_1 (с вероятност $|C_1|^2$), така и F_2 (с вероятност $|C_2|^2$). Следователно, в състояние, което е суперпозиция на състояния, величината F вече няма определена числена стойност. Ако функциите Ψ_n , влизащи в суперпозицията (1,36), описват състояния, които безкрайно малко се отличават едно от друго, то сумата (1,36) се заменя с интеграл по непрекъснато изменящите се параметри, определящи тези състояния.

В качеството на пример на проявление на принципа за суперпозиция на състоянията, отново ще разгледаме опита по дифракция на монохроматичен сноп електрони през процеп (фиг.1.3), ширината на който е от порядъка на дължината на вълната на дьо Бройл, описваща всеки от тези електрони. След взаимодействие с процепа, електронът с различна вероятност може да попадне в различни точки от екрана, т.е. има вероятност за различни по посока импулси $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3, \dots$, не съвпадащи по посока с импулса \vec{p}_0 на електрона, движещ се равномерно преди процепа. Следователно, в пространството между процепа и екрана, електронът се намира в състояние, което може да се представи като суперпозиция на състояния с различни по посока импулси.

В заключение трябва да отбележим, че принципът за суперпозиция на състоянията, както се вижда от (1,36), може да има място само в случая, когато вълновите функции Ψ_1, Ψ_2, \dots , а също и вълновата функция Ψ , удовлетворяват линейно хомогенно диференциално уравнение, каквото се явява уравнението на Шрьодингер.